

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



THESE

Présentée pour l'obtention du diplôme de

DOCTORAT D'ÉTAT

En: PHYSIQUE

Spécialité: PHYSIQUE DES MATÉRIAUX

Par: **SMAIL Tania**

Sujet

Simulations numériques de phénomènes de transport
dans le silicium amorphe hydrogéné:
photoconductivité transitoire
et conductivité thermiquement stimulée

Soutenue le 03 novembre 2007 devant le jury composé de:

M.	DRIR Mahrez	Professeur (U.S.T.H.B.)	Président
M.	MOHAMMED-BRAHIM Tayeb	Professeur (Univ. de Rennes 1)	Directeur de thèse
M.	BENDIB Abderrezag	Professeur (U.S.T.H.B.)	Examineur
M.	CHAMI Ahmed Chafik	Professeur (U.S.T.H.B.)	Examineur
M.	DJELOUAH Hakim	Professeur (U.S.T.H.B.)	Examineur
M.	KECHOUANE Mohamed	Professeur (U.S.T.H.B.)	Examineur
M.	HADDADI Mourad	Professeur (E.N.P.)	Examineur

Remerciements

Le travail présenté dans cette thèse a été réalisé au sein de l'équipe "Couches Minces et Semiconducteurs" du Laboratoire de Physique des Matériaux de la Faculté de Physique de l'U.S.T.H.B. Cette équipe a été dirigée au début de ce travail par le professeur T. MOHAMMED-BRAHIM, puis par feu le professeur M. AOUCHER. Elle est actuellement dirigée par le professeur M. KECHOUANE.

J'exprime ma profonde reconnaissance au professeur T. MOHAMMED-BRAHIM qui m'a confié et dirigé ce travail.

Je tiens tout particulièrement à remercier, à titre posthume, le professeur M. AOUCHER pour les discussions fructueuses que nous avons pu avoir au sujet des interprétations physiques des résultats de ce travail. Ses encouragements et ses remarques ont largement contribué à l'aboutissement de cette thèse.

J'exprime ma profonde gratitude à monsieur M. DRIR, professeur à l'U.S.T.H.B., pour m'avoir fait l'honneur de présider le jury.

Que messieurs A. BENDIB, A. C. CHAMI, H. DJELOUAH, M. KECHOUANE, professeurs à l'U.S.T.H.B., ainsi que monsieur M. HADDADI, professeur à l'E.N.P., trouvent ici l'expression de ma respectueuse gratitude pour avoir accepté avec plaisir de faire partie de mon jury.

J'adresse mes sincères remerciements à tous les membres de l'équipe "Couches Minces et Semiconducteurs", en particulier à madame Abla RAHAL et à messieurs Rabah CHERFI et Abdelkrim FEDALA, pour leur aide généreuse, surtout durant la dernière ligne droite de la rédaction de cette thèse. Je leur en suis très reconnaissante.

Mes remerciements vont également à tous mes amis et collègues de la Faculté de Physique (U.S.T.H.B.) qui n'ont pas cessé de se soucier de l'état d'avancement de la rédaction de cette thèse.

Je ne saurais oublier de remercier tous les membres de l'administration de la Faculté de Physique pour leur serviabilité et leur amabilité.

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

Je dédie cette thèse à la mémoire de Moussa AOUCHER.

Table des matières

Chapitre A: Introduction	1
A.1. Généralités	1
A.2. Méthodes de caractérisation électrique.....	1
A.3. Sujet de la thèse	4
A.4. Organisation de la thèse.....	4
Chapitre B: Silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H): structure et densité d'états	6
B.1. Introduction.....	6
B.2. Rôle de l'hydrogène dans le a-Si:H.....	7
B.3. Méthodes de préparation du a-Si:H	8
B.4. Arrangement atomique.....	10
B.4.1. Ordre et désordre.....	10
B.4.2. Modèles atomiques de structure et simulations numériques.....	11
B.5. Densité d'états et propriétés électroniques	14
B.5.1. Structure de bandes et localisation: historique et état actuel	14
B.5.2. Modèle standard de densité d'états dans le a-Si:H	18
Chapitre C: Modèle et mise en équations	21
C.1. Introduction.....	21
C.2. Modélisation des échanges et du transport	21
C.3. Equations de transport dans les semiconducteurs	22
C.3.1. Cas général	22
C.3.1.a. Equations de Maxwell	23
C.3.1.b. Equation de Poisson	23
C.3.1.c. Equations des densités de courant	23
C.3.1.d. Equations de continuité	24
C.3.2. Cas du champ électrique uniforme et faible.....	25
C.4. Modélisation et équations dans le a-Si:H.....	25
C.4.1. Taux nets de capture des électrons et des trous	25
C.4.2. Les queues de bandes	26
C.4.3. Les liaisons pendantes.....	28

C.4.4. Les équations cinétiques des densités de charges sur les états localisés.....	30
C.4.5. Equation de neutralité	31
C.5. Equilibre thermodynamique.....	31
C.5.1. Conductivité d'obscurité.....	31
C.5.2. Coefficients d'émission	33
C.6. Régime permanent	34
C.6.1. Recombinaison sur les queues de bandes	35
C.6.2. Recombinaison sur les liaisons pendantes	37
C.6.3. Procédure de calcul de la photoconductivité stationnaire	38
C.7. Choix des paramètres.....	38
Chapitre D: La photoconductivité transitoire (PCD)	41
D.1. Introduction.....	41
D.2. Travaux antérieurs	42
D.3. Description de la méthode PCD.....	45
D.4. Mise en équations et simulation	46
D.4.1. Calcul du transitoire de la photoconductivité	46
D.4.2. Procédures de calcul	46
D.5. Résultats de la simulation numérique et discussion	51
D.5.1. Description générale	52
D.5.1.a. Transitoire de la photoconductivité (PCD)	52
D.5.1.b. Taux nets de capture	56
D.5.2. Effet des états localisés	61
D.5.2.a. La queue de bande de conduction (QBC)	61
D.5.2.b. La queue de bande de valence (QBV)	61
D.5.2.c. Les liaisons pendantes (LPs).....	63
D.5.3. Exploitation des résultats: comparaison avec le cas de la structure métal/a-Si:H.....	64
D.5.3.a. Cas du champ faible et du champ fort.....	64
D.5.3.b. Comparaison des résultats et discussion	65
D.6. Conclusion	68
Chapitre E: La conductivité thermiquement stimulée (TSC)	70
E.1. Introduction.....	70
E.2. Travaux antérieurs.....	71
E.3. Description de la méthode TSC.....	75

E.4. Mise en équations et simulation.....	77
E.4.1. Calcul de la conductivité TSC.....	77
E.4.2. Procédures de calcul.....	77
E.5. Résultats de la simulation numérique et discussion.....	79
E.5.1. Description générale.....	79
E.5.1.a. La conductivité thermiquement stimulée (TSC)	79
E.5.1.b. Taux nets de capture	83
E.5.2. Effets des états localisés.....	86
E.5.2.a. La queue de bande de conduction (QBC).....	86
E.5.2.b. La queue de bande de valence (QBV).....	88
E.5.2.c. Les liaisons pendantes (LPs)	89
E.5.3. Effets des paramètres du TSC	91
E.5.3.a. Influence des paramètres de départ: T_0 , G et t_{att}	91
E.5.3.b. La vitesse de chauffage β	93
E.6. Discussion et conclusion	95
Chapitre F: Récapitulatif et conclusions	97
F.1. Photoconductivité transitoire (PCD)	97
F.2. Conductivité thermiquement stimulée (TSC).....	98
F.3. Perspectives ultérieures	99
Liste des abréviations	100
Liste des symboles	101
Bibliographie	103
Publications relatives à cette thèse	111
Autres publications	112

Chapitre A

Introduction

A.1. Généralités

Le silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) est devenu durant ces dernières années un matériau très présent dans la technologie des transistors en couches minces [1] et dans celle des cellules solaires photovoltaïques [2-5]. En effet, le a-Si:H peut être déposé en couches minces sur de grandes surfaces, sur plusieurs types de substrats, à l'aide de technologies moins onéreuses que la production de silicium cristallin par exemple. De plus, la possibilité de doper le a-Si:H et son absorption efficace dans le domaine du rayonnement visible ont propulsé celui-ci vers l'avant dans la fabrication de cellules solaires.

Malgré ses nombreuses applications actuelles, le a-Si:H, ainsi que les alliages connexes, restent encore très étudiés. Une grande partie des travaux publiés se rapporte à l'étude des propriétés de transport de ce matériau qui, à la différence des semiconducteurs cristallins, ne sont pas encore complètement élucidées. A l'instar des semiconducteurs amorphes, l'interprétation des propriétés électriques est difficile à cause de l'existence d'une densité importante d'états localisés dans le gap. De plus, le a-Si:H présente un handicap à cause de ses propriétés métastables. Ses propriétés électroniques se dégradent sous un éclairage prolongé. Cet effet est connu sous le nom de l'effet Staebler-Wronski [6]. La dégradation est attribuée à une augmentation de la densité de défauts. Les effets induits par la lumière sont réversibles par recuit thermique. Malgré plusieurs travaux de recherche publiés sur les problèmes de stabilité du a-Si:H, l'origine de l'effet Staebler-Wronski reste encore non encore complètement élucidé.

A.2. Méthodes de caractérisation électrique

En raison de l'importance de la place qu'occupent les semiconducteurs dans le paysage technologique actuel, dans leurs applications dans les circuits électroniques intégrés et la conversion photovoltaïque notamment, plusieurs techniques de caractérisation électrique existent. Pour les semiconducteurs cristallins, de nombreuses méthodes classiques ainsi que leurs théories ont été mises au point et sont utilisées depuis longtemps (voir par ex. [7-9]). Ces techniques sont utilisées notamment pour déterminer les densités de défauts et des impuretés ainsi que les propriétés des états électroniques associés.

Contrairement à leurs homologues cristallins, dont la bande interdite ne présente en général qu'un nombre fini de niveaux d'énergie, les semiconducteurs amorphes, dont fait partie le a-Si:H, se caractérisent par une distribution complexe d'états localisés résultant du désordre structural et des nombreux défauts. Les méthodes de caractérisation électrique qui existaient déjà ont été tout naturellement appliquées au a-Si:H. Cependant, l'interprétation des résultats est difficile à cause de l'état amorphe (voir par exemple [10]). Ces techniques ont dû être adaptées aux semiconducteurs amorphes pour qu'elles soient exploitables. Parmi ces techniques, on peut citer les méthodes stationnaires (photoconductivité stationnaire, CPM: *Constant Photocurrent Method*, MPC: *Modulated Photocurrent*, mesures capacitives, etc.) et les méthodes transitoires (courant et capacité transitoires, courant et capacité thermiquement stimulés, etc.). Le a-Si:H a joué un rôle de précurseur dans la plupart des travaux publiés au sujet de l'adaptation de ces méthodes,

L'idéal est de trouver des expressions analytiques pour les grandeurs électriques mesurables pour pouvoir caractériser le semiconducteur amorphe. Malheureusement, cela est difficile à cause de la complexité de la distribution des états localisés du gap et leur diversité. Souvent, cela ne devient possible qu'en allégeant les équations de transport au prix d'hypothèses simplificatrices plus ou moins importantes.

Conjointement à ces approches analytiques, on trouve les travaux qui se basent sur le calcul des grandeurs électriques mesurables en essayant de faire le moins possible de suppositions. C'est la simulation numérique qui consiste à résoudre les équations de transport en tenant compte de toutes les transitions électroniques des porteurs entre les différents états d'énergie et de l'existence des deux types de porteurs: électrons et trous.

On peut citer principalement deux groupes de techniques de caractérisation électrique: celles qui explorent le matériau en volume pour atteindre directement des propriétés du matériau avec de simples mesures sur l'échantillon à l'aide de contacts ohmiques (géométrie coplanaire) et celles qui nécessitent d'engager le matériau à étudier dans une structure sandwich telle que la diode Schottky (contact métal/semiconducteur).

Lorsqu'un échantillon en configuration coplanaire est polarisé, le champ électrique qui règne dans le semiconducteur reste faible pour deux raisons: la distance entre les plots est relativement importante et les contacts entre les plots et le matériau sont ohmiques (il n'y a pas d'effet redresseur du fait de l'absence de toute courbure de bande). Le courant est le même à travers le contact et dans la masse du semiconducteur. Le transport n'est pas limité par l'interface métal/semiconducteur. La valeur du courant est contrôlée par les propriétés de volume du semiconducteur.

Dans la configuration Schottky, le contact métal/semiconducteur est redresseur et entraîne la courbure des bandes d'énergie suite à l'égalisation des niveaux de Fermi des deux matériaux. Il y a apparition d'une zone de charge d'espace. Ce type de contact

implique l'augmentation du champ électrique, d'autant plus que le redressement est important, et l'apparition de phénomènes de diffusion dus à la zone de charge d'espace. De plus, le champ électrique qui règne dans la jonction est accentué par les faibles dimensions des couches en présence dans la structure sandwich. Le champ électrique n'est pas uniforme dans une telle géométrie.

Pour la caractérisation de semiconducteurs présentant des densités d'états localisés complexes tel que le a-Si:H, de telles structures sont utilisées afin d'obtenir des champs électriques forts et de pouvoir simplifier les équations cinétiques dans la modélisation et la simulation des phénomènes de transport. En effet, dans ce cas on peut négliger la recombinaison des porteurs de charge, par exemple. Cependant la non-uniformité du champ électrique contribue à rendre plus ardues les simulations numériques qui nécessitent l'introduction de la variable espace dans les calculs. Ce type de traitement numérique nécessite la discrétisation de l'espace et l'introduction des conditions aux limites. La recherche des différentes solutions est difficile à cause des problèmes de convergence et de stabilité. Si en plus du maillage de l'espace, on introduit la variable temps pour simuler les phénomènes de relaxation, il faut ajouter la discrétisation temporelle. Pour une structure donnée, ce type de calcul est long en raison de l'augmentation des problèmes de convergence et de stabilité.

Pour la géométrie coplanaire, le champ électrique reste faible et les distorsions dues aux limites sont peu importantes car le contact est ohmique. Il n'y a pas d'effet de redressement ni d'apparition de zone de charge d'espace. La différence de potentiel extérieure appliquée entre les contacts est intégralement transmise au semiconducteur impliquant l'apparition d'un champ électrique uniforme. La distance entre les plots étant plus importante que celle généralement rencontrée dans une structure sandwich implique une valeur faible du champ électrique. De plus, l'absence de la zone de charge d'espace réduit considérablement les composantes du courant dues à la diffusion. Dans une telle géométrie, nous ne pouvons négliger aucune transition électronique dans les équations cinétiques. Cela complique la modélisation et la simulation des propriétés de transport dans le a-Si:H, surtout si on tient compte de la variable temporelle. Toutefois, on peut considérer dans une telle géométrie que le champ électrique faible comme étant quasiment nul et omettre les termes traduisant la diffusion des porteurs et les variables d'espace. Avec ces hypothèses, une telle simulation peut s'avérer très intéressante. En effet, le calcul des différentes concentrations en un point constitue une bonne approche pour décrire les propriétés électriques de volume du semiconducteur. Notre travail de simulation numérique se situe dans ce dernier cas.

A.3. Sujet de la thèse

Notre travail se situe dans le cadre de la compréhension des phénomènes de recombinaison et de piégeage dans le a-Si:H. Pour cela, nous présentons principalement deux simulations numériques: celle du transitoire de la photoconductivité (PCD: *Photoconductivity Decay*) et celle de la conductivité thermiquement stimulée (TSC: *Thermally Stimulated Conductivity*).

La simulation numérique de la PCD consiste à calculer la décroissance de la conductivité vers sa valeur d'équilibre en fonction du temps après l'interruption de l'éclairement. Le TSC fait partie de l'ensemble des études qui porte sur les phénomènes de relaxation stimulés thermiquement, c'est à dire des phénomènes de transport électronique observés lors d'un balayage en température [11,12]. Ces méthodes ont été mises en œuvre notamment pour avoir des informations sur les défauts et les impuretés des semiconducteurs et des isolants.

Toutes les transitions des électrons et des trous sont prises en compte dans les équations de transport. Les deux simulations sont réalisées dans le cas du champ électrique faible pour éviter les complications dues aux problèmes de la variable d'espace et des effets de bord, en plus du temps. Cela nous permet de faire des études systématiques pour identifier les rôles joués par les différents types d'états localisés dans le gap du a-Si:H dans les phénomènes de piégeage et de recombinaison. Nous montrons en outre qu'il faut être très prudent dans le choix des approches analytiques lesquelles ne sont possibles qu'au prix d'hypothèses simplificatrices.

A.4. Organisation de la thèse

Après ce chapitre A, introductif à l'étude présentée, le chapitre B est consacré à la présentation du a-Si:H en tant que semiconducteur amorphe. Ses propriétés structurales ainsi que ses propriétés électroniques sont passées en revue. Les principales méthodes de préparation de ce matériau sont rappelées brièvement. En particulier, le modèle standard de densité d'états généralement admis pour le a-Si:H y est décrit.

Les équations régissant les échanges et le transport des porteurs de charges nécessaires aux simulations numériques sont exposées en détail dans le chapitre C. La modélisation ayant permis l'écriture des différentes relations y est également décrite. La procédure de calcul de la photoconductivité stationnaire dans le a-Si:H est présentée.

Le chapitre D concerne la photoconductivité transitoire (PCD) après interruption de l'éclairement. Après un rapide retour aux travaux antérieurs sur les méthodes basées sur le transitoire du photocourant, nous donnons le principe de la méthode qui nous intéresse. La

description de la simulation numérique entreprise dans ce travail et la discussion de ses résultats sont présentées.

Le chapitre E est consacré à la conductivité thermiquement stimulée (TSC). Nous commençons par donner un récapitulatif sur les résultats antérieurs publiés sur le TSC dans le a-Si:H puis nous exposons le principe de la méthode. Les résultats de la simulation numérique du TSC sont alors décrits et discutés.

L'ensemble du travail présenté dans cette étude ainsi que les résultats les plus importants sont résumés dans le dernier chapitre F. Des conclusions et des perspectives du travail y sont également proposées.

Chapitre B

Silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H): structure et densité d'états

B.1. Introduction

Le silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) fait partie de la grande famille des semiconducteurs amorphes constituée principalement par les semiconducteurs à coordination tétraédrique et par les chalcogénures [13]. Ces matériaux ont actuellement des applications très variées tout en restant très étudiés par la communauté scientifique. Pour le a-Si:H en particulier, plusieurs applications industrielles ont vu le jour 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 également utilisé dans la photodétection utilisée dans la xérographie (photocopieurs, imprimantes, imagerie médicale...) et dans la fabrication des diodes électroluminescentes LED (*Light Emitting Diode*) en optoélectronique (voir par ex. la référence [14]). Dans la plupart de ces applications on retrouve la technologie nécessitant de grandes surfaces dans lesquelles le silicium cristallin (c-Si) n'est pas indiqué. Il est apparu également que le a-Si:H peut être déposé sur des substrats souples et non plans, offrant ainsi de larges possibilités d'applications. Cela explique en grande partie l'enthousiasme actuel pour l'étude des propriétés électroniques et mécaniques du silicium amorphe et de ses alliages [15]. Ces applications ont été possibles car, en dépit de son désordre structural et de ses défauts, on retrouve dans le a-Si:H le concept de bande interdite à l'origine des propriétés électroniques bien connues des semiconducteurs cristallins.

Le silicium amorphe a obtenu ses lettres de noblesse lorsqu'il a été hydrogéné puis depuis qu'il a été possible de le doper [16,17]. En effet, ses propriétés se sont nettement améliorées par l'introduction de l'hydrogène qui a réduit le nombre des liaisons insatisfaites et a rendu possible son dopage. Malgré ses nombreuses applications, le a-Si:H reste très étudié aujourd'hui pour améliorer ses propriétés électroniques et sa stabilité notamment. Citons particulièrement la conférence internationale biennale qui se tient régulièrement depuis 1965 [18] et qui présente les travaux récents principalement sur les propriétés électroniques et structurales, et sur les applications technologiques des semiconducteurs

amorphes et des matériaux connexes (semiconducteurs polycristallins, microcristallins et nanocristallins).

Dans ce qui suit, après un rappel sur le rôle joué par l'hydrogène dans le a-Si:H, nous donnerons un bref exposé sur les principales procédures de dépôt des échantillons de ce matériau. Nous décrirons ensuite le silicium amorphe (a-Si) du point de vue structural. Pour cela, nous rappèlerons les modèles atomiques historiques ainsi que les récentes simulations quantiques permettant d'explorer les propriétés structurales du silicium amorphe. La conséquence du désordre structural et des défauts sur les propriétés électroniques, à travers la structure de bandes du semiconducteur, est donnée. Après un rappel des modèles de densité d'états historiques, nous insisterons en particulier sur le modèle standard de densité d'états du a-Si:H utilisé dans la simulation numérique de ce travail.

B.2. Rôle de l'hydrogène dans le a-Si:H

Avant de décrire brièvement les principales méthodes de préparation du a-Si:H (§ B.3), intéressons-nous au rôle important joué par l'hydrogène lorsque ce dernier est incorporé dans la matrice de silicium amorphe.

Les fluctuations des valeurs des longueurs interatomiques et de celles des angles de liaison existant dans le a-Si provoquent des contraintes dans le réseau qui vont se solder par la rupture de liaisons de silicium et entraînant même la formation de cavités. Des mesures de résonance paramagnétique électronique (RPE) montrent l'existence de 10^{19} à 10^{20} liaisons brisées par cm^3 [19,20]. Ces défauts introduisent un nombre important de centres de recombinaison et de pièges pour les porteurs libres et qui limitent ainsi les propriétés électriques et empêchent toute propriété optoélectronique du a-Si. L'incorporation de l'hydrogène dans le silicium amorphe permet de saturer chimiquement une partie de ces liaisons pendantes: leur densité tombe à environ 10^{15} à 10^{16} cm^{-3} [21-23] dans les échantillons de a-Si:H de bonne qualité électronique. Des analyses expérimentales montrent que la concentration totale d'hydrogène (10 à 15 %) dans les échantillons de a-Si:H est supérieure à celle nécessaire pour passiver toutes les liaisons pendantes. Ce n'est pas tous les atomes d'hydrogène qui se lient aux liaisons pendantes. L'hydrogène diffuse à l'intérieur du matériau sous forme atomique ou sous forme moléculaire dont une partie sature des liaisons pendantes et une autre partie va rester à l'intérieur. Ces phénomènes sont régis par les mécanismes de diffusion de l'hydrogène qui restent non encore complètement élucidés et sont même étudiés à l'aide de simulations quantiques (voir § B.4.2).

Une partie de l'hydrogène réagit avec les atomes de silicium (Si) entraînant des ruptures de liaisons Si—Si qui sont fortement distordues, donc fragiles, puis forme d'autres groupes polyhydrides comme SiH_2 ou SiH_3 . L'hydrogène entraîne également une relaxation du réseau par un relâchement des contraintes de la liaison tétraédrique et permet ainsi une diminution du désordre. L'hydrogène joue également un rôle positif dans certains mécanismes microscopiques tels que la métastabilité photoinduite et thermique [24,25]. D'autre part, l'incorporation de l'hydrogène augmente la largeur de la bande interdite [26,27].

B.3. Méthodes de préparation du a-Si:H

L'élaboration de a-Si:H en couches minces se fait par des techniques de dépôt à partir d'un gaz ou d'une cible contenant du silicium en présence d'hydrogène. Les échantillons déposés présentent généralement différents types de défauts (désordre structural, liaisons non satisfaites, cavités...). En effet, la préparation de ce type de semiconducteur se fait dans un milieu fortement affecté par les conditions de préparation qui rend les propriétés des échantillons en couches minces tributaires de la méthode et des conditions de dépôt. Les techniques de dépôt les plus répandues se font dans des enceintes sous vide où le silicium en couche mince est déposé graduellement sur un substrat spécifique choisi conformément à l'utilisation prévue pour l'échantillon. Ces méthodes d'élaboration sont relativement simples et moins onéreuses par rapport à celles destinées à la croissance d'un lingot monocristallin de silicium utilisé en microélectronique. Ces techniques de dépôt permettent également d'obtenir le matériau sur de grandes surfaces. Toutefois, les échantillons ainsi obtenus présentent un désordre structural certain et des propriétés métastables. Citons l'effet Staebler-Wronski [6] qui est caractérisé par la création de liaisons pendantes suite à une illumination prolongée du matériau.

Les techniques de dépôt se classent en deux groupes principaux. On peut distinguer les méthodes physiques utilisant un matériau de silicium et les méthodes chimiques utilisant la décomposition d'un gaz contenant du silicium.

Parmi les plus anciennes, citons l'évaporation sous vide (PVD: *Physical Vapour Deposition*) qui consiste à évaporer une source de silicium, solide ou sous forme de granules, de façon thermique par un faisceau d'électrons [28] ou par un faisceau laser de grande puissance [29]. Les couches minces sont déposées progressivement sur un substrat chauffé. L'incorporation de l'hydrogène se fait pendant le dépôt par décomposition thermique ou par plasma d'hydrogène moléculaire [30] ou par une posthydrogénation en exposant l'échantillon à un plasma d'hydrogène [31].

Une autre méthode, voisine de celle-ci, est la pulvérisation cathodique réactive. Elle consiste à pulvériser des atomes du matériau en bombardant une cible de silicium (cristallin ou polycristallin) à l'aide d'atomes d'argon accélérés en continu ou en RF sous

plasma d'un mélange d'argon et d'hydrogène. La pulvérisation peut être assistée d'un champ magnétique pour augmenter la vitesse de dépôt. La méthode de pulvérisation en continu assistée par un champ magnétique (*DC Magnetron Sputtering*) [27,32] a été développée au sein de notre équipe de recherche "Couches Minces et Semiconducteurs" pour le faible coût de sa mise en œuvre et a permis de mener plusieurs études fondamentales sur le a-Si:H et sur des matériaux annexes tel que le nitrure de silicium amorphe hydrogéné (a-SiN_x:H) [33].

La pulvérisation RF (*RF Magnetron Sputtering*) est plus utilisée pour les matériaux diélectriques. Elle reste mal indiquée pour le a-Si:H à cause du phénomène de repulvérisation qui augmente les défauts de structure pendant la préparation de la couche [34].

Dans l'autre catégorie de méthodes, on trouve celle basée sur la décomposition chimique en phase vapeur (CVD: *Chemical Vapour Deposition*) d'un hydruure de silicium (silane par ex.) qui est réalisée à l'aide d'un plasma (PECVD: *Plasma Enhanced CVD*, ou GDCVD: *Glow Discharge-CVD*) [35]. La décomposition des gaz se fait par une décharge lumineuse à l'aide d'un champ électrique DC ou RF et le dépôt se forme sur le substrat maintenu à une température constante relativement faible. La décomposition des gaz peut se faire aussi thermiquement, sans le plasma (HWCVD: *Hot Wire CVD* par ex.) [36].

Les couches obtenues à l'aide de la technique PECVD se sont révélées être de bonne qualité électronique et présentent une bonne homogénéité. Cette méthode est la plus employée dans l'industrie pour les applications actuelles. La variante la plus classique et la plus utilisée est celle à couplage capacitif en radiofréquence (RF-PECVD) à 13,56 MHz. L'utilisation de fréquences plus élevées améliore la qualité des échantillons [37].

Il arrive souvent que les méthodes citées ci-dessus soient adaptées pour améliorer la vitesse de dépôt ou la qualité des échantillons par exemple. Les paramètres microscopiques dépendent donc de la méthode et des conditions de dépôt telles que essentiellement la température, les pressions des gaz utilisés et la vitesse de dépôt. Pour un dispositif de préparation donné, il y a en définitive autant d'échantillons de a-Si:H obtenus que de groupes de paramètres possibles de dépôt. Comme nous le verrons ci-dessous, à travers la densité d'états et les propriétés électroniques, ces paramètres sont nombreux et pas toujours faciles à évaluer. Ceci nécessite donc en phase immédiate de post préparation une série de méthodes de caractérisation nécessaires et spécifiques pour accéder aux paramètres microscopiques les plus importants de l'échantillon élaboré. Parmi ces méthodes citons principalement les mesures de la conductivité électrique, de la photoconductivité, du spectre de diffusion Raman, du coefficient d'absorption optique et du spectre d'absorption infrarouge. Si la théorie pour l'interprétation de ces méthodes de caractérisation est bien

établie pour les semiconducteurs cristallins, elle doivent être adaptées et revues pour les exploiter dans le a-Si:H.

B.4. Arrangement atomique

B.4.1. Ordre et désordre

Le silicium cristallin est un semiconducteur covalent à coordination tétraédrique. Sa maille fondamentale, de type diamant, se répète périodiquement dans les trois directions de l'espace (voir figure B.1). Toutes les longueurs et les angles des liaisons sont quasiment identiques (2.35 Å et 109°28'). Dans ce type de structure, chaque atome de silicium est directement lié à quatre autres atomes disposés autour de lui aux sommets d'un tétraèdre.

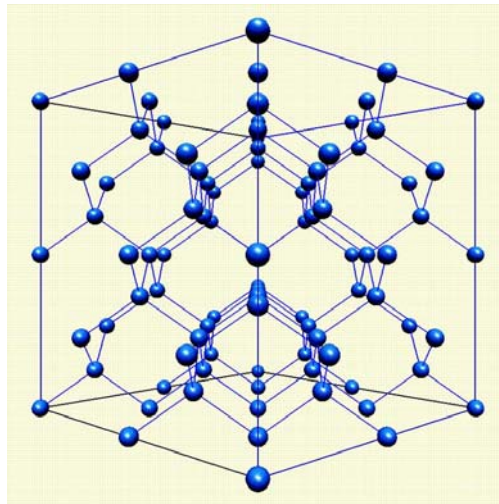


Figure B.1: Maille diamant du silicium cristallin montrant l'arrangement tétraédrique régulier.

Le silicium amorphe, comme son nom l'indique, ne peut être décrit par un réseau cristallin périodique. Sa structure est désordonnée. La figure B.2 montre schématiquement l'arrangement atomique dans la structure du a-Si et du a-Si:H. Néanmoins, l'ordre à courte distance entre plus proches voisins, dicté par la stéréochimie de la liaison covalente entre les atomes de silicium, est maintenu à part de légères variations des distances interatomiques et des distorsions des angles de liaison et des angles diédraux. Ceci a été vérifié expérimentalement par l'analyse des fonctions de distribution radiale (RDF: *Radial Distribution Function*) déterminées à partir d'expériences de diffraction sur du silicium amorphe pur [38-40]. La RDF donne la densité de probabilité de trouver une paire d'atomes à la distance r d'un atome de référence.

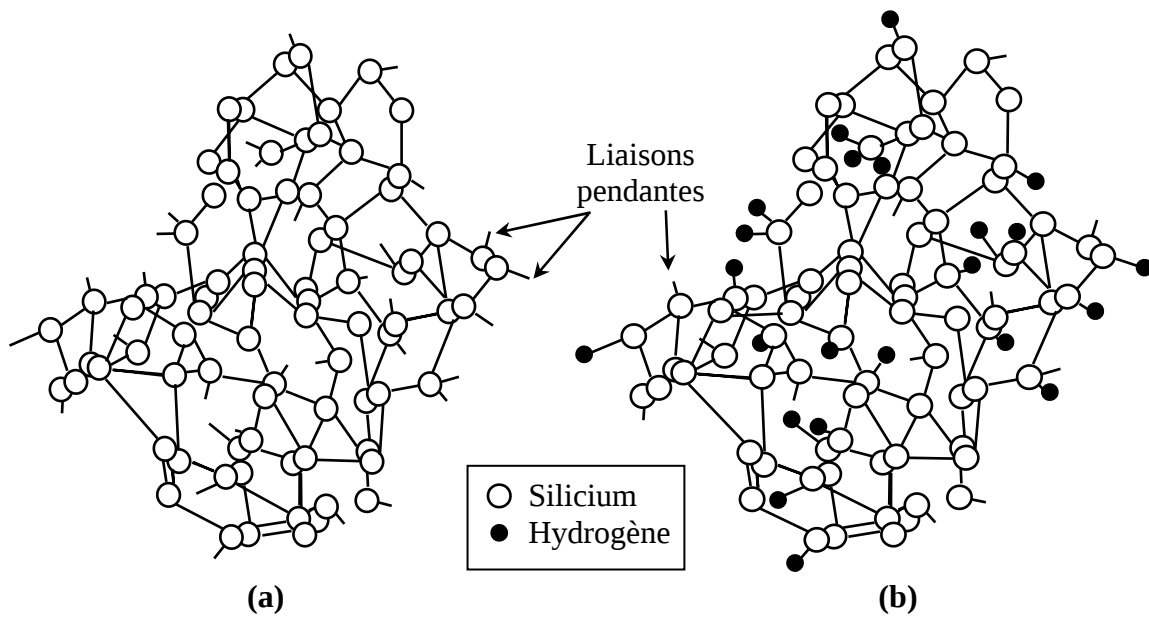


Figure B.2: Illustration schématique de la structure du a-Si (a) et de celle du a-Si:H (b) montrant les liaisons pendantes.

La figure B.3 permet de comparer entre elles les RDF du Si cristallin idéal parfait (a), du Si cristallin sous forme de poudre (b) et du silicium amorphe (a). On retrouve les quatre plus proches voisins pour chaque atome, nombre donné par l'aire sous le premier pic des figures B.3(b) et B.3(c). La distance de liaison dans le silicium amorphe est peu différente de celle dans la phase cristalline. Une rupture franche de la périodicité est bien visible à partir des troisièmes plus proches voisins [Fig. B.3(c)].

B.4.2. Modèles atomiques de structure et simulations numériques

Plusieurs édifices atomiques ont été construits en laboratoire, d'abord à la main ensuite à l'aide d'ordinateurs, pour proposer des arrangements atomiques possibles pour les semiconducteurs amorphes tétraédriques. Tous ces modèles prennent comme élément de base la cellule tétraédrique. Citons en premier lieu les anciens modèles historiques dont le modèle des microcristallites [41,42] et le modèle d'amorphon [43] qui ont été vite abandonnés car ils n'ont pas pu expliquer la majorité des résultats expérimentaux déjà observés à l'époque. En 1971, Polk [44] a construit son premier édifice aléatoire continu (CRN: *Continum Random Network*) historique avec 440 atomes mais qui ne comporte pas de liaisons libres à l'intérieur du volume. En effet, pour l'amorphe réel on s'attend à ce qu'il y ait des liaisons non satisfaites en volume à cause de l'augmentation des distorsions angulaires dans l'empilement des atomes à grande échelle. Cependant, contrairement à ses prédécesseurs, ce modèle rend mieux compte des observations expérimentales. Le modèle

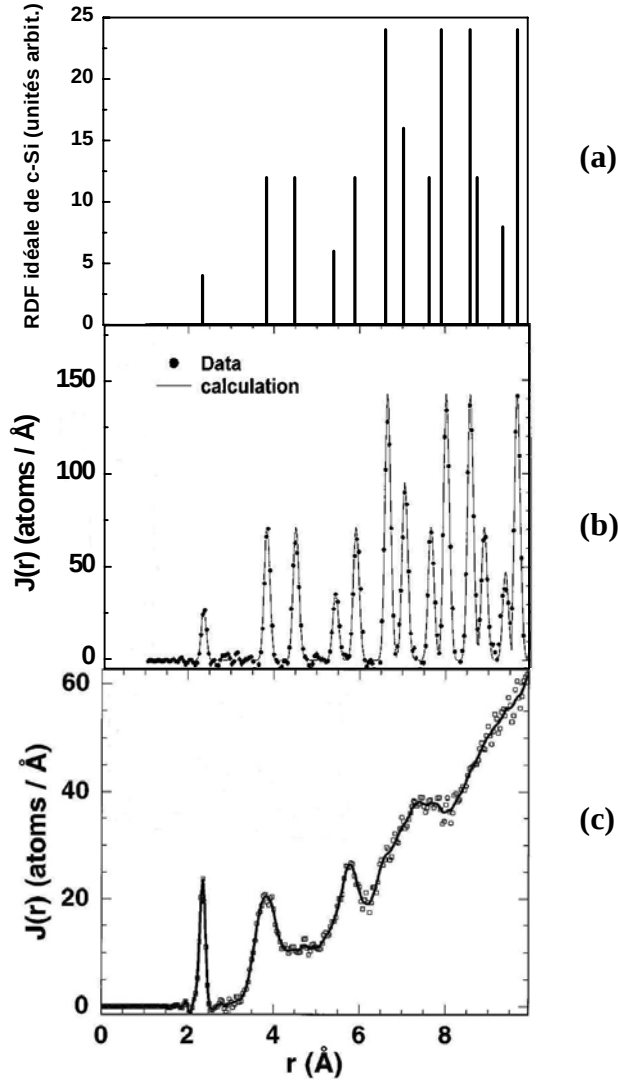


Figure B.3: Comparaison des RDFs: silicium cristallin idéal (a), silicium cristallin en poudre [40] (b) et silicium amorphe pur [39] (c).

atomique CRN constitue souvent, jusqu'à nos jours, le point de départ d'un grand nombre de modélisations structurales du a-Si pour entreprendre des simulations numériques. Toutefois, des ajustements nécessaires y sont apportés pour tenir compte de la réalité du silicium amorphe. Des défauts sont adjoints tels que principalement les liaisons pendantes, les paracristallites et les cavités.

Plus récemment, depuis les applications technologiques intéressantes du silicium amorphe sous sa forme hydrogénée, de nombreux théoriciens de l'état solide spécialisés dans les simulations numériques des matériaux et de leur prédiction s'intéressent à la modélisation du silicium amorphe [45]. Le a-Si est souvent choisi pour son caractère élémentaire et des études sur le a-Si:H sont également entreprises. Il existe dans la littérature un nombre important de résultats expérimentaux sur ces semiconducteurs amorphes permettant ainsi aux théoriciens de vérifier leurs différents modèles. En effet,

pour comprendre et explorer le matériau à l'échelle atomique, il est nécessaire de passer par la simulation numérique et en particulier la simulation quantique. Il faut rappeler que cette branche de la physique théorique est en pleine expansion aujourd'hui pour l'étude des matériaux existants et dans la prédiction de matériaux nouveaux et cela grâce aux moyens informatiques actuels.

Les méthodes de simulation numérique les plus utilisées et les plus rapportées par la littérature sont les méthodes de Monte Carlo, directe et inverse, et les méthodes de dynamique moléculaire, classique et *ab initio*. De nombreux travaux s'y rapportant existent pour le a-Si et le a-Si:H. Certains des codes de calcul des différents algorithmes, déjà développés pour les solides en général, ont été adaptés au a-Si et au a-Si:H. Nous présentons ces méthodes brièvement dans ce qui suit ainsi que les travaux les plus marquants et les plus récents sur le sujet.

La méthode de Monte Carlo (MC) est basée sur l'algorithme de Metropolis [46]. La position des atomes est ajustée jusqu'à obtention de la configuration la plus stable. Le potentiel de Keating est souvent utilisé. Wooten *et al.* [47] ont développé la méthode MC pour le a-Si et le a-Ge usuellement appelée la méthode "WWW". Cet algorithme a été développé par Vink *et al.* [48] pour le a-Si et par Nakhmanson *et al.* [49] pour son modèle du a-Si paracristallin (un matériau amorphe qui contient des grains cristallins, de taille inférieure à 3 nm, encastés dans une matrice désordonnée). Cette méthode a été étendue au a-Si:H par Mousseau *et al.* [50].

La méthode de Monte Carlo inverse (RMC: *Reverse Monte Carlo*) a été originellement développée par Mc Greevy et Pusztai [51,52] pour les liquides et les verres. La méthode RMC est une technique qui permet de générer des structures en se basant sur des résultats expérimentaux. La position des différents atomes est ajustée jusqu'à obtention des grandeurs mesurées comme la RDF par exemple. Cette méthode a été mise en oeuvre par Biswas *et al.* [53] pour modéliser la structure du a-Si pur. La RDF calculée par ce modèle a été validée par celle obtenue expérimentalement par Laaziri *et al.* [39].

Une simulation basée sur la méthode de dynamique moléculaire (MD: *Molecular Dynamics*) classique consiste à résoudre les équations de mouvement de Newton de l'ensemble des atomes constituant le matériau. Un potentiel d'interaction fixé empiriquement est utilisé limitant ainsi la portée de la méthode. Une telle simulation classique a été utilisée par Nakhmanson *et al.* dans leur modélisation du a-Si:H sans et avec lacunes [54,55].

Dans les méthodes *ab initio*, les potentiels sont calculés d'une manière auto cohérente (*self-consistent*) à partir des densités électroniques. La théorie de la densité électronique fonctionnelle (DFT: *Density Functionnal Theory*) [56] y est utilisée pour contourner le difficile problème à N-corps. La DFT permet de remplacer la variable fonction d'onde dans

les équations par la densité électronique plus facilement manipulable [57]. Des approximations de cette densité ont été développées dans le cadre de la théorie de la physique du solide dont les plus usuelles sont l'approximation de la densité locale (LDA: *Local Density Approximation*) et l'approximation de la densité de spin locale (LSDA: *Local Spin Density Approximation*). Ces différentes approches de la méthode MD *ab initio* ont été appliquées à l'étude des propriétés structurales, dynamiques et électroniques du a-Si pur [58] et du a-Si:H [59,60].

Les approches quantiques *ab initio* restent limitées à cause de leur coût informatique. La durée du calcul augmente avec le nombre d'atomes de la structure de départ pour réaliser la simulation. Le nombre d'atomes pris généralement en compte ne dépasse pas quelques centaines. Ce nombre restreint ne permet pas de simuler le a-Si et le a-Si:H correctement car insuffisant pour pouvoir introduire les défauts dans des proportions réelles et pouvoir espérer obtenir une densité d'états réaliste. Pour ces raisons, la méthode MD classique reste utilisée avec un choix judicieux du potentiel empirique [54,55].

Les méthodes numériques citées plus haut sont également utilisées pour comprendre l'état des liaisons de l'hydrogène dans le a-Si:H [61], les mécanismes de sa diffusion [62] ainsi que la présence d'une partie sous forme moléculaire dans les lacunes [63].

B.5. Densité d'états et propriétés électroniques

Les propriétés électroniques d'un semiconducteur sont contrôlées par la distribution de la densité d'états qui définit le nombre d'états permis pour les électrons par unité de volume et par unité d'énergie. Le désordre et les défauts existant dans le silicium amorphe affectent grandement la structure de bandes d'énergie par rapport au silicium cristallin. Après quelques rappels bibliographiques, nous présentons en détail le modèle standard de densité d'états du a-Si:H que nous utilisons dans les simulations présentées dans ce travail.

B.5.1. Structure de bandes et localisation: historique et état actuel

Dans un semiconducteur cristallin, le comportement de l'électron libre est décrit, dans le modèle de Kronig-Penney, par la fonction périodique de Bloch. Ses énergies permises se présentent sous forme de bandes d'états étendus séparées par des bandes interdites dans l'espace des phases [64].

En l'absence d'ordre à longue distance, une telle structure de bandes existe-t-elle? En utilisant la théorie de l'approximation des liaisons fortes et les potentiels d'interaction entre plus proches voisins, il a été montré [65] que la structure de bandes est globalement conservée et qu'il est possible de définir des bandes d'énergies permises séparées par des bandes interdites. C'est l'ordre à courte distance subsistant qui permet de considérer dans les semiconducteurs amorphes l'existence d'une bande de valence et d'une bande de

conduction. Ces deux bandes proviennent des états liants et anti-liants, respectivement, de l'hybridation sp^3 du silicium comme pour son homologue cristallin.

Le désordre dans la structure qui résulte des fluctuations des longueurs de liaison, des angles de liaison et des angles diédraux affecte les états d'énergie liants et anti-liants. Cela se manifeste par une densité d'états localisés qui forment des prolongements aux deux bandes d'états étendus sous forme de deux queues de bandes à l'intérieur de la bande interdite. Cette notion de queues de bandes a rendu difficile la détermination exacte d'une bande interdite séparant les états de la bande de valence et ceux de la bande de conduction. L'utilisation de l'arrangement non périodique des puits de potentiel de la figure B.4 et l'approximation des liaisons fortes a permis à Anderson [66] de montrer que tous les états de bande sont localisés si le rapport de l'amplitude des fluctuations de potentiel V_0 sur la largeur de bande B dépasse une certaine valeur critique. Dans les semiconducteurs amorphes cependant, ce rapport est faible. Les états d'énergie ne seraient alors pas localisés dans ces semiconducteurs? Mott [67] a montré que même si le rapport V_0/B est inférieur à la valeur critique, les états situés en bords de bandes sont localisés. La mobilité électronique dans les états localisés est inférieure de quelques ordres de grandeur à celle des électrons dans les états étendus [68,69]. L'énergie critique qui marque cette transition est appelée seuil de mobilité pour chaque bande. Ces énergies, E_v et E_c , permettent de délimiter ainsi un gap de mobilité pour les semiconducteurs amorphes au lieu d'une bande

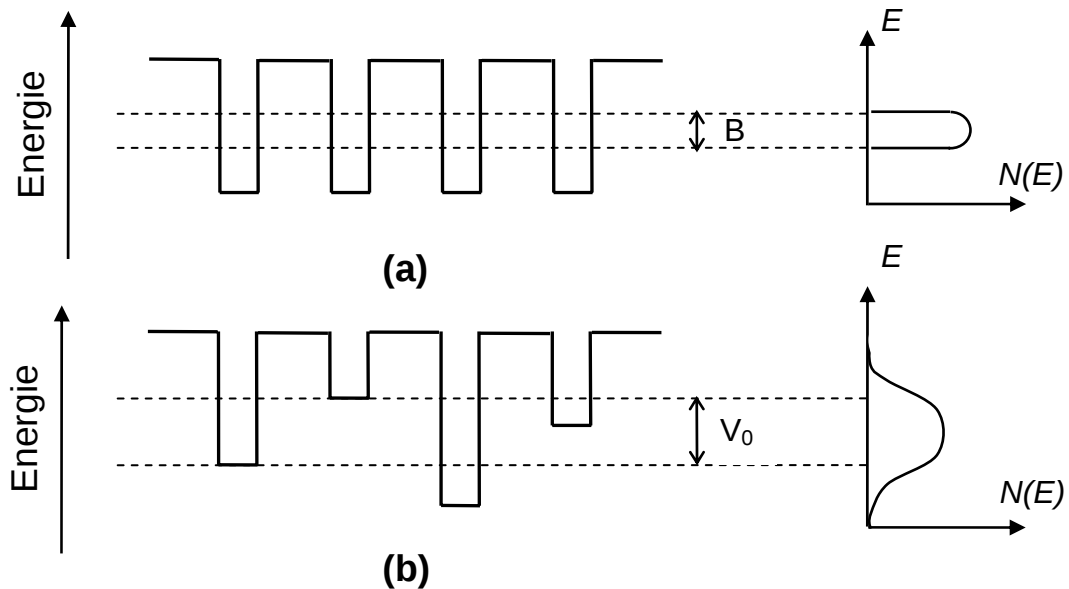


Figure B.4: Potentiel périodique utilisé dans le théorème de Bloch (a) et potentiel aléatoire du modèle d'Anderson pour une structure amorphe (b). Les allures des densités d'états $N(E)$ respectives sont également représentées.

interdite. Il est à noter que dans les semiconducteurs amorphes à coordination tétraédrique la largeur de ce gap de mobilité est légèrement supérieure à la valeur du gap optique accessible expérimentalement à partir de mesures d'absorption. La différence est de quelques dizaines de meV [70]. Cette différence a été mise en évidence récemment par une simulation numérique du coefficient d'absorption dans le a-Si:H en utilisant les méthodes de Tauc [71] et de Cody [72] pour la détermination du gap optique [73]. Sa largeur est très sensible au désordre dans le matériau. Une valeur expérimentale typique rencontrée dans les échantillons de a-Si:H de bonne qualité électronique est 1.8 eV [35]. Les autres valeurs se situent autour de cette dernière à plus ou moins quelques dixièmes d'eV.

Le modèle historique de densité d'états de Mott-C.F.O. (Cohen-Fritzsche-Ovshinsky) [69] a été alors présenté en se basant sur ces notions. Les états de la queue de bande de valence et de la queue de bande de conduction jouent des rôles de donneurs et d'accepteurs, respectivement. Le recouvrement de ces deux queues de bande fixe le niveau de Fermi [Fig. B.5(a)].

Les défauts qu'on peut rencontrer tels que les liaisons insatisfaites ou pendantes, les impuretés ou des cavités entraînent, comme pour les semiconducteurs cristallin, l'apparition de niveaux d'énergie permis partout et en particulier dans la bande interdite. La figure B.5(b) représente le diagramme de la densité d'états par unité d'énergie introduit pour la première fois par Mott et Davis pour les semiconducteurs amorphes [74,75]. Les défauts profonds y sont représentés en plus des deux queues de bandes. Ils se manifestent par l'apparition de deux pics jumeaux assimilés à des états accepteurs (E_x) et donneurs (E_y). Le niveau de Fermi est "épinglé" entre ces deux pics.

Les liaisons pendantes constituent les défauts typiques existant dans a-Si et le a-Si:H à l'instar de tous les semiconducteurs amorphes à coordination tétraédrique. Elles sont à l'origine des niveaux profonds apparaissant dans ce type de semiconducteurs. Mott a introduit assez tôt la notion de liaisons pendantes à 3 états de charges possibles [76]: elle peut être vide et positive (centre D^+), occupée par un électron et neutre (D^0) ou occupée par deux électrons et négative (centre D^-). Elle introduit deux niveaux d'énergie corrélés. Les états D^0 et D^+ donnent le pic en E_y et l'état D^- le pic en $E_x (= E_y + U)$, U étant l'énergie de corrélation dite énergie de Hubbard [Fig. B.5(b)]. Elle a été introduite pour la première fois par Anderson [77]. Elle résulte de la somme d'un terme de répulsion coulombienne et d'un terme négatif provenant des diverses interactions avec le réseau. Il est communément admis que U est négative pour les verres de chalcogénures [78] et positive pour les semiconducteurs à liaison tétraédrique [79]. Le désordre, et particulièrement les champs aléatoires régnant dans les différentes cavités, entraînent indéniablement un étalement des niveaux d'énergie pour les liaisons pendantes. Pour le a-Si:H, l'énergie de corrélation n'est

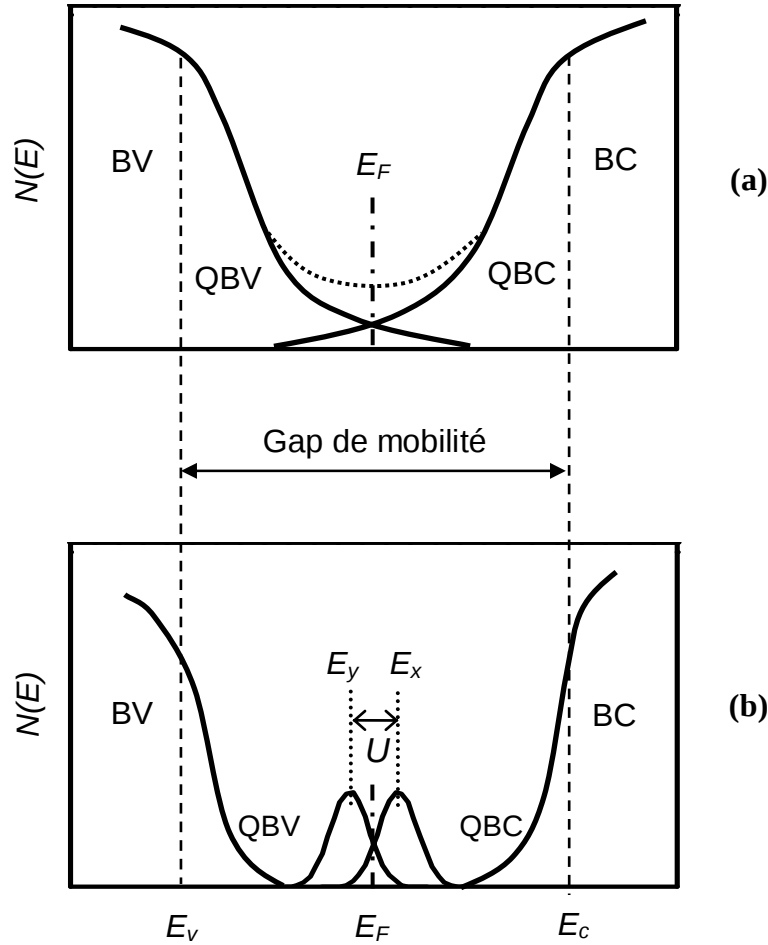


Figure B.5: Densité d'états $N(E)$ proposée dans le modèle Mott-CFO **(a)** et dans le modèle de Mott et Davis **(b)**. Le gap de mobilité, séparant les états localisés des états étendus de la bande de valence (BV) et de la bande de conduction (BC), est représenté. Les états dus aux liaisons pendantes sont également reportés en **(b)** (voir texte pour plus de détails).

pas connue exactement, toutefois des mesures de densité de spin montrent que U est positive [80] et vaut entre 0.2 et 0.4 eV [10].

Plus récemment, des calculs numériques sont utilisés pour déterminer la densité d'états en fonction de l'énergie dans le silicium amorphe dans lesquels les méthodes citées dans la section B.4.2 sont utilisées [48,49,81,82]. A titre d'illustration, nous avons reporté sur la figure B.6 une densité d'états électroniques (EDOS) calculée pour une structure CRN contenant 10000 atomes de silicium, générée par ordinateur à l'aide de l'algorithme WWW [48] et en utilisant la méthode des liaisons fortes *ab initio* [83]. On remarque l'absence d'états dans le gap qui vaut dans ce calcul 1.3 eV. L'idéalisation de la structure et l'utilisation d'un potentiel empirique sont responsables de ces résultats irréalistes. L'introduction de défauts dans le calcul de structure nécessite l'utilisation des méthodes

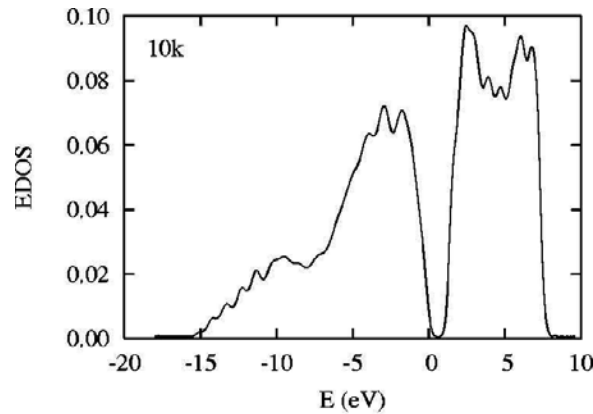


Figure B.6: Densités d'états électroniques (EDOS) calculée pour une structure CRN de a-Si, générée par ordinateur, contenant 10000 atomes [48].

quantiques *ab initio* très coûteuses en temps de calcul. En effet, pour introduire l'hydrogène et les différents défauts dans des proportions réalistes, il faudrait générer des structures contenant un nombre très important d'atomes.

Actuellement, le modèle de densité d'états le plus couramment utilisé est le modèle dit "standard" proche du modèle historique de Mott et Davis et conforté par de nombreux résultats expérimentaux. Toutefois, il existe à l'état actuel d'autres modèles plus complexes tel que, par exemple, le modèle dit "réservoir de défauts" ou "*defect pool model*" dans lequel plusieurs pics d'états localisés sont associés aux liaisons pendantes [84,85].

B.5.2. Modèle standard de densité d'états dans le a-Si:H

Le modèle standard de densité d'états est souvent utilisé dans les simulations des propriétés électroniques dans le a-Si:H (voir par ex. [10]). La figure B.7(a) représente cette densité, en échelle logarithmique, en fonction de l'énergie. Dans ce modèle, il est d'usage de tenir compte des états délocalisés ou étendus de la bande de conduction (BC) et de la bande de valence (BV), et des états localisés dans le gap de mobilité, parfois appelé aussi bande interdite par analogie aux semiconducteurs cristallins. Les états localisés consistent en deux queues de bandes de forme exponentielles: la queue de bande de conduction (QBC) et la queue de bande de valence (QBV), et une paire de pics distribués sous forme de deux gaussiennes d'états corrélés dus aux liaisons pendantes du silicium.

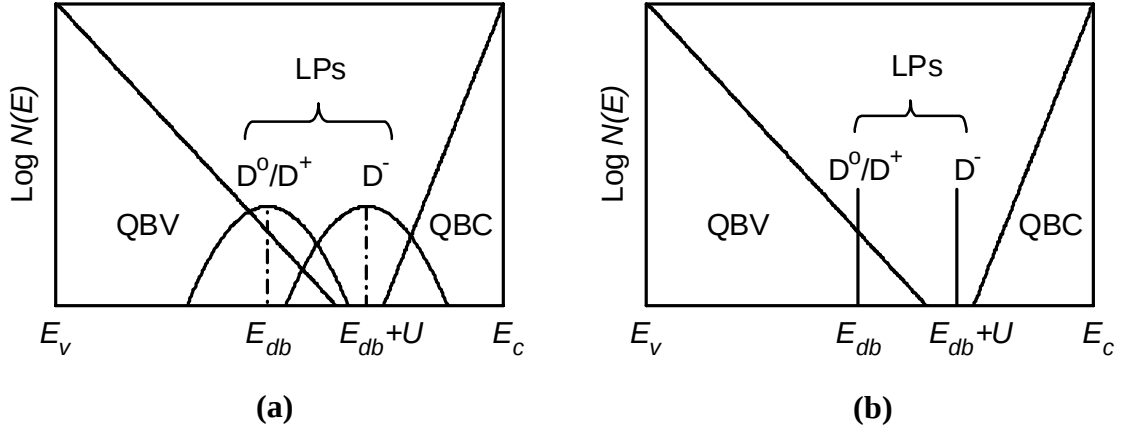


Figure B.7: Diagramme schématique de la densité d'états localisés standard $N(E)$ dans le gap de mobilité montrant la queue de bande de conduction (QBC), la queue de bande de valence (QBV) et les états de liaisons pendantes (LPs) distribués en gaussiennes **(a)** et discrets **(b)**.

Un niveau de la QBC est neutre lorsqu'il est vide et chargé négativement lorsqu'il est occupé par un électron. Un niveau de la QBV est neutre lorsqu'il est occupé par un électron et chargé positivement lorsqu'il est vide. Dans notre modèle, nous prenons les densités d'états par unité d'énergie E des deux queues de bande entièrement sous forme d'exponentielles [86,87] et s'écrivent, pour la QBC et la QBV, respectivement* :

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

$$N_{vt}(E) = N_{vt}^0 \exp \frac{E_v - E}{k_B T_v} \quad (\text{B.1.b})$$

où k_B est la constante de Boltzmann, T_c et T_v sont les températures caractéristiques des pentes de la QBC et la QBV respectivement, et N_{ct}^0 et N_{vt}^0 sont les densités d'états effectives aux seuils de mobilité E_c et E_v respectivement. Des mesures expérimentales montrent que la QBV est toujours plus large en énergie que la QBC. Les valeurs généralement trouvées pour les énergies caractéristiques dans différents échantillons de a-Si:H varient entre 25 et 60 meV pour $k_B T_c$ et entre 45 et 90 meV pour $k_B T_v$.

Fritzsche [88] a montré par des calculs basés sur la théorie des liaisons fortes que les états anti-liants et liants sont influencés différemment par le désordre structural du

* Les indices "ct" et "vt" correspondent aux abréviations des anglicismes "conduction-band tail" et "valence-band tail" qui signifient "queue de bande de conduction" et "queue de bande de valence" respectivement.

matériau. En effet, la fonction d'onde de la QBC étant plus étendue que celle de la QBV, elle est moins affectée par les fluctuations spatiales engendrées par les liaisons faibles. Cette dissymétrie dans la distribution des états localisés influence la position du niveau de Fermi à l'équilibre dans le matériau a-Si:H non dopé. Ce niveau est en général plus proche du bord supérieur du gap de mobilité E_c , conférant ainsi un caractère n à ce type de semiconducteurs.

Les trois états de charge de la liaison pendante introduisent deux niveaux énergétiques au voisinage du milieu de la bande interdite notés $E_{db}^{\dagger}$, pour la liaison neutre D^0 et positive D^+ , et $(E_{db} + U)$ pour la liaison négative D^- . Chaque niveau présente un élargissement (voir § B.5.1).

La densité d'états due aux liaisons pendantes, dans l'état fondamental (D^0/D^+), est généralement modélisée par une gaussienne centrée en E_{db} et peut s'écrire:

$$N_{db}(E) = \frac{N_{db}}{\sqrt{2\pi} W} \exp\left(-\frac{(E - E_{db})^2}{2 W^2}\right) \quad (\text{B.2})$$

où N_{db} est la concentration totale de liaisons pendantes et W est la déviation standard qui est prise entre 100 et 150 meV en général dans le a-Si:H. Chaque niveau E_{dbi} de cette gaussienne a son niveau corrélé respectif en $(E_{dbi} + U)$.

La figure B.7(b) représente une version simplifiée du modèle standard décrit ci-dessus de la densité d'états pour le a-Si:H. Elle est très utilisée, particulièrement dans les simulations où la dépendance spatiale ou/et temporelle des propriétés est introduite dans le calcul. En effet, dans ce modèle, les états énergétiques introduits par la liaison pendante dans ses différents états de charge sont réduits à deux niveaux discrets corrélés. Dans cette étude, nous utiliserons cette dernière version du modèle standard.

[†] L'indice "db" correspond à l'abréviation de l'anglicisme "*dangling bond*" qui signifie "liaison pendante".

Chapitre C

Modèle et mise en équations

C.1. Introduction

A la fin du chapitre précédent (§ B.5.2), nous avons présenté le modèle de densité d'états standard du a-Si:H [Fig. B.7] que nous allons utiliser dans nos calculs. Ce modèle comprend deux groupes principaux d'états localisés: les états monovalents des deux queues de bandes et les états corrélés des liaisons pendantes. Les concentrations des porteurs libres sont dépendantes de ces centres.

Dans ce chapitre nous allons voir comment se répartissent les électrons et les trous sur ces niveaux. Selon les cas, la statistique adéquate sera considérée en tenant compte des chemins de capture et d'émission permis dans notre modèle. La version simplifiée du modèle standard de densité d'états de la figure B.7(b) est utilisée. Les équations cinétiques régissant toutes les charges en présence sont déduites des équations fondamentales de transport dans les semiconducteurs moyennant un certain nombre d'hypothèses spécifiques. Ces équations seront nécessaires pour le calcul numérique de la conductivité à l'équilibre, des photoconductivités stationnaire et transitoire et de la conductivité thermiquement stimulée.

Nous finirons ce chapitre par le traitement numérique complet de l'équilibre thermodynamique et du régime stationnaire, et puis nous présenterons les valeurs choisies pour l'ensemble des paramètres microscopiques nécessaires aux différents calculs.

C.2. Modélisation des échanges et du transport

Nous considérons dans notre modèle toutes les transitions, capture et émission, qui peuvent survenir entre tous les états localisés et les états étendus des bandes. Les taux associés aux transitions schématisées sur la figure C.1 peuvent être classés dans deux groupes:

- Les taux de capture et d'émission d'électrons par la bande de conduction qui sont notés de U_1 à U_8 .
- Les taux de capture et d'émission de trous par la bande de valence qui sont notés de U_9 à U_{16} .

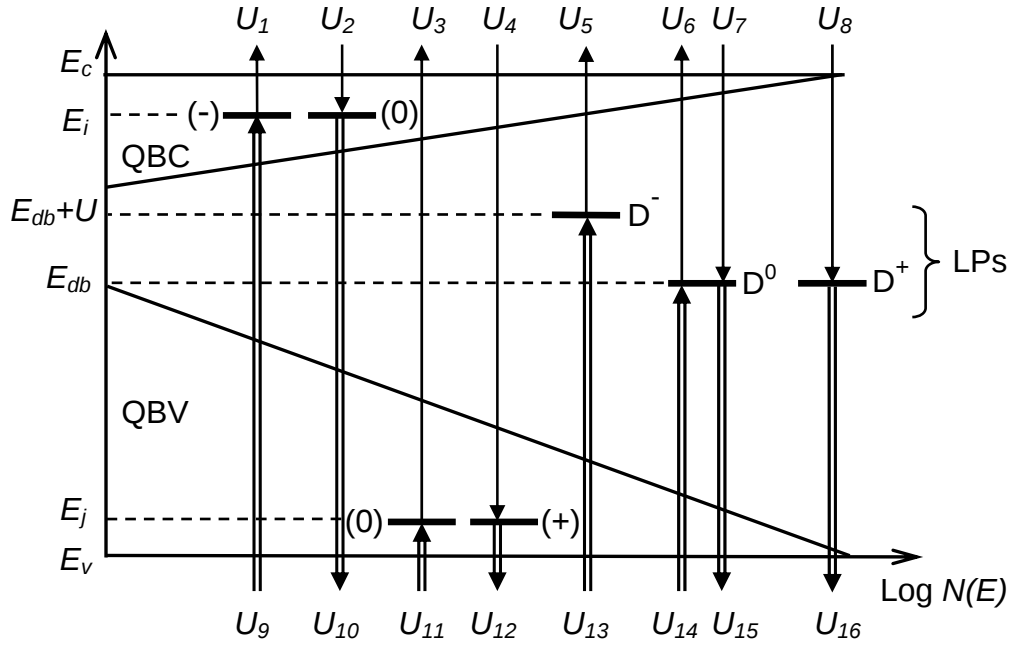


Figure C.1: Transitions des électrons ($\longrightarrow$) et des trous ($\Rightarrow$) entre les états étendus et les états localisés.

Ces différents taux, qui représentent le nombre de charges émises ou capturées par unité de volume et par unité de temps, seront explicités en détail dans le paragraphe C.4 ci-dessous en utilisant la statistique de Hall-Schockley-Read (HSR) [89,90]. La recombinaison directe électron-trou n'est pas considérée car peu probable à cause de la largeur importante du gap dans le a-Si:H. Les transitions entre états localisés, traduisant une éventuelle conduction par sauts ou "hopping", ne sont pas prises en compte car ce processus ne devient dominant qu'à très basse température. Seule la conduction par porteurs libres dans les états étendus des bandes est retenue dans l'expression de la conductivité.

Dans la section subséquente nous présentons au préalable les équations de transport avant de développer les différentes expressions de tous les taux de capture et d'émission.

C.3. Equations de transport dans les semiconducteurs

C.3.1. Cas général

Les équations fondamentales nécessaires pour décrire les propriétés de transport dans les semiconducteurs de manière générale peuvent être classées en trois groupes: les équations de Maxwell, les équations des densités de courant et les équations de continuité (voir par ex. [8]).

C.3.1.a. Equations de Maxwell

Les équations de Maxwell de l'électromagnétisme forment un jeu de quatre équations différentielles qui permettent de décrire complètement les systèmes électrodynamiques et sont données par:

$$\vec{\nabla} \wedge \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (\text{C.1.a})$$

$$\vec{\nabla} \wedge \vec{H} = \vec{J}_{cond} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} = \vec{J}_{tot} \quad (\text{C.1.b})$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = \rho(x, y, z, t) \quad (\text{C.1.c})$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \quad (\text{C.1.d})$$

où $\vec{E}$ et $\vec{H}$ sont les champs électrique et magnétique, $\vec{D}$ et $\vec{B}$ sont les inductions électrique et magnétique, $\rho(x, y, z, t)$ est la densité de charge électrique totale, $\vec{J}_{cond}$ la densité de courant de conduction, et $\vec{J}_{tot}$ la densité de courant totale.

C.3.1.b. Equation de Poisson

L'équation régissant la densité volumique de charge totale découle de la relation (C.1.c) des équations de Maxwell. En effet, sachant que dans le cas statique ou à très basse fréquence on a la relation linéaire entre l'induction et le champ électrique $\vec{D} = \epsilon_s \vec{E}$ (ϵ_s est la permittivité statique du semiconducteur), on obtient l'expression usuelle de l'équation de Poisson suivante:

$$\Delta V = -\frac{\rho(x, y, z, t)}{\epsilon_s} \quad (\text{C.2})$$

où V est le potentiel électrostatique.

C.3.1.c. Equations des densités de courant

Le courant de conduction résulte de la somme d'un courant de dérive (*drift*), écrit suivant la loi d'Ohm (cas linéaire), et d'un courant de diffusion associé au gradient des densités de porteurs. Les densités de courant des électrons $\vec{J}_n$ et des trous $\vec{J}_p$ s'écrivent alors:

$$\vec{J}_n = e \mu_n n \vec{E} + e D_n \vec{\nabla} n \quad (\text{C.3.a})$$

$$\vec{J}_p = e \mu_p p \vec{E} - e D_p \vec{\nabla} p \quad (\text{C.3.b})$$

où n et p sont les concentrations des électrons et des trous libres, μ_n et μ_p sont leurs mobilités respectives dans les états étendus des bandes et e est la charge élémentaire. Les termes D_n et D_p sont les constantes de diffusion définies par la lois de Fick et sont données dans les semiconducteurs par la relation d'Einstein. Le courant de conduction résulte bien entendu de la somme de ces deux contributions et s'écrit:

$$\vec{J}_{cond} = \vec{J}_n + \vec{J}_p \quad (C.4)$$

C.3.1.d. Equations de continuité

En appliquant l'opérateur divergence à l'équation de Maxwell (C.1.b) de la manière suivante:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_{cond} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_{tot} = 0 \quad (C.5)$$

on obtient l'équation de continuité générale:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_{cond} \quad (C.6)$$

Cette équation traduit la conservation de la densité totale de charge.

Dans un semiconducteur, en plus des courants dus aux électrons et aux trous, il faut tenir compte des phénomènes de génération et de capture des porteurs libres. Les équations de continuité s'écrivent dès lors, séparément pour les électrons et les trous, de la manière suivante:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = G_n - U_n + \frac{1}{e} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_n \quad (C.7.a)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = G_p - U_p - \frac{1}{e} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_p \quad (C.7.b)$$

où $G_{n(p)}$ est le taux de générations des électrons (trous) et $U_{n(p)}$ le taux net de capture. Ces expressions expriment la conservation du nombre total d'électrons et de trous. D'autre part, la densité de charge totale est donnée par:

$$\vec{J}_{tot} = \vec{J}_n + \vec{J}_p + \vec{J}_d \quad (C.8)$$

où $\vec{J}_d = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}$ est le courant de déplacement (cf. eq. C.1.b). En tenant compte de toutes les charges en présence, la densité volumique totale s'écrit:

$$\rho(t) = -en + ep - Q_- + Q_+ \quad (C.9)$$

où Q_- et Q_+ sont les densités de charges fixes, négatives et positives respectivement.

C.3.2. Cas du champ électrique uniforme et faible

Lorsque le champ électrique est uniforme, les dérivées du champ électrique par rapport aux variables d'espace s'annulent. D'autre part, les phénomènes de transport par la diffusion des porteurs peuvent être négligés si l'amplitude du champ électrique est suffisamment faible pour considérer les concentrations des porteurs libres presque homogènes dans tout le semiconducteur. De plus, dans la suite, seul un éclaircissement constant d'énergie supérieure au gap sera considéré pour le calcul de la photoconductivité stationnaire. Les taux de génération bande à bande des électrons et des trous sont alors égaux: $G_n(t) = G_p(t) = G$ où G est le nombre de paires électron-trou générées par la lumière par unité de volume et par unité de temps. Avec ces hypothèses, les équations de continuité se simplifient alors considérablement et deviennent indépendantes de l'espace et s'écrivent:

$$\frac{dn(t)}{dt} = G - U_n(t) \quad (\text{C.10.a})$$

$$\frac{dp(t)}{dt} = G - U_p(t) \quad (\text{C.10.b})$$

L'équation de Poisson devient:

$$\rho(t) = 0 \quad (\text{C.11})$$

qui traduit la neutralité électrique par la conservation de la charge totale. Toutes les grandeurs ne dépendent plus que du temps dans le cas le plus général. Les équations (C.10.a), (C.10.b) et (C.11) sont nécessaires au calcul des concentrations n et p pour évaluer la conductivité du semiconducteur. En effet, la densité de courant totale s'écrit alors, selon la loi d'Ohm, en fonction de la conductivité électrique σ :

$$\vec{J}_{tot} = \vec{J}_n + \vec{J}_p = e(\mu_n n + \mu_p p) \vec{E} = \sigma \vec{E} \quad (\text{C.12})$$

Dans toute la suite de ce travail, les équations (C.10.a), (C.10.b) et (C.11) sont utilisées pour le calcul des concentrations des porteurs de charges nécessaires à la détermination des différentes conductivités.

C.4. Modélisation et équations dans le a-Si:H

C.4.1. Taux nets de capture des électrons et des trous

Les taux nets de capture (*i.e.* capture moins émission) des électrons U_n et des trous U_p s'obtiennent en faisant le bilan des différents chemins pris en compte dans notre

modèle. U_n résulte de la somme des différents taux nets de capture des électrons sur les états localisés:

- U_{nct} pour la queue de bande de conduction (QBC)
- U_{nvt} pour la queue de bande de valence (QBV)
- U_{ndb} pour les liaisons pendantes (LPs)

On a donc:

$$U_n(t) = U_{nct}(t) + U_{nvt}(t) + U_{ndb}(t) \quad (\text{C.13.a})$$

Le taux net de capture des trous s'écrit de même:

$$U_p(t) = U_{pct}(t) + U_{pvt}(t) + U_{pdb}(t) \quad (\text{C.13.b})$$

Il est à noter que tous ces taux dépendent du temps dans le cas le plus général.

C.4.2. Les queues de bandes

Les queues de bandes peuvent être assimilées à des distributions continues d'états localisés monovalents et indépendants. Les états de la QBC sont considérés comme accepteurs et ceux de la QBV comme donneurs. La statistique de recombinaison sur un centre monovalent, originellement développée par Hall, Shockley et Read [89,90], a été généralisée par Simmons et Taylor [91] au cas d'une distribution arbitraire d'états de même type. L'étude de la recombinaison sur les queues de bandes peut être déduite à partir de cette statistique.

Pour les besoins du calcul, on suppose les distributions énergétiques des deux queues de bandes comme une suite de niveaux discrets monovalents et indépendants notés comme suit:

- un niveau E_i repère un état de la QBC neutre lorsqu'il est vide et chargé négativement lorsqu'il capture un électron (centre accepteur).
- un niveau E_j repère un état de la QBV neutre lorsqu'il est vide et chargé positivement lorsqu'il capture un trou (centre donneur).

Le gap est alors subdivisé en N intervalles égaux en énergie de largeur ΔE . Les équations concernées (B.1.a) et (B.1.b) se réécrivent alors sous la forme discrétisée suivante:

$$N_{ct}(E_i) = N_{ct}^0 \exp \frac{E_i - E_c}{k_B T_c} \quad (\text{C.14.a})$$

$$N_{vt}(E_j) = N_{vt}^0 \exp \frac{E_v - E_j}{k_B T_v} \quad (\text{C.14.b})$$

où k_B est la constante de Boltzmann, T_c et T_v sont les températures caractéristiques des pentes de la QBC et de la QBV respectivement, et N_{ct}^0 et N_{vt}^0 sont les densité d'états effectives aux seuils de mobilité E_c et E_v respectivement.

Les différents taux élémentaires d'émission ou de capture d'électrons et de trous par le niveau E_i de la QBC et le niveau E_j de la QBV sont énumérés ci-dessous en explicitant leur origine (voir Fig. C.1):

$$\text{Emission d'un électron par QBC: } U_1(E_i, t) = e_n^{ct}(E_i, T) Q_{ct}(E_i, t) \quad (\text{C.15.a})$$

$$\text{Capture d'un électron par QBC: } U_2(E_i, t) = n(t) C_n^{ct} [N_{ct}(E_i) - Q_{ct}(E_i, t)] \quad (\text{C.15.b})$$

$$\text{Emission d'un électron par QBV: } U_3(E_j, t) = e_n^{vt}(E_j, t) [N_{vt}(E_j) - Q_{vt}(E_j, t)] \quad (\text{C.15.c})$$

$$\text{Capture d'un électron par QBV: } U_4(E_j, t) = n(t) C_n^{vt} Q_{vt}(E_j, t) \quad (\text{C.15.d})$$

$$\text{Capture d'un trou par QBC: } U_9(E_i, t) = p(t) C_p^{ct} Q_{ct}(E_i, t) \quad (\text{C.15.e})$$

$$\text{Emission d'un trou par QBC: } U_{10}(E_i, t) = e_p^{ct}(E_i, t) [N_{ct}(E_i) - Q_{ct}(E_i, t)] \quad (\text{C.15.f})$$

$$\text{Capture d'un trou par QBV: } U_{11}(E_j, t) = p(t) C_p^{vt} [N_{vt}(E_j) - Q_{vt}(E_j, t)] \quad (\text{C.15.g})$$

$$\text{Emission d'un trou par QBV: } U_{12}(E_j, t) = e_p^{vt}(E_j, t) Q_{vt}(E_j, t) \quad (\text{C.15.h})$$

où $Q_{ct}(E_i, t)$ est la densité d'électrons piégés sur le niveau i de la QBC et $Q_{vt}(E_j, t)$ est la densité de trous sur le niveau j de la QBV, $C_n^{ct(vt)}$ et $C_p^{ct(vt)}$ sont les coefficients de capture, par la QBC (ct) et la QBV (vt), des électrons et des trous respectivement. Ils sont pris indépendants de l'énergie (voir § C.7). Les coefficients d'émission associés à ces mêmes centres sont calculés à l'équilibre thermodynamique à une température T à l'instant t (voir § C5.2 pour plus de détails) et s'écrivent ici:

$$e_n^{ct(vt)}(E_{i(j)}, t) = C_n^{ct(vt)} n_1[E_{i(j)}, T(t)] \quad (\text{C.16.a})$$

$$e_p^{ct(vt)}(E_{i(j)}, t) = C_p^{ct(vt)} p_1[E_{i(j)}, T(t)] \quad (\text{C.16.b})$$

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

$$n_1[E_{i(j)}, T(t)] = N_c \exp \frac{E_{i(j)} - E_c}{k_B T(t)} \quad (\text{C.17.a})$$

$$p_1[E_{i(j)}, T(t)] = N_v \exp \frac{E_v - E_{i(j)}}{k_B T(t)} \quad (\text{C.17.b})$$

Les taux nets de capture sur la QBC, U_{nct} et U_{pct} , et sur la QBV, U_{nvt} et U_{pvt} , s'écrivent alors en fonction des taux élémentaires de capture et d'émission:

$$U_{nct}(t) = \sum_{i=1}^{N+1} [-U_1(E_i, t) + U_2(E_i, t)] \quad (\text{C.18.a})$$

$$U_{pct}(t) = \sum_{i=1}^{N+1} [U_9(E_i, t) - U_{10}(E_i, t)] \quad (\text{C.18.b})$$

$$U_{nvt}(t) = \sum_{j=1}^{N+1} [-U_3(E_j, t) + U_4(E_j, t)] \quad (\text{C.18.c})$$

$$U_{pvt}(t) = \sum_{j=1}^{N+1} [U_{11}(E_j, t) - U_{12}(E_j, t)] \quad (\text{C.18.d})$$

C.4.3. Les liaisons pendantes

Pour ce qui est des LPs, on rappelle que le développement ci-dessous est fait pour le modèle de densité d'états donné sur la figure B.7(b) dans lequel les niveaux introduits par ce défaut sont supposés être discrets. Les états D^+ et D^0 occupent un même niveau d'énergie E_{db} , et l'état de charge D^- occupe un niveau plus élevé de l'énergie de corrélation U (cf. § B.5.2). Leur densité totale est notée N_{db} .

L'approche de HSR est utilisée également pour les LPs. Les différents taux d'émission ou de capture d'électrons ou de trous sont énumérés ci-dessous:

$$\text{Emission d'un électron par } D^- : \quad U_5(t) = e_n^-(t) Q_{db}^-(t) \quad (\text{C.19.a})$$

$$\text{Emission d'un électron par } D^0 : \quad U_6(t) = e_n^0(t) Q_{db}^0(t) \quad (\text{C.19.b})$$

$$\text{Capture d'un électron par } D^0 : \quad U_7(t) = C_n^0 n(t) Q_{db}^0(t) \quad (\text{C.19.c})$$

$$\text{Capture d'un électron par } D^+ : \quad U_8(t) = C_n^+ n(t) Q_{db}^+(t) \quad (\text{C.19.d})$$

$$\text{Capture d'un trou par } D^- : \quad U_{13}(t) = C_p^- p(t) Q_{db}^-(t) \quad (\text{C.19.e})$$

$$\text{Capture d'un trou par } D^0 : \quad U_{14}(t) = C_p^0 p(t) Q_{db}^0(t) \quad (\text{C.19.f})$$

$$\text{Emission d'un trou par } D^0: \quad U_{15}(t) = e_p^0(t) Q_{db}^0(t) \quad (\text{C.19.g})$$

$$\text{Emission d'un trou par } D^+: \quad U_{16}(t) = e_p^+(t) Q_{db}^+(t) \quad (\text{C.19.h})$$

où $Q_{db}^+(t)$, $Q_{db}^0(t)$ et $Q_{db}^-(t)$ sont les densités de LPs dans les états de charge D^+ , D^0 et D^- respectivement, C_n^+ et C_n^0 sont les coefficients de capture des électrons par les LPs chargées positivement et neutres, et C_p^0 et C_p^- sont les coefficients de capture des trous par les LPs neutres et chargées négativement. Les expressions des coefficients d'émission des électrons et des trous par les différents états de charge des LPs sont déduites analytiquement à partir des équations à l'équilibre en fonction de f_0^+ , f_0^0 et f_0^- qui sont les probabilités pour que la LP soit dans l'état de charge D^+ , D^0 et D^- respectivement (voir § C5.2 pour plus de détails). Les coefficients d'émission s'écrivent alors:

$$e_p^+(t) = p_0[T(t)] \frac{f_0^0[T(t)]}{f_0^+[T(t)]} C_p^0 \quad (\text{C.20.a})$$

$$e_n^0(t) = n_0[T(t)] \frac{f_0^+[T(t)]}{f_0^0[T(t)]} C_n^+ \quad (\text{C.20.b})$$

$$e_p^0(t) = p_0[T(t)] \frac{f_0^- [T(t)]}{f_0^0 [T(t)]} C_p^- \quad (\text{C.20.c})$$

$$e_n^-(t) = n_0[T(t)] \frac{f_0^0 [T(t)]}{f_0^- [T(t)]} C_n^0 \quad (\text{C.20.d})$$

Remarques:

- Habituellement, on suppose que ces relations déterminées pour les deux groupes d'états localisés sous obscurité restent valables en régime stationnaire et en régime transitoire.
- Les coefficients d'émission déterminés à partir de l'équilibre thermique ne dépendent que de la température, comme nous le verrons dans la section C.5.2. Leur dépendance en temps, comme semble le montrer leur écriture ci-dessus, ne survient qu'à travers la température T lorsque cette dernière dépend du temps. Cela se produit, par exemple, dans le cas des phénomènes de relaxation thermiquement stimulés.

Le taux net de capture des électrons U_{ndb} et celui des trous U_{pdb} par les états des LPs s'écrivent, en fonction des taux élémentaires de capture et d'émission, comme suit:

$$U_{ndb}(t) = -U_5(t) - U_6(t) + U_7(t) + U_8(t) \quad (\text{C.21.a})$$

$$U_{pdb}(t) = U_{13}(t) + U_{14}(t) - U_{15}(t) - U_{16}(t) \quad (\text{C.21.b})$$

C.4.4. Les équations cinétiques des densités de charges sur les états localisés

Les densités de charges sur tous les états localisés E_i et E_j des deux queues de bandes et les densités des LPs dans ses trois états de charge possibles dépendent également du temps. Il est donc nécessaire de compléter le système d'équations résultant des deux équations de continuité (C.10.a) et (C.10.b) avec les équations cinétiques de ces différentes densités de charges sur les états localisés du gap.

Comme les distributions des deux queues de bandes sont discrétisées en énergie (cf. § C.4.2) nous avons alors $(N + 1)$ équations cinétiques pour chaque queue de bande. L'évolution temporelle de la densité d'électrons piégés par le niveau i de la QBC $Q_{ct}(E_i, t)$ et celle de la densité de trous piégés sur un niveau j de la QBV $Q_{vt}(E_j, t)$ sont données en fonction des différents taux d'émission et de capture élémentaires et s'écrivent:

$$\frac{dQ_{ct}(E_i, t)}{dt} = -U_1(E_i, t) + U_2(E_i, t) - U_9(E_i, t) + U_{10}(E_i, t), \quad i = 1, \dots, N + 1 \quad (\text{C.22.a})$$

$$\frac{dQ_{vt}(E_j, t)}{dt} = U_3(E_j, t) - U_4(E_j, t) + U_{11}(E_j, t) - U_{12}(E_j, t), \quad j = 1, \dots, N + 1 \quad (\text{C.22.b})$$

Les équations cinétiques pour les densités des LPs chargées négativement (Q_{db}^-) et chargées positivement (Q_{db}^+) sont données par:

$$\frac{dQ_{db}^-(t)}{dt} = -U_5(t) + U_7(t) - U_{13}(t) + U_{15}(t) \quad (\text{C.23.a})$$

$$\frac{dQ_{db}^+(t)}{dt} = U_6(t) - U_8(t) + U_{14}(t) - U_{16}(t) \quad (\text{C.23.b})$$

Une équation similaire pour $Q_{db}^0(t)$ n'est pas nécessaire puisque la densité totale de LPs devant rester constante à tout moment, on a:

$$N_{db} = Q_{db}^-(t) + Q_{db}^0(t) + Q_{db}^+(t) \quad (\text{C.23.c})$$

et par suite:

$$\frac{dQ_{db}^0(t)}{dt} = -\frac{dQ_{db}^-(t)}{dt} - \frac{dQ_{db}^+(t)}{dt} \quad (\text{C.23.d})$$

C.4.5. Equation de neutralité

Dans notre cas où le champ électrique est supposé faible et uniforme pour s'affranchir des variables d'espace, l'équation de poisson traduit la conservation de la neutralité électrique dans tout le semiconducteur considéré. L'équation (C.11) s'écrit alors en fonction de toutes les charges, fixes et mobiles, présentes dans le matériau comme suit:

$$n(t) - p(t) + Q_{ct}(t) - Q_{vt}(t) + Q_{db}^-(t) - Q_{db}^+(t) = 0 \quad (C.24)$$

où la densité de charge négative totale $Q_{ct}(t)$ dans la QBC et la densité de charge positive totale $Q_{vt}(t)$ dans la QBV sont données par les sommations:

$$Q_{ct}(t) = \sum_{i=1}^{N+1} Q_{ct}(E_i, t) \quad (C.25.a)$$

$$Q_{vt}(t) = \sum_{j=1}^{N+1} Q_{vt}(E_j, t) \quad (C.25.b)$$

C.5. Equilibre thermodynamique

C.5.1. Conductivité d'obscurité

A une température T donnée, l'expression de la conductivité sous obscurité s'écrit:

$$\sigma_0 = e(\mu_n n_0 + \mu_p p_0) \quad (C.26)$$

où e est la charge électronique et μ_n et μ_p sont les mobilités des électrons et des trous dans les états étendus. Les concentrations des électrons et des trous à l'équilibre, n_0 et p_0 , s'écrivent en fonction du niveau de Fermi E_F de la manière suivante:

$$n_0 = N_c \exp \frac{E_F - E_c}{k_B T} \quad (C.27.a)$$

$$p_0 = N_v \exp \frac{E_v - E_F}{k_B T} \quad (C.27.b)$$

où N_c et N_v sont les densités effectives d'électrons et de trous en E_c et E_v respectivement. En supposant les densités des bandes d'états étendus constantes en fonction de l'énergie, on a $N_c = N_{ct}^0 k_B T$ et $N_v = N_{vt}^0 k_B T$. Pour déterminer n_0 et p_0 pour chaque température, nous avons besoin de calculer le niveau de Fermi correspondant. Pour cela, il suffit de résoudre l'équation de neutralité qui s'écrit à une température T dans ce cas:

$$n_0 - p_0 + Q_{ct0} - Q_{vt0} + Q_{db0}^- - Q_{db0}^+ = 0 \quad (C.28)$$

où Q_{ct0} et Q_{vt0} sont les densités totales à l'équilibre des charges négatives et positives sur la QBC et la QBV respectivement et s'obtiennent par la multiplication de leur densité par la fonction d'occupation de Fermi-Dirac:

$$Q_{ct0} = \sum_{i=1}^{N+1} N_{ct}(E_i) f_0(E_i, T) \quad (C.29.a)$$

$$Q_{vt0} = \sum_{j=1}^{N+1} N_{vt}(E_j) [1 - f_0(E_j, T)] \quad (C.29.b)$$

La fonction de Fermi-Dirac, qui est la probabilité d'occupation d'un niveau E d'une queue de bande à l'équilibre thermique, est donnée par:

$$f_0(E, T) = \frac{1}{1 + \exp \frac{E - E_F}{k_B T}} \quad (C.30)$$

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 être décrite par la fonction de Fermi-Dirac à cause de la nature amphotère du défaut. Il est nécessaire d'introduire trois fonctions de distribution: f_0^- , f_0^0 et f_0^+ qui sont les probabilités 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 [92]. Ainsi, en tenant compte de la dégénérescence de chaque état et en utilisant la fonction de partition dans l'ensemble grand canonique du système, on obtient [93]:

$$f_0^+(T) = \left[1 + 2 \exp \frac{E_F - E_{db}}{k_B T} + \exp \frac{2E_F - 2E_{db} - U}{k_B T} \right]^{-1} \quad (C.31.a)$$

$$f_0^0(T) = 2 f_0^+(T) \exp \frac{E_F - E_{db}}{k_B T} \quad (C.31.b)$$

$$f_0^-(T) = f_0^+(T) \exp \frac{2E_F - 2E_{db} - U}{k_B T} \quad (C.31.c)$$

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. Ces grandeurs ont été définies dans la section B.5.2.

Un tracé graphique de ces fonctions en fonction du niveau de Fermi est donné dans la figure C.2. Les concentrations totales des LPs négatives et positives s'écrivent alors:

$$Q_{db0}^- = N_{db} f_0^-(T) \quad (C.32.a)$$

$$Q_{db0}^+ = N_{db} f_0^+(T) \quad (C.32.b)$$

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

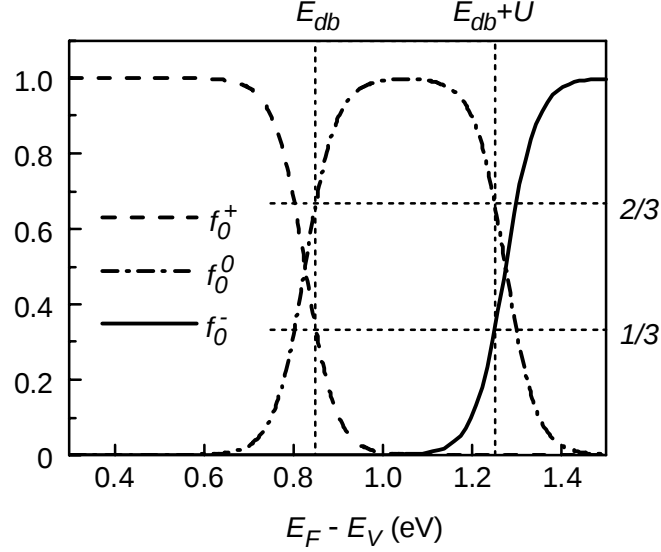


Figure C.2: Tracés graphiques des fonctions de distribution à l'équilibre des liaisons pendantes dans les trois états de charge (D^+ , D^0 et D^-) en fonction du niveau de Fermi, à une température de 400 K.

En remplaçant toutes les densités de charges par leurs expressions respectives, il ne subsiste qu'une seule inconnue dans l'équation (C.28) qui est le niveau de Fermi E_F . La méthode de Newton est utilisée pour la résolution numérique d'une telle équation non linéaire pour calculer E_F pour chaque température.

C.5.2. Coefficients d'émission

Dans les expressions des différents taux d'émission des différents niveaux, établis avec l'approche de HSR, apparaissent les coefficients d'émission des porteurs (cf. § C.4.2 et § C.4.3). 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 [90].

Les coefficients d'émission pour les queues de bandes en fonction des coefficients de capture sont déduits à partir des équations cinétiques à l'équilibre et en écrivant que chaque

état de charge $i(j)$ de la QBC (QBV) est en équilibre thermique avec les bandes d'état étendus. Cela se traduit par les relations du bilan détaillé suivantes:

- Pour un niveau E_i de la QBC: $U_1(E_i) = U_2(E_i)$ et $U_9(E_i) = U_{10}(E_i)$
- Pour un niveau E_j de la QBV: $U_3(E_j) = U_4(E_j)$ et $U_{11}(E_j) = U_{12}(E_j)$

Cela conduit à l'établissement des coefficients d'émission, à une température T donnée, qui s'écrivent:

$$e_n^{ct(vt)}(E_{i(j)}) = C_n^{ct(vt)} n_1(E_{i(j)}) \quad (C.33.a)$$

$$e_p^{ct(vt)}(E_{i(j)}) = C_p^{ct(vt)} p_1(E_{i(j)}) \quad (C.33.b)$$

Pour les coefficients d'émission des LPs dans leurs différents états de charge, ils sont déduits également en appliquant le principe du bilan détaillé pour chaque niveau d'énergie à l'équilibre [94], c'est à dire $U_5 = U_7$, $U_6 = U_8$, $U_{13} = U_{15}$ et $U_{14} = U_{16}$. On obtient alors:

$$e_n^- = n_0 \frac{f_0^0(T)}{f_0^-(T)} C_n^0 \quad (C.34.a)$$

$$e_n^0 = n_0 \frac{f^+(T)}{f^0(T)} C_n^+ \quad (C.34.b)$$

$$e_p^0 = p_0 \frac{f_0^-(T)}{f_0^0(T)} C_p^- \quad (C.34.c)$$

$$e_p^+ = p_0 \frac{f_0^0(T)}{f_0^+(T)} C_p^0 \quad (C.34.d)$$

C.6. Régime permanent

Lorsqu'un semiconducteur est soumis à une excitation extérieure continue (un éclairage d'intensité constante par exemple), à une température T donnée, il s'établit au bout d'une durée de temps suffisante un régime permanent. Les relations (C.27.a) et (C.27.b) des concentrations de porteurs libres à l'équilibre ne sont plus valables. Le niveau de Fermi unique traduisant l'état d'équilibre thermodynamique doit être remplacé par deux quasi-niveaux de Fermi: E_{Fn} pour les électrons et E_{Fp} pour les trous. Ils traduisent un état d'équilibre des électrons et des trous des niveaux pièges vis à vis de la bande de conduction et la bande de valence respectivement. En effet, E_{Fn} et E_{Fp} divisent en trois parties le gap: entre E_v et E_{Fp} on a les niveaux pièges à trous, entre E_{Fp} et E_{Fn}

on a les centres de recombinaison et entre E_{Fn} et E_c on a les pièges à électrons. En régime permanent, les pièges à trous et à électrons sont en équilibre avec leur bande d'états étendus respective. En considérant les électrons et les trous indépendamment, leurs concentrations s'écrivent alors en fonction des quasi-niveaux de Fermi comme suit:

$$n = N_c \exp \frac{E_{Fn} - E_c}{k_B T} \quad (\text{C.35.a})$$

$$p = N_v \exp \frac{E_v - E_{Fp}}{k_B T} \quad (\text{C.35.b})$$

Pour évaluer numériquement n et p il faut calculer les deux quasi-niveaux de Fermi.

En régime permanent toutes les dérivées par rapport au temps dans les équations d'évolution s'annulent. Le régime stationnaire d'un semiconducteur sous illumination d'intensité constante est atteint lorsque $\frac{dn}{dt} = 0$ et $\frac{dp}{dt} = 0$. Cela conduit à l'égalité des taux nets de capture des électrons et des trous qui sont égaux au taux de génération de paires électron-trou [Eqs. (C.10.a) et (C.10.b)]: $G = U_n = U_p = R$. Le terme R désigne dans ces conditions le taux net de recombinaison. De même, toutes les équations cinétiques contrôlant les charges sur les états localisés s'annulent et tous les taux de capture et d'émission deviennent indépendants du temps. De plus, il y a la conservation de la neutralité électrique.

A une température donnée, nous avons donc besoin de résoudre deux équations pour calculer les deux quasi-niveaux de Fermi:

- L'équation de conservation de la neutralité électrique:

$$n - p + Q_{ct} - Q_{vt} + Q_{db}^- - Q_{db}^+ = 0 \quad (\text{C.35.a})$$

- L'équation du taux net de recombinaison:

$$G - R_{ct} - R_{vt} - R_{db} = 0 \quad (\text{C.35.b})$$

où R_{ct} , R_{vt} et R_{db} sont les taux nets de recombinaison sur la QBC, la QBV et les LPs, respectivement ($R = R_{ct} + R_{vt} + R_{db}$).

C.6.1. Recombinaison sur les queues de bandes

La probabilité d'occupation des états de queues de bandes n'est plus donnée par la statistique de Fermi-Dirac. Les densités totales des charges négatives et positives sur la QBC et la QBV s'obtiennent par la multiplication de leur densité par une statistique

d'occupation appropriée au régime permanent, que nous déterminerons dans la suite, et elles s'écrivent:

$$Q_{ct} = \sum_{i=1}^{N+1} N_{ct}(E_i) f_{ct}(E_i) \quad (C.36.a)$$

$$Q_{vt} = \sum_{j=1}^{N+1} N_{vt}(E_j) [1 - f_{vt}(E_j)] \quad (C.36.b)$$

Les équations cinétiques donnant les concentrations de charges sur un niveau E_i (E_j) de la QBC (QBV) s'annulent:

$$\frac{dQ_{ct}(E_i)}{dt} = -U_1(E_i) + U_2(E_i) - U_9(E_i) + U_{10}(E_i) = 0, \quad i = 1, \dots, N+1 \quad (C.37.a)$$

$$\frac{dQ_{vt}(E_j)}{dt} = U_3(E_j) - U_4(E_j) + U_{11}(E_j) - U_{12}(E_j) = 0, \quad j = 1, \dots, N+1 \quad (C.37.b)$$

Ces équations permettent d'établir les expressions des fonctions d'occupation des deux queues de bandes en fonction des coefficients de capture, des densités des charges libres et des concentrations équivalentes qui s'écrivent [91]:

$$f_{ct}(E_i) = \frac{n C_n^{ct} + p_1(E_i) C_p^{ct}}{C_n^{ct} [n + n_1(E_i)] + C_p^{ct} [p + p_1(E_i)]} \quad (C.38.a)$$

$$f_{vt}(E_j) = \frac{n C_n^{vt} + p_1(E_j) C_p^{vt}}{C_n^{vt} [n + n_1(E_j)] + C_p^{vt} [p + p_1(E_j)]} \quad (C.38.b)$$

En régime stationnaire (statistique de HSR étendue au cas d'une distribution continue d'états [95]) on a l'égalité entre le taux de recombinaison des électrons et celui des trous pour chaque queue de bande: $U_{nct} = U_{pct} = R_{ct}$ et $U_{nvt} = U_{pvt} = R_{vt}$. On a pour la QBC:

$$R_{ct} = \sum_{i=1}^{N+1} [-U_1(E_i) + U_2(E_i)] = \sum_{i=1}^{N+1} [U_9(E_i) - U_{10}(E_i)] \quad (C.39)$$

Le taux net de recombinaison sur la QBC s'écrit alors:

$$R_{ct} = \sum_{i=1}^{N+1} \frac{N_{ct}(E_i) C_n^{vt} C_p^{vt} (n p - n_1^2)}{C_n^{vt} [n + n_1(E_i)] + C_p^{vt} [p + p_1(E_i)]} \quad (C.40)$$

Une équation similaire est obtenue pour la QBV:

$$R_{vt} = \sum_{j=1}^{N+1} \frac{N_{ct}(E_j) C_n^{vt} C_p^{vt} (n p - n_1^2)}{C_n^{vt} [n + n_1(E_j)] + C_p^{vt} [p + p_1(E_j)]} \quad (C.41)$$

C.6.2. Recombinaison sur les liaisons pendantes

Les concentration des LPs dans ses trois états de charges possibles s'écrivent elles également à l'aide d'une statistique hors équilibre:

$$Q_{db}^- = N_{db} f^-(T) \quad (C.42.a)$$

$$Q_{db}^+ = N_{db} f^+(T) \quad (C.42.b)$$

$$Q_{db}^0 = N_{db} f^0(T) \quad (C.42.c)$$

En régime permanent, les équations cinétiques donnant ces concentrations s'annulent:

$$\frac{dQ_{db}^-}{dt} = -U_5 + U_7 - U_{13} + U_{15} = 0 \quad (C.43.a)$$

$$\frac{dQ_{db}^+}{dt} = U_6 - U_8 + U_{14} - U_{16} = 0 \quad (C.43.b)$$

Ces trois dernières équations forment un système dont la résolution permet de déterminer les expressions de f^0 , f^+ et f^- . On a alors:

$$f^0(T) = \frac{1}{1+a+b} \quad (C.44.a)$$

$$f^+(T) = a f^0(T) \quad (C.44.b)$$

$$f^-(T) = b f^0(T) \quad (C.44.c)$$

avec

$$a = \frac{e_n^0 + p C_p^0}{e_p^+ + n C_n^+} \quad \text{et} \quad b = \frac{e_p^0 + n C_n^0}{e_n^- + p C_p^-}$$

Le taux net de recombinaison sur les états des LPs est donné par:

$$R_{db} = -U_5 - U_6 + U_7 + U_8 = U_{13} + U_{14} - U_{15} - U_{16} \quad (C.45.a)$$

$$R_{db} = N_{db} \frac{n C_n^+ a + n C_n^0 - e_n^0 - e_n^- b}{1+a+b} \quad (C.45.b)$$

C.6.3. Procédure de calcul de la photoconductivité stationnaire

Les équations (C.35.a) et (C.35.b) forment un système d'équations non linéaires dont les inconnues sont les concentrations des électrons et des trous libres n et p . Comme nous l'avons déjà vu (§ C.5.1), le a-Si:H intrinsèque présente un caractère de type n. Ceci entraîne une supériorité de n par rapport à p de plusieurs ordres de grandeur parfois. Pour cette raison, on préfère 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. Le système à résoudre peut s'écrire alors sous la forme abrégée suivante:

- Equation de neutralité: $F_1(E_{Fn}, E_{Fp}) = 0$ (C.46.a)

- Equation de recombinaison: $F_2(E_{Fn}, E_{Fp}) = 0$ (C.46.b)

La résolution d'un tel système nécessite l'emploi d'une méthode numérique adaptée au problème. La méthode itérative de Newton a été utilisée. Une convergence est assurée vers la solution recherchée dès que les valeurs du couple de départ sont significatives physiquement et non forcément proches des valeurs exactes. Il faut noter aussi que la convergence devient très rapide lorsque l'on est proche de la racine. De plus, la formulation de l'algorithme associé est relativement simple car seules les dérivées partielles du premier ordre des fonctions sont nécessaires. L'organigramme décrivant la succession des opérations nécessaires au calcul est schématisé sur la figure C.3.

C.7. Choix des paramètres

Pour réaliser les simulations des différentes conductivités, nous avons besoin d'un certain nombre de paramètres relatifs au a-Si:H. Les paramètres habituellement utilisés, rapportés par la littérature, pour des échantillons dits de bonne qualité électronique (*device quality*) sont listés dans le Tableau C.1. Ce jeu de paramètres constituera dans toute la suite celui des paramètres standard dans les résultats de calculs, sauf mention contraire.

Certaines des valeurs sont typiques du a-Si:H et sont bien connues et sont généralement utilisées sans ambiguïté. Pour les autres, qui restent encore controversées, nous avons pris une valeur intermédiaire.

Les valeurs des énergies caractéristiques des deux queues de bandes ainsi que celle de la concentration totale des LPs diminuent lorsque la qualité électronique de l'échantillon augmente. Nous avons pris ici des valeurs proches de celles d'un échantillon de très bonne qualité.

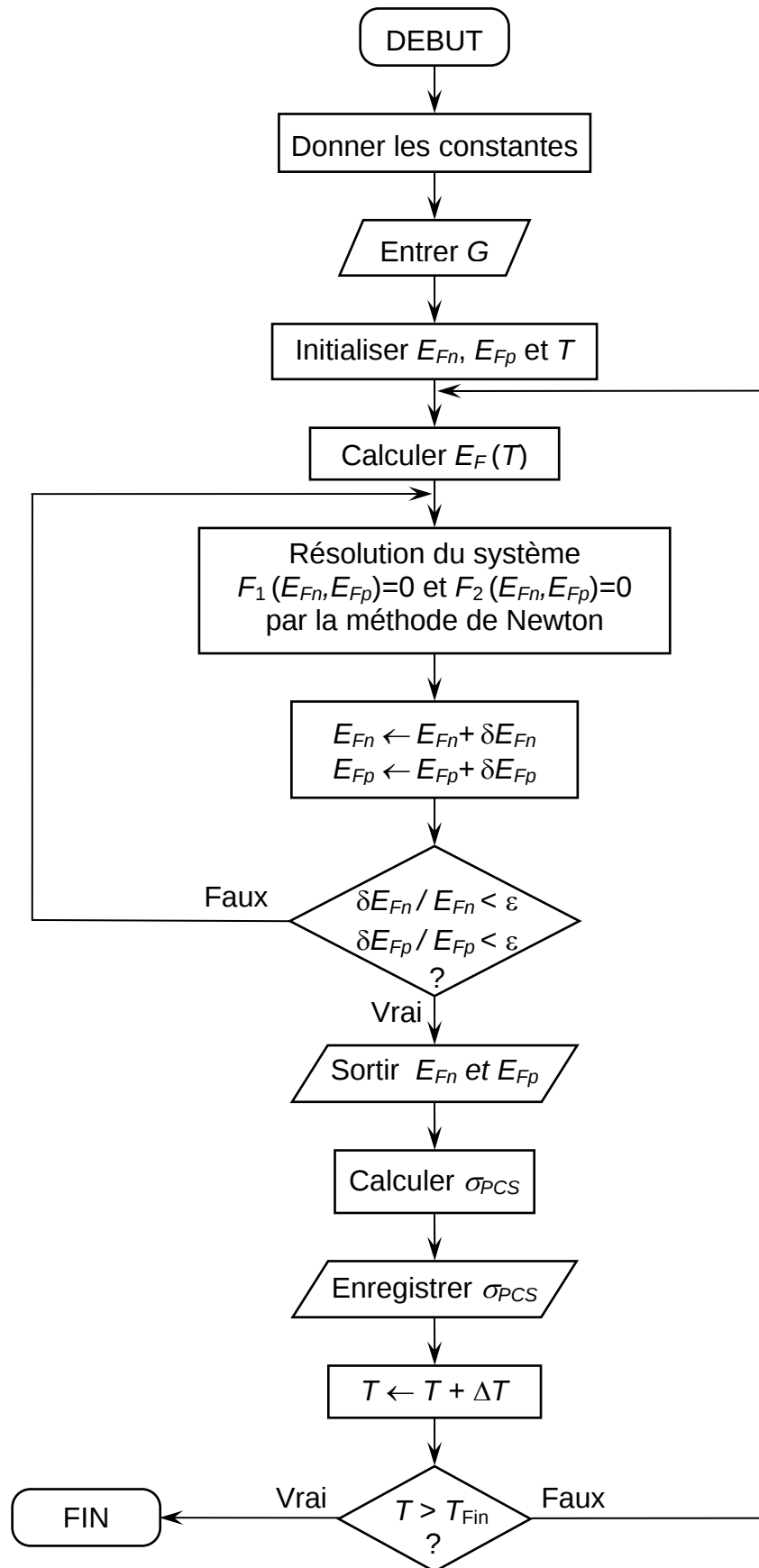


Figure C.3: Organigramme pour le calcul de la photoconductivité stationnaire σ_{PCS} .

Tableau C.1: Récapitulatif des paramètres standard utilisés dans la simulation numérique.

Le paramètre (signification)	Valeur (unité)
E_g (gap de mobilité)	1.8 eV [35]
N_{ct}^0 (densité d'états effective en E_c)	$10^{21} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$
$k_B T_c$ (énergie caractéristique de la QBC)	30 meV
$C_n^{ct} = C_p^{ct}$ (voir texte)	$10^{-8} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ [96]
N_{vt}^0 (densité d'états effective en E_v)	$10^{21} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$
$k_B T_v$ (énergie caractéristique de la QBV)	70 meV
$C_n^{vt} = C_p^{vt}$ (voir texte)	$10^{-8} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ [96]
N_{db} (densité totale de LPs)	$5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$
E_{db} (niveau de D^0/D^+ par rapport à E_v)	0.85 eV [97]
U (énergie de corrélation des LPs)	0.4 eV [79]
$C_n^0 = C_p^0$ (voir texte)	$3 \times 10^{-8} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ [98]
$C_n^+ = C_p^-$ (voir texte)	$1.5 \times 10^{-6} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ [98]
μ_n (mobilité des électrons)	$10 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ [99]
μ_p (mobilité des trous)	$1 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ [99]

Les taux de capture des états localisés ont été obtenus en multipliant la section de capture du centre par la vitesse thermique qui a été prise égale à 10^7 cm s^{-1} . En particulier, les sections de capture des états des queues de bandes sont prises indépendantes de l'énergie. Dans certains travaux, dont celui de la référence [100], des dépendances en exponentielles ont été déterminées expérimentalement mais sur des intervalles limités en énergie. Une dépendance exponentielle a été introduite à titre d'essai pour le calcul de la photoconductivité stationnaire en fonction de la température [101]. Cette modification a seulement déplacé les courbes sans en modifier l'allure.

Chapitre D

La photoconductivité transitoire (PCD)

D.1. Introduction

La méthode qui consiste à mesurer la décroissance en fonction du temps du photocourant ou de la photoconductivité (PCD: *Photoconductivity or Photocurrent Decay*) résultant de l'interruption brusque de l'éclairement est souvent employée pour la caractérisation des semiconducteurs photoconducteurs. Ce procédé a été présenté et utilisé pour la première fois pour le calcul de la durée de vie des porteurs minoritaires dans le silicium et le germanium en 1955 [102]. Une illustration de cette technique est donnée dans la figure D.1. Elle constitue une méthode archétype pour la mesure de la

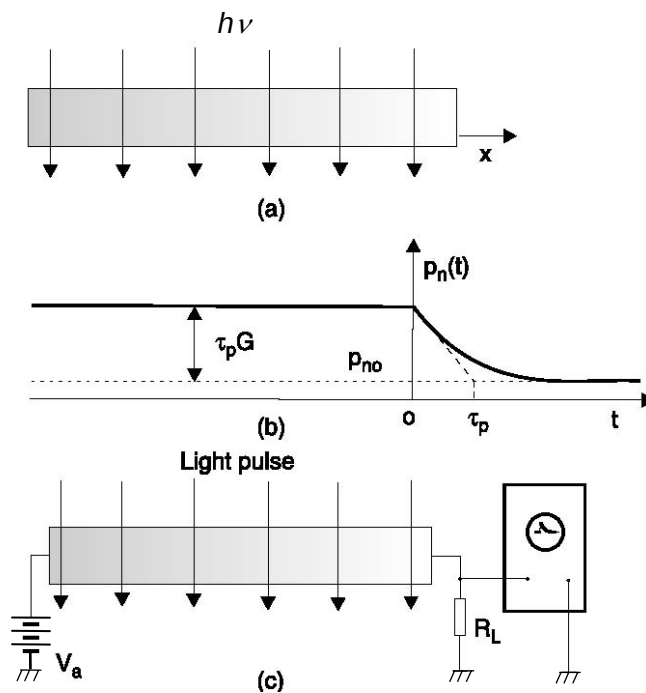


Figure D.1: Méthode de la décroissance de la photoconductivité (PCD) d'après Stevenson et Keyes [102]:

- (a) Echantillon semiconducteur de type n sous éclairage,
- (b) Décroissance de la densité des porteurs minoritaires en fonction du temps,

durée de vie et continue à être utilisée jusqu'à nos jours telle quelle ou avec des modifications et des adaptations pour divers types de semiconducteurs, cristallins ou non.

C'est une méthode souvent utilisée pour caractériser les défauts existant dans le gap (position, densité et section de capture) des semiconducteurs cristallins [103]. Pour cela, il est nécessaire de trouver des expressions analytiques rendant compte des allures de la PCD. Ces relations peuvent être déterminées à partir de la résolution des équations cinétiques qui régissent les concentrations des porteurs libres dans les bandes d'états étendus. Les semiconducteurs réels, cristallins ou non, sont souvent caractérisés par l'existence de plusieurs défauts dans leur bande interdite rendant la recherche des solutions analytiques plus difficile. Pour se prémunir de ces difficultés, des contournements peuvent être trouvés comme, par exemple, les mesures de transitoires sous fort champ électrique pour pouvoir négliger le repiégeage des porteurs. Cela a pour effet d'éliminer les termes associés à la capture des charges par les pièges dans les équations [103].

De manière générale, la mesure de la PCD est utilisée aussi bien pour la caractérisation d'échantillons photoconducteurs en géométrie coplanaire (champs électriques faibles) [104-107] que pour celle de dispositifs photovoltaïques ou en structure sandwich (champs forts) [108-110].

La forme de la réponse transitoire de la conductivité est tributaire de la nature et de la qualité de l'échantillon semiconducteur, de la géométrie utilisée et des conditions expérimentales. Il arrive qu'elle soit utilisée en complément avec d'autres méthodes de caractérisation telle que la photoconductivité stationnaire, par exemple.

D.2. Travaux antérieurs

Les techniques basées sur la mesure de la photoconductivité transitoire sont relativement simples à mettre en œuvre. Elles ont été pendant longtemps considérées comme un moyen attractif pour caractériser les états localisés dans les semiconducteurs amorphes photoconducteurs dont le a-Si:H. Dans ce type de semiconducteurs, la décroissance de la photoconductivité ne se fait pas suivant une loi purement exponentielle. On observe plutôt, sur les courbes, deux régimes de variation en fonction du temps dus à des successions de captures et de réémissions vers les bandes: une première phase très rapide, suivie par une seconde région beaucoup plus lente [111,112,107,110]. Quelques résultats expérimentaux déjà publiés sont répertoriés dans la figure D.2. Plus de précisions sur ces travaux sont données dans la légende.

La plupart des travaux théoriques sur ce sujet se basent sur le modèle du piégeage multiple (MT: *multiple trapping*) décrit originellement par Schmidlin [113]. Une version simplifiée de cette théorie a été développée indépendamment par Tiedje et Rose [86], et par Orenstein et Kastner [114] (modèle TROK) pour décrire le transitoire de la

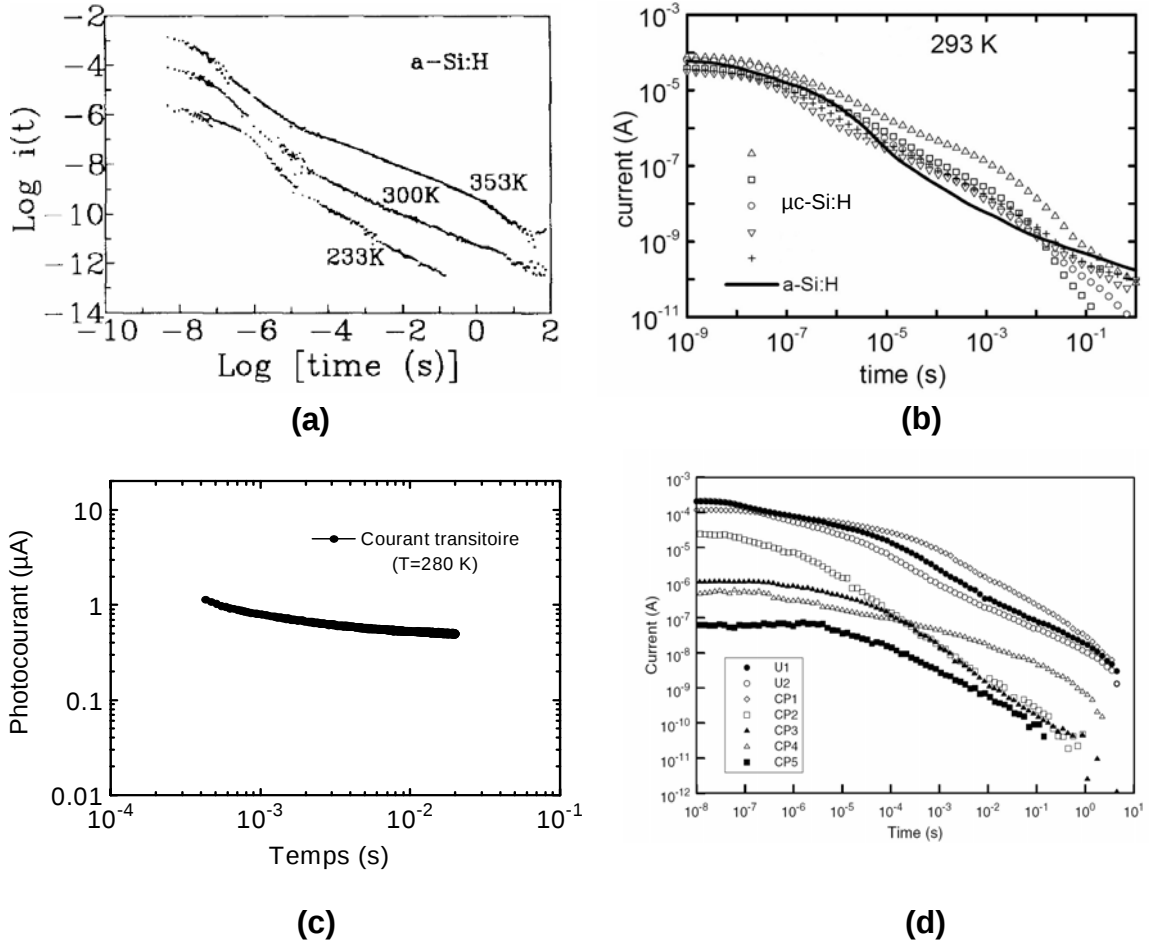


Figure D.2: Présentation de quelques résultats expérimentaux de transitoire de photoconductivité obtenus sur des échantillons de a-Si:H et de $\mu\text{c-Si:H}$:

- (a)** Transitoires mesurés pour trois températures (les courbes sont décalées entre elles d'une décade pour plus de clarté) [111],
- (b)** Transitoires relevés pour un échantillon de a-Si:H et cinq échantillons de $\mu\text{c-Si:H}$ préparés différemment [112],
- (c)** Transitoire de photocourant obtenu sur du a-Si:H déposé par la méthode de pulvérisation DC magnétron [107],
- (d)** Photoconductivité transitoire mesurée sur deux échantillons de a-Si:H non dopés (U1 et U2) et cinq échantillons compensés (dopés P) (CP1 à CP5). Ils ont été déposés à l'aide de la méthode RF-PECVD [110].

photoconductivité dans les semiconducteurs amorphes. La décroissance de la photoconductivité résulte de l'évolution de la conduction des électrons dans les états étendus. Leur population est contrôlée par les niveaux pièges situés dans la partie supérieure du gap. Une relation simple entre le spectre du transitoire de la photoconductivité et l'énergie caractéristique d'une densité d'états distribués en exponentielle au voisinage du minimum de la bande de conduction a été établie [115].

Main *et al.* [116] ont mis au point une méthode pour la détermination de la distribution des états localisés de la partie supérieure du gap à partir de mesures de photocourants transitoires. Ils ont établi une relation générale analytique entre la distribution énergétique des états localisés et le photocourant transitoire en utilisant la transformée de Fourier. La densité d'états est alors calculée en utilisant les relations analytiques de la méthode du photocourant modulé (MPC) où les hypothèses du piégeage multiple des électrons sont prises en compte. Dans le même esprit, la transformée de Laplace a été également utilisée pour déterminer la distribution de la densité d'états [117]. Elle a été ensuite perfectionnée plus tard par Ogawa [118].

D'autre part, Main *et al.* [119] ont développé une simulation numérique pour le calcul de la photoconductivité transitoire dans les semiconducteurs amorphes. Elle est basée sur la résolution numérique des équations cinétiques en tenant compte de toutes les transitions des porteurs entre les états localisés et les états étendus. La densité d'états localisés est représentée par un certain nombre de niveaux discrets monovalents distribués dans le gap sans faire de distinction franche entre la queue de bande de conduction et la queue de bande de valence. Les états corrélés, supposés discrets, des liaisons pendantes sont introduits. Cette simulation numérique a souvent été utilisée par les auteurs pour vérifier les densités d'états calculées à partir de la méthode de la transformée de Fourier évoquée plus haut.

Bassanese et Furlan [120] présentent une analyse de la réponse transitoire des porteurs de charges libres dans le silicium amorphe après interruption de l'éclairement. Une densité d'états accepteurs et une densité d'états donneurs sont utilisées pour calculer le transitoire de la photoconductivité à l'aide de la résolution numérique des équations cinétiques. Suite aux résultats ainsi obtenus, des simplifications judicieuses ont été effectuées dans les échanges de capture et d'émission de porteurs et des expressions analytiques approximatives, décrivant les comportements transitoires des porteurs de charge fixes et libres, ont été établies.

Plus récemment, une simulation numérique complète de la PCD qui tient compte des deux types de porteurs et de toutes leurs transitions entre les états étendus et les états localisés du a-Si:H (queue de bande de conduction, queue de bandes de valence et les liaisons pendantes corrélés) a été réalisée [121]. Les deux configurations géométriques, coplanaire et sandwich, ont été considérées. Les résultats obtenus du transitoire de la photoconductivité sont en accord avec les allures obtenues généralement par l'expérience. Les processus dominant dans chaque gamme de temps sont identifiés et commentés. Les rôles joués par les états superficiels dans les phénomènes de capture et d'émission et par les centres profonds de recombinaison sont discutés.

D.3. Description de la méthode PCD

La technique de mesure de la PCD comprend principalement trois étapes dont le chronogramme est schématisé sur la figure D.3:

- (I) Après un recuit thermique de l'échantillon, celui-ci est refroidi jusqu'à une température donnée T à laquelle on désire réaliser le transitoire de la photoconductivité.
- (II) La deuxième étape est la phase d'excitation lumineuse avec une lumière blanche ou monochromatique interbande (énergie de l'ordre du gap) pendant un temps suffisant pour atteindre le régime stationnaire du photocourant (ou photoconductivité) (σ_{PCS}), mais pas trop long pour éviter l'effet Staebler-Wronski. Dans notre simulation, cet éclairage sera traduit par le taux de génération G bande à bande dans les équations cinétiques.
- (III) La troisième phase consiste à relever le transitoire du photocourant (ou photoconductivité σ_{PCD}) qui intervient après cessation de l'éclairement. La conductivité décroît pour atteindre sa valeur à l'équilibre après relaxation du système.

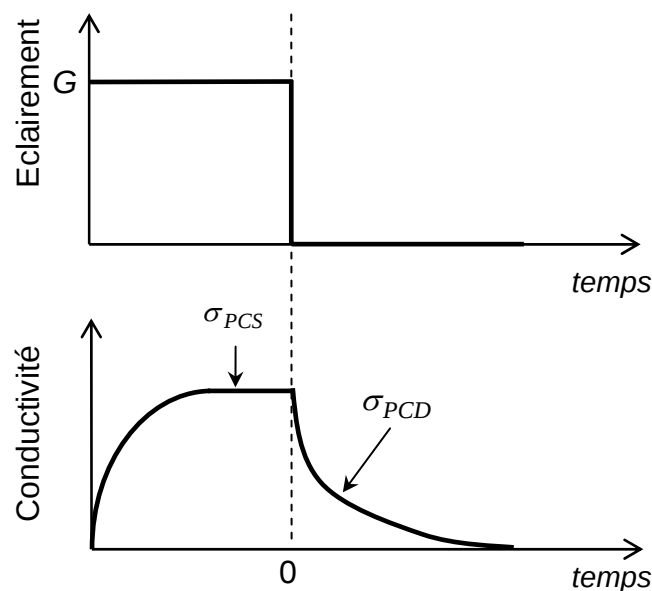


Figure D.3: Chronogrammes décrivant les différentes étapes de l'expérience de PCD. Les diverses notations sont expliquées dans le texte.

D.4. Mise en équations et simulation

D.4.1. Calcul du transitoire de la photoconductivité

Dans notre simulation numérique, le transitoire de la photoconductivité est calculé à partir de l'équation suivante:

$$\sigma_{PCD}(t) = e[\mu_n n(t) + \mu_p p(t)] - \sigma_0 \quad (D.1)$$

où e est la charge électronique, μ_n et μ_p sont les mobilités des électrons et des trous dans les états étendus, $n(t)$ et $p(t)$ sont les densités des électrons et des trous libres à l'instant t et σ_0 est la conductivité sous obscurité à la température considérée (cf. § C.5.1).

Pour chaque calcul de la conductivité PCD en fonction du temps, il faut fixer un certain nombre de paramètres nécessaires qui sont:

- Les paramètres microscopiques du a-Si:H choisis (voir Tableau C.1 pour les paramètres standard).
- Les paramètres externes relatifs au déroulement des étapes de la PCD, c'est à dire la température T et le taux de génération G de l'éclairement initial.

D.4.2. Procédures de calcul

Après rupture de l'éclairement, le photocourant décroît en fonction du temps. Pour évaluer à tout instant la PCD, il faut résoudre le système d'équations cinétiques dérivant des équations de continuité [Eqs. (C.10.a) et (C.10.b)] où $G = 0$:

$$\frac{dn(t)}{dt} = -U_n(t) \quad (D.2.a)$$

$$\frac{dp(t)}{dt} = -U_p(t) \quad (D.2.b)$$

On rappelle que $U_n(t)$ et $U_p(t)$ sont les taux nets de capture des électrons et des trous respectivement.

Comme pour le régime stationnaire, on peut par analogie définir de la même façon deux quasi-niveaux de Fermi pendant la décroissance de la PCD. En effet, pour les mêmes raisons évoquées pour le régime permanent (cf. § C.6.3), nous optons ici également pour ces variables dans le calcul de σ_{PCD} . Nous pouvons ainsi déduire des équations (C.35.a) et (C.35.b) les relations suivantes:

$$\frac{dE_{Fn}(t)}{dt} = \frac{k_B T}{n} \frac{dn(t)}{dt} \quad (D.3.a)$$

$$\frac{dE_{Fp}(t)}{dt} = -\frac{k_B T}{p} \frac{dp(t)}{dt} \quad (\text{D.3.b})$$

Les autres équations cinétiques régissant les concentrations des densités de charges sur les défauts sont données par les équations (C.22.a) et (C.22.b) pour les niveaux des deux queues de bandes et par les équations (C.23.a) et (C.23.b) pour les concentration des liaisons pendantes chargées Q_{db}^- et Q_{db}^+ . Ainsi, nous avons $(2N + 6)$ équations et le même nombre d'inconnues. On rappelle que N est le nombre de pas de discrétisation des deux queues de bandes (cf. § C.4.4). La concentration des LPs neutres peut à tout moment être déduite de l'équation (C.23.c) traduisant la conservation du nombre total de liaisons pendantes. De plus, nous avons l'équation de conservation de la neutralité électrique dont il faut tenir compte de façon explicite dans le calcul. On se retrouve ainsi avec une équation supplémentaire par rapport au nombre des variables. Cela nous permet d'éliminer la variable Q_{db}^+ du processus de calcul principal pour se retrouver en définitive avec $(2N + 5)$ variables et autant d'équations.

Les équations cinétiques des quasi-niveaux de Fermi ainsi que celles des densités de charges sur les états localisés peuvent s'écrire sous la forme condensée suivante:

$$\frac{dq_s}{dt} = y_s(q_1, q_2, \dots, q_M), \quad s = 1, \dots, M \quad (\text{D.4})$$

avec $M = 2N + 5$. Les différentes variables q_s représentent, pour les différentes valeurs de s , les variables prises en compte et qui s'identifient par les relations suivantes:

$$q_1 = E_{Fn}$$

$$q_s = Q_{ct}(E_s) \quad (2 \leq s \leq N + 2)$$

$$q_{N+3} = Q_{db}^-$$

$$q_s = Q_{vt}(E_s) \quad (N + 4 \leq s \leq 2N + 4)$$

$$q_M = E_{Fp}$$

Les équations cinétiques résultant de (D.4) forment ainsi un système d'équations différentielles non linéaires couplées et qui présentent des produits de variables. De plus, ce genre de système est dit "raide" (*stiff system*) à cause de la grande disparité existant entre les différentes valeurs des variables. Il s'agit d'un système avec conditions initiales. Sa résolution nécessite l'utilisation d'une méthode numérique implicite recommandée pour de tels systèmes. Nous avons utilisé la méthode semi-implicite d'Euler où la résolution se fait par linéarisation selon la méthode de Newton [122,123]. Cela nous a permis d'utiliser

des pas en temps Δt raisonnables pour optimiser les temps de calcul. Nous avons utilisé une des méthodes améliorées d'Euler dont la formule, pour chaque variable, s'écrit:

$$q_s(t + \Delta t) = q_s(t) + \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{dq_s(t)}{dt} + \frac{dq_s(t + \Delta t)}{dt} \right) \quad (D.5)$$

où le point d'arrivée est utilisé dans l'évaluation de la correction. En effet, cette équation dérive de la méthode élémentaire d'Euler pour la résolution des équations différentielles non linéaires. Elle a été améliorée en poussant l'ordre du développement à trois (erreur en $O(t^3)$) sans pour autant introduire dans l'expression approchée les dérivées d'ordre supérieur. Cela est possible en utilisant la formule des trapèzes pour le calcul numérique de l'intégrale du second membre de chaque équation différentielle.

En notant $t_k = t$ et $t_{k+1} = t + \Delta t$, les pas de départ et d'arrivée, et en utilisant les notations de l'équation (D.4), le schéma de la méthode peut se réécrire de la manière suivante:

$$F_{q_s} = \frac{\Delta t}{2} y_s(t_{k+1}) - q_s(t_{k+1}) + \left[\frac{\Delta t}{2} y_s(t_k) + q_s(t_k) \right] = 0, \quad s = 1, \dots, M \quad (D.6)$$

A chaque pas de temps le calcul approché des variables q_s nécessite la résolution du système de M équations non linéaires au pas de temps $k+1$ suivant:

$$F_{q_s} [q_1(t_{k+1}), \dots, q_M(t_{k+1})] = 0, \quad s = 1, \dots, M \quad (D.7)$$

Nous utilisons pour sa résolution la méthode de Newton pour les systèmes non linéaires basée sur le développement de Taylor à l'ordre un. Les valeurs des variables sont approchées par approximations successives. Après linéarisation, on peut écrire à la $(l+1)^{ème}$ itération:

$$F_{q_s} [q_1^{l+1}(t_{k+1}), \dots, q_M^{l+1}(t_{k+1})] = F_{q_s} [q_1^l(t_{k+1}), \dots, q_M^l(t_{k+1})] + \sum_{m=1}^M \left(\frac{\partial F_{q_s}}{\partial q_m} \bigg|_{t_{k+1}}^l \Delta q_m \right) \quad (D.8)$$

avec $\Delta q_m = q_m^{l+1}(t_{k+1}) - q_m^l(t_{k+1})$. Le terme dans la sommation $J_{sm}^l(t_{k+1}) = \frac{\partial F_{q_s}}{\partial q_m} \bigg|_{t_{k+1}}^l$

désigne les coefficients de la matrice jacobienne écrits à l'instant t_{k+1} et à l'itération précédente l .

Les équations découlant de (D.8) forment un système d'équations linéaires de M équations à M inconnues q_s pour chaque pas de temps. Le modèle de densité d'états et celui de capture et d'émission des porteurs pour lesquels nous avons opté dans cette

simulation produit une matrice jacobienne relativement peu dense. Cela nous permet d'utiliser la méthode usuelle de l'élimination progressive des inconnues pour évaluer à chaque itération les variables. Cela évite l'utilisation d'une méthode numérique supplémentaire d'inversion de matrices qui serait très coûteuse en temps de calcul.

En résumé, le transitoire de la photoconductivité à une température T fixée est alors calculé à partir de $t = 0$, l'instant où l'éclairement est interrompu. A cet instant, les différentes variables (q_{s0}) correspondent à celles du régime permanent, *i.e.* celles résultant de la photoconductivité stationnaire [124]. Une variation exponentielle du pas de temps est utilisée dans l'opération de discrétisation nécessaire à la résolution numérique du système d'équations différentielles. Entre deux itérations en temps, on procède à la résolution du système d'équations (D.8). Les solutions des variables à l'instant précédent sont alors utilisées comme valeurs de départ.

L'organigramme du calcul est représenté dans les figures D.4(a) et D.4(b). Le test d'arrêt se fait sur les variables principales: les deux quasi-niveaux de Fermi. Pour chaque itération en temps, le système d'équations (D.8) est résolu itérativement jusqu'à ce que les erreurs relatives sur E_{Fn} et E_{Fp} soient inférieures à une limite fixée ε . Cet organigramme est ensuite traduit en langage Pascal, sous environnement Delphi, qui permet de bénéficier d'une précision à 20 chiffres (type réel *extended*) qui est dans notre cas suffisant pour éviter les erreurs de troncature pouvant résulter de la manipulation de quantités d'ordres de grandeur très différents.

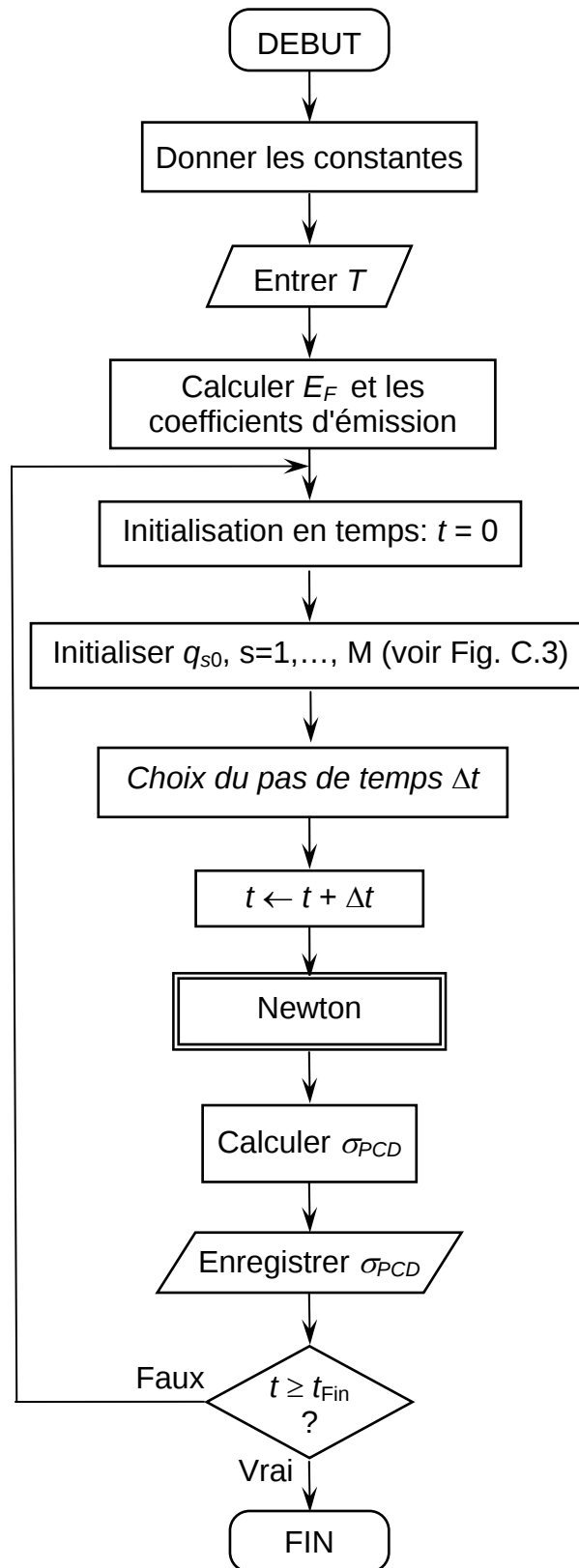


Figure D.4(a): Organigramme pour le calcul de la décroissance de la photoconductivité σ_{PCD} . La séquence "Newton" est explicitée dans la Fig. D.4(b) suivante.

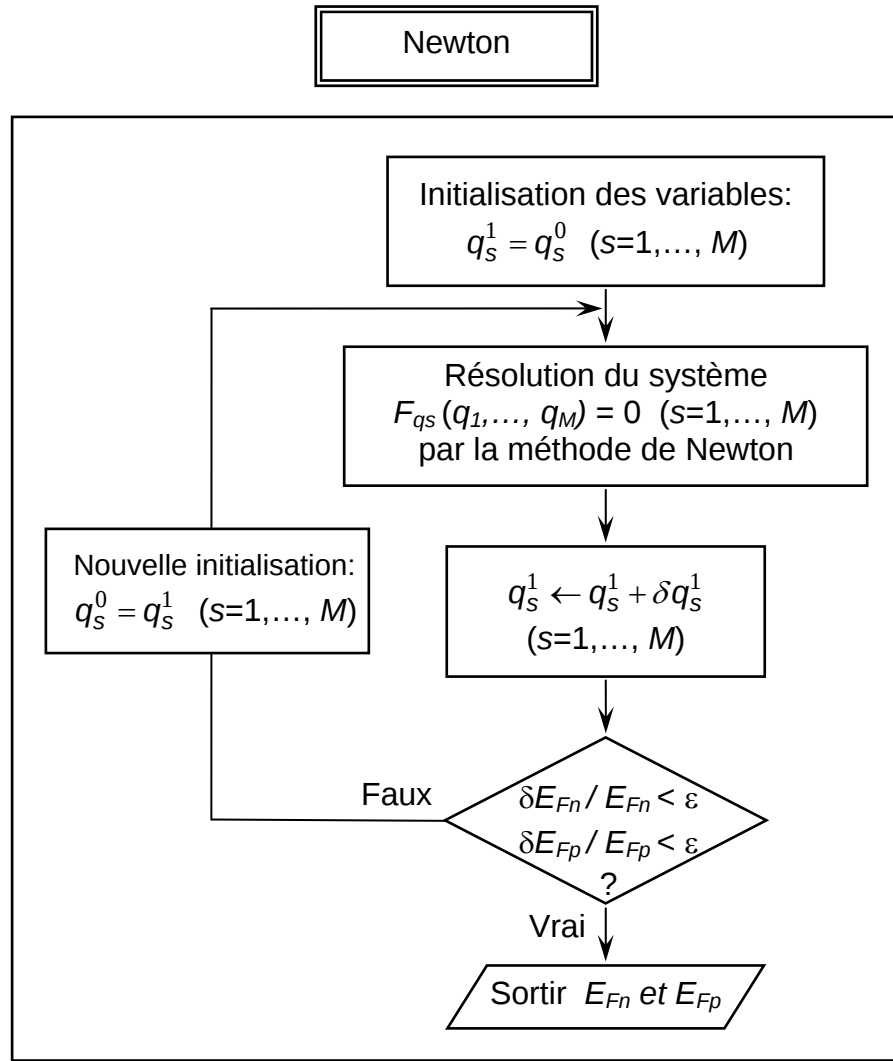


Figure D.4(b): Développement de la séquence "Newton" de l'organigramme précédent [Fig. D.4(a)] pour le calcul des corrections des différentes variables.

D.5. Résultats de la simulation numérique et discussion

Dans cette partie, nous présentons les résultats obtenus à partir du calcul. La première partie est consacrée à la description de la conductivité PCD en fonctions du temps. La deuxième partie porte sur l'étude de l'influence de quelques paramètres microscopiques sur la forme de la réponse temporelle de la décroissance de la photoconductivité. La troisième et dernière partie est consacrée à la comparaison et à une vérification mutuelle de la simulation du présent travail avec quelques résultats numériques de calcul obtenus sur une structure métal/a-Si:H.

D.5.1. Description générale

D.5.1.a. Transitoire de la photoconductivité (PCD)

En utilisant les paramètres microscopiques (voir Tableau C.1), correspondant aux échantillons de a-Si:H dits de bonne qualité électronique, on obtient la caractéristique de la conductivité PCD (σ_{PCD}) en fonction du temps présentée sur la figure D.5. La température est fixée à $T = 300\text{ K}$ et le taux de génération à $G = 10^{17}\text{ cm}^{-3}\text{ s}^{-1}$. La conductivité $\sigma_{PCD}(t)$ présente deux comportements qui se présentent sous forme de deux paliers séparés par un épaulement aux alentours de $t_0 = 5 \times 10^{-7}\text{ s}$. Ce point correspond pratiquement à la fin de la décroissance rapide de σ_{PCD} avant d'amorcer le second palier. Après ce dernier, σ_{PCD} diminue rapidement pour atteindre finalement la conductivité d'obscurité. Les deux phases, séparées par l'instant t_0 , sont notées (I) et (II) en prévision des discussions à venir.

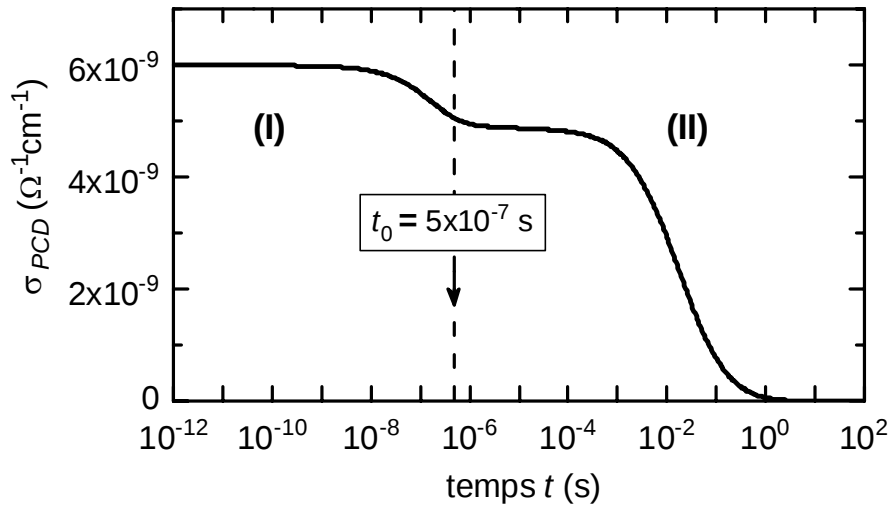


Figure D.5: Photoconductivité transitoire σ_{PCD} calculée entre 1 ps et 100 s pour les paramètres standard [Tab. C.1].

Expérimentalement, il arrive qu'on observe un tel comportement sur des échantillons de a-Si:H et de silicium microcristallin ($\mu\text{c-Si:H}$) [110-112]. Il faut noter que les instants inférieurs à la nanoseconde, après interruption de la lumière, sont difficiles à atteindre expérimentalement pour des raisons techniques.

Pour expliquer l'évolution temporelle de la conductivité PCD, nous avons reporté sur la figure D.6 les variations des concentrations excédentaires des électrons et des trous libres, Δn et Δp , en fonction du temps. Nous remarquons sur cette figure que Δn suit les

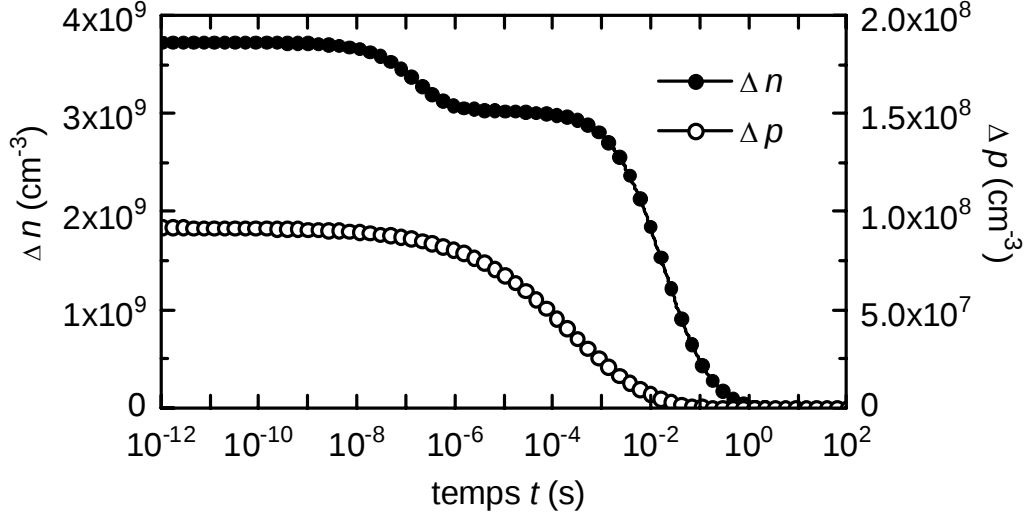


Figure D.6: Concentration excédentaire des électrons libres (Δn) et celle des trous libres (Δp) en fonction du temps durant le transitoire de la photoconductivité.

mêmes variations que la conductivité transitoire σ_{PCD} confirmant le type n du a-Si:H non dopé (voir § B.5.2). Cette constatation nous permet d'expliquer la forme de σ_{PCD} en décrivant les processus de capture et d'émission régissant particulièrement les électrons. Quant à la concentration excédentaire des trous Δp , elle présente au début du transitoire une décroissance lente et monotone avant de décroître rapidement pour enfin s'annuler.

La figure D.7 montre, en fonction du temps, la concentration d'électrons dans la queue de bande de conduction (QBC), Q_{ct} , la concentration de trous dans la queue de bande de valence (QBV), Q_{vt} , ainsi que les densités des liaisons pendantes (LPs) dans les différents états de charge D^- , D^0 , et D^+ , Q_{db}^- , Q_{db}^0 et Q_{db}^+ . Toutes les concentrations présentent un palier plus ou moins long avant de tendre vers leurs valeurs d'équilibre respectives. Pour le jeu de paramètres standard, la température et le taux de génération retenus dans notre calcul, on constate que Q_{db}^+ et Q_{ct} sont faibles devant les deux autres densités de charges [124]. Pendant ce transitoire, la neutralité électrique est vérifiée essentiellement entre Q_{db}^- et Q_{vt} . Sur la figure D.8, on représente les densités majoritaires en échelle linéaire. On y voit clairement que Q_{db}^0 et Q_{db}^- rejoignent leur valeur à l'équilibre supérieure et inférieure respectivement avec la même allure pour maintenir constante la concentration totale de LPs N_{db} [Eq. (C.23.c)]. Naturellement, Q_{vt} suit la décroissance de Q_{db}^- pour continuer à satisfaire la neutralité électrique.

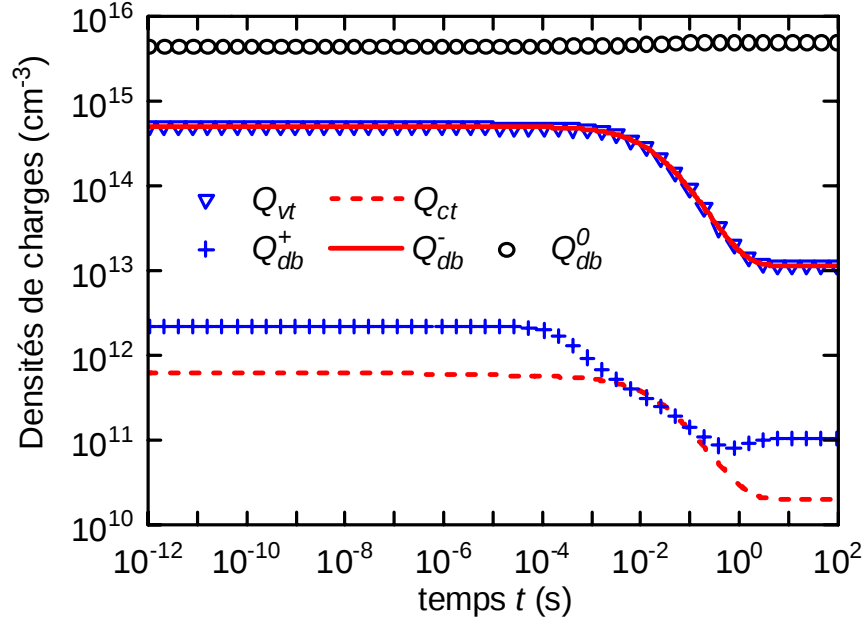


Figure D.7: Evolution de toutes les densités de charge sur les états localisés en fonction du temps: densité de charge positive sur la QBV (Q_{vt}), densité de charge négative sur la QBC (Q_{ct}), concentration des liaisons pendantes D^- , D^0 et D^+ (Q_{db}^- , Q_{db}^0 , et Q_{db}^+).

La figure D.9 représente l'évolution temporelle des positions des quasi-niveaux de Fermi des électrons et des trous, E_{Fn} et E_{Fp} , par rapport au sommet de la bande de valence. Le niveau de Fermi E_F est également représenté. On retrouve les paliers déjà décrits dans la figure précédente. Comme toutes ces grandeurs sont liées aux concentrations des porteurs libres, l'épaule observé sur $\sigma_{PCD}(t)$ en $t_0 = 5 \times 10^{-7}$ s

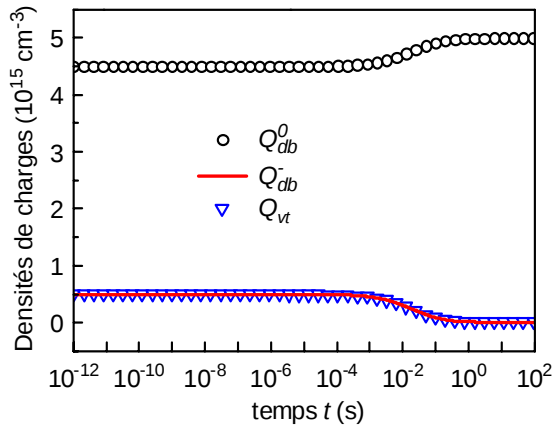


Figure D.8: Représentation en échelle linéaire des densités de charge Q_{vt} et des concentrations Q_{db}^0 et Q_{db}^- .

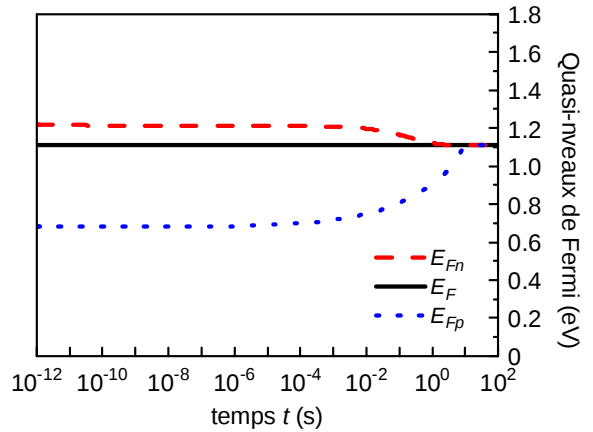


Figure D.9: Evolution temporelle des quasi-niveaux de Fermi des électrons E_{Fn} et des trous E_{Fp} calculés par rapport au sommet de la bande de valence E_v ($E_v = 0$).

apparaît également sur toutes ces grandeurs. Cependant il est moins perceptible dans ces différentes représentations graphiques à cause des ordres de grandeur des densités en présence.

Nous représentons sur la figure D.10 les diagrammes d'énergie illustrant l'occupation des états localisés des deux queues de bandes du modèle à des instants précis de la PCD. $N_{Q_{ct}}(E)$ est la répartition des électrons piégés sur la QBC et $N_{Q_{vt}}(E)$ celle des trous piégés sur la QBV. On précise que la densité d'électrons sur la QBC et celle de trous sur la QBV peuvent s'écrire bien sûr à partir de ces fonctions à l'aide des relations suivantes:

$$Q_{ct} = \int_{E_c}^{E_v} N_{Q_{ct}}(E) dE \quad (D.9.a)$$

$$Q_{vt} = \int_{E_c}^{E_v} N_{Q_{vt}}(E) dE \quad (D.9.b)$$

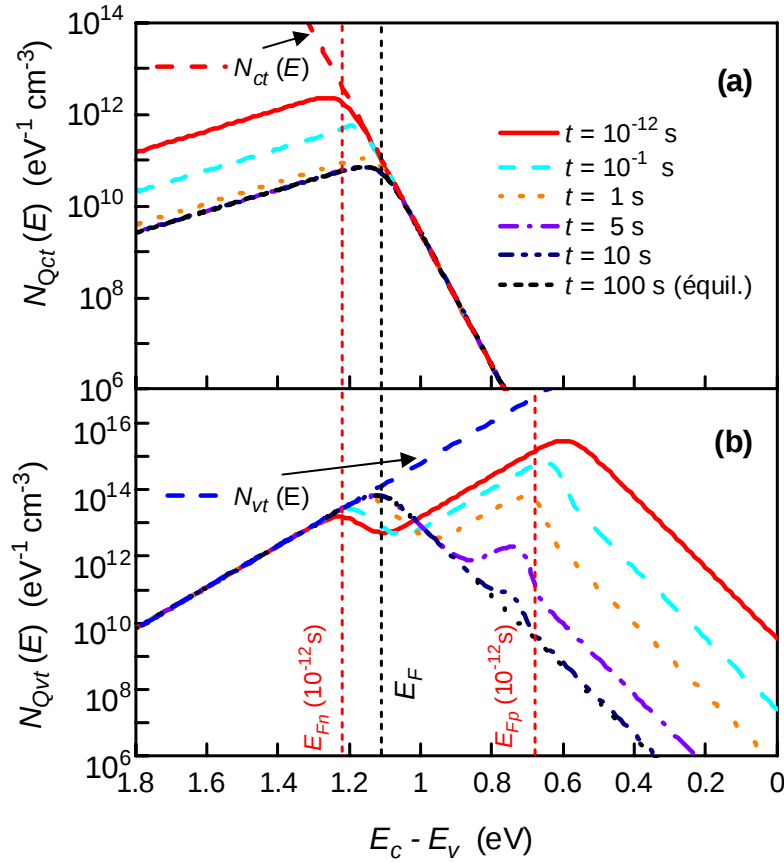


Figure D.10: Tracés des profils d'occupation des états localisés de la QBC ($N_{Q_{ct}}(E)$) (a) et de la QBV ($N_{Q_{vt}}(E)$) (b) en fonction de l'énergie du gap pour six instants t sélectionnés sur le transitoire. E_{Fn} et E_{Fp} sont les quasi-niveaux de Fermi pour les électrons et les trous et E_F est le niveau de Fermi à l'équilibre. Les densités des niveaux d'énergie discrets des LPs ne sont pas représentées.

Sur cette même figure, les deux quasi-niveaux de Fermi des électrons et des trous sont représentés au début et à la fin du transitoire (équilibre). Pendant le processus de relaxation, ces deux quasi-niveaux tendent vers le niveau de Fermi E_F à l'équilibre, d'abord lentement puis rapidement vers la fin du transitoire. Les queues de bandes sont occupées par les électrons et les trous piégés pendant l'illumination. La thermalisation du système entraîne la libération des charges à partir des deux queues de bandes pour qu'elles retrouvent leurs profils d'occupation à l'équilibre. On remarque sur la figure D.10(a) que la QBC atteint en premier son état d'équilibre suivie quelques secondes plus tard par la QBV [Fig. D.10(b)]. Ceci était prévisible car dans le a-Si:H, la QBV est plus large que la QBC.

Ce retour à l'équilibre se traduit par des processus d'émission, de capture et de recombinaison des électrons et des trous. Pour identifier les processus dominants au cours du transitoire de la photoconductivité, il est nécessaire d'examiner les différentes vitesses de capture et d'émission partiels des électrons et des trous par les différents états localisés pris en compte dans notre modèle. C'est l'objet de la section suivante.

D.5.1.b. Taux nets de capture

Pour élucider les différentes variations observées sur le transitoire de la conductivité PCD, et donc sur les concentrations excédentaires Δn et Δp , nous avons besoin d'identifier les centres responsables de la recombinaison et du piégeage. Pour cela nous traçons les taux nets de capture par chaque groupe d'états localisés en fonction du temps. Nous représentons simultanément sur la figure D.11 les concentrations Δn et Δp [Fig. D.11(a)] ainsi que les différents taux net de capture partiels, des électrons et des trous, concernant la QBC (U_{nct} et U_{pct}), la QBV (U_{nvt} et U_{pvt}) et les LPs (U_{ndb} et U_{pdb}) [Fig. D.11(b)]. Ces termes sont introduits et définis dans la section C.4.1. Rappelons ici les équations cinétiques des électrons et des trous écrits en fonction de ces différents taux après l'interruption de l'éclairement ($G = 0$):

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -U_n = -U_{nct} - U_{nvt} - U_{ndb} \quad (\text{D.10.a})$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -U_p = -U_{pct} - U_{pvt} - U_{pdb} \quad (\text{D.10.b})$$

Chaque taux net de capture total s'écrit en fonction des taux de capture et d'émission élémentaires comme cela est détaillé dans la section C.4.1 dans les équations (C.18.a) à (C.18.d) et les équations (C.21.a) et (C.21.b). Il est à noter que lorsqu'un taux de capture est positif, cela signifie que le centre associé joue un rôle de capteur de porteurs et s'il est négatif il s'agit alors d'un centre d'émission. Il faut rappeler aussi qu'un centre est dit de

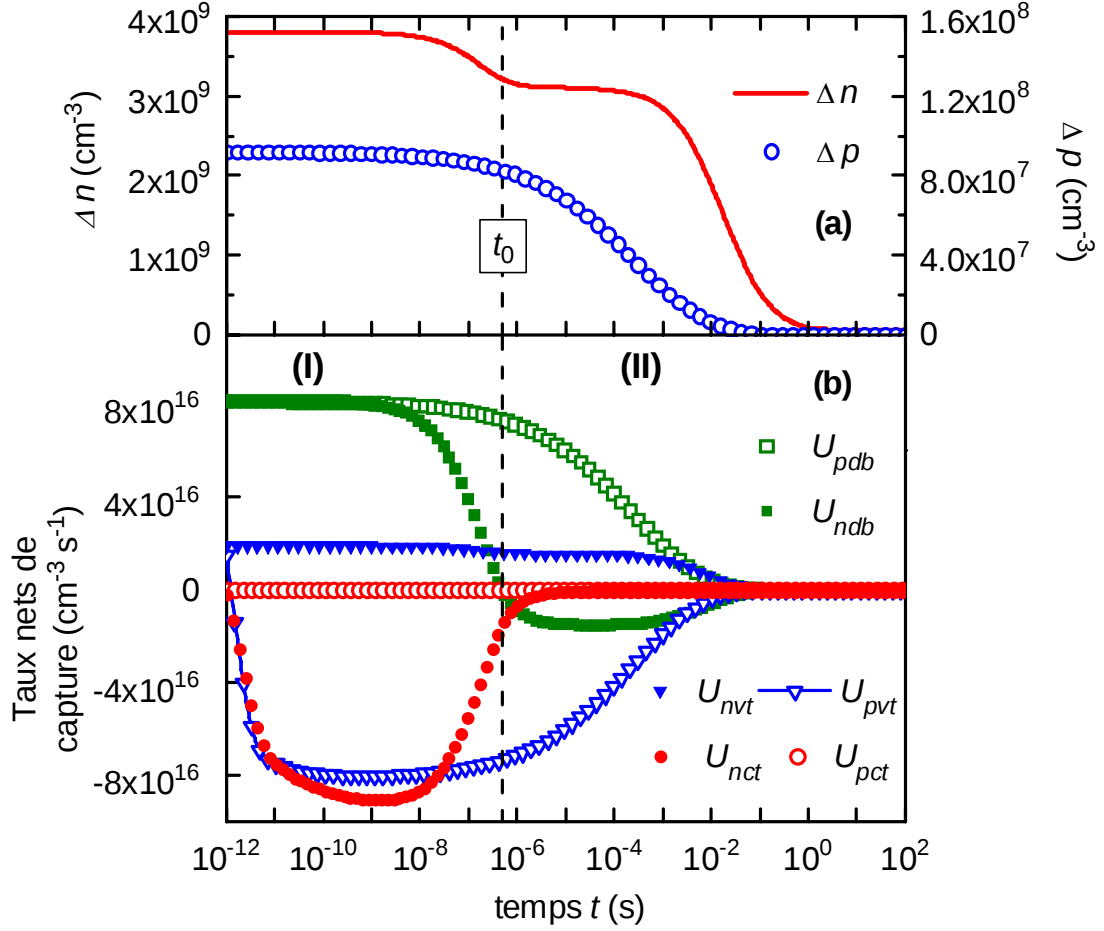


Figure D.11: Représentation simultanée, en fonction du temps, des concentrations Δn et Δp (a) et de tous les taux nets de capture partiels des électrons (U_{nct} , U_{nvt} et U_{ndb}) et des trous (U_{pct} , U_{pvt} et U_{pdb}) (b).

recombinaison lorsque les taux nets de capture des électrons et des trous qui le concernent sont égaux. On parle alors de taux nets de recombinaison. Dans le cas du régime permanent, tous les taux nets de capture des électrons sont égaux à leurs homologues des trous (voir section C.6).

Il faut souligner que les taux concernant les deux queues de bandes représentent la capture nette découlant de tous les échanges sur tous les états. En effet, selon les gammes de temps, les états des queues de bandes peuvent être classés, selon leur position et leur occupation, en centres de recombinaison ou en niveaux pièges à électrons (pour la QBC) et en niveaux pièges à trous (pour la QBV). Les taux U_{nct} , U_{nvt} , U_{pct} et U_{pvt} représentent en fait les processus de capture ou d'émission résultant des différents types d'échanges élémentaires en présence (voir équations (C.18.a) à (C.18.d)).

Nous proposons également dans la figure D.12 les tracés, en fonction du temps, de U_n et U_p (a), U_{nvt} et U_{ndb} ainsi que l'opposé de U_{nct} (b) et U_{pdb} , U_{pct} ainsi que

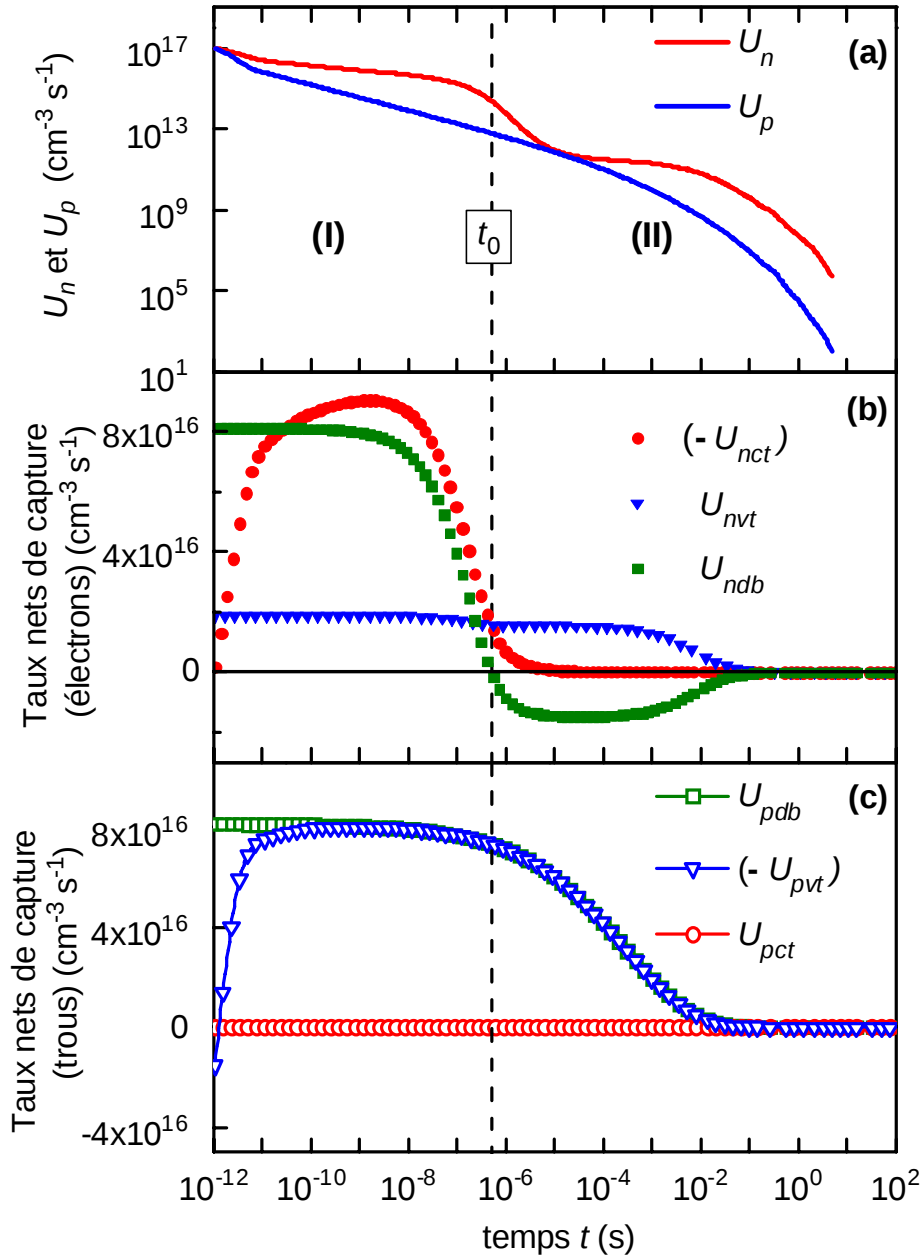


Figure D.12: Evolution avec le temps du taux net total de capture des électrons U_n et celui des trous U_p (a), des taux nets de capture des électrons U_{ndb} , U_{nvt} et $(-U_{nct})$ (b) ainsi que les taux nets de capture des trous U_{pdb} , $(-U_{pvt})$ et U_{pct} (c).

l'opposé de U_{pvt} (c). Les grandeurs représentées dans les figures D.12(b) et D.12(c) sont tracées en vue de comparer entre elles celles associées à l'émission et à la capture d'un type de porteur donné dans certaines gammes de temps.

A $t = 0$, le taux net de recombinaison des électrons U_n et celui des trous U_p sont positifs et tout les deux égaux au taux de génération ($G = 10^{17} \text{ cm}^{-3} \text{s}^{-1}$) comme on le voit sur la figure D.12(a). C'est le régime stationnaire dans lequel la recombinaison compense

exactement la génération optique des porteurs en excès. Toutes les composantes de U_n et de U_p sont également positives car tous les états localisés sont des centres de recombinaison. Dans ce cas, la recombinaison sur les LPs est prédominante ($U_{ndb} > U_{nvt} > U_{nct}$) [124].

Après interruption de l'éclairement, tous ces taux vont prendre des valeurs variables différentes pour que le système puisse retrouver son état d'équilibre à la fin du transitoire. Comme le montre la figure D.12(a), U_n et U_p sont positifs pendant toute la durée du transitoire qui correspond à des vitesses dn/dt et dp/dt négatives. Cela entraîne, comme cela est prévisible, la décroissance des concentrations excédentaires Δn et Δp jusqu'à leur annulation. L'instant t_0 localisé sur l'épaulement apparu sur $\sigma_{PCD}(t)$ correspond à la valeur zéro de U_{ndb} qui passe d'une valeur positive à une valeur négative (voir Fig. D.11(b)). Dans la discussion qui va suivre, rappelons que la phase I correspond à la courte période précédant t_0 et la phase II à celle qui suit et qui s'étend jusqu'à l'équilibre. On retrouve sur U_n cette singularité ainsi que deux gammes de variation. Ces deux phases sont également délimitées sur la figure D.12. Quant à U_p , il décroît de façon monotone pendant toute la durée du transitoire en conformité avec $\Delta p(t)$. Dans la suite, nous décrivons les variations de Δn et de Δp , en fonction du temps, en se servant de l'évolution temporelle de tous les taux nets de capture des figures (D.11) et (D.12).

Dans la première phase (I), lorsque l'illumination cesse ($G = 0$), U_{nct} devient brusquement négative et le reste jusqu'à la fin du transitoire. Ce qui signifie que la QBC commence à réémettre les électrons, piégés au préalable en régime stationnaire, vers la bande de conduction. ($-U_{nct}$) augmente très vite puis passe par un maximum pour décroître à la fin de la période I. Le taux net de capture de trous par la QBC, U_{pct} , est très faible car la transition est très peu probable [Fig D.11(b)].

Quant aux LPs, dans cette même phase I, les taux associés U_{ndb} et U_{pdb} sont d'abord égaux jusqu'à l'instant $t \approx 10^{-9}$ s puis U_{ndb} décroît rapidement pour s'annuler en $t = t_0$. Cependant, U_{pdb} continue à décroître lentement de façon monotone pour s'annuler plus tard. Donc, dans la première partie, les liaisons pendantes sont centres de recombinaison. Après le décrochage, les LPs capturent de moins en moins d'électrons jusqu'à l'annulation de U_{ndb} en $t_0 = 5 \times 10^{-7}$ s. Cette décroissance rapide est engendrée par celle de U_{nct} (voir Fig. D.12(b)). En effet, les électrons excédentaires piégés initialement dans la QBC s'épuisent et l'émission des électrons vers la bande de conduction diminue réduisant ainsi leur capture par les LPs.

En ce qui concerne U_{nvt} , il garde pratiquement sa valeur du régime permanent de départ et décroît très lentement. En $t = t_0$, il apparaît un épaulement très peu prononcé. Concernant U_{pvt} , il décroche de sa valeur stationnaire juste après la suppression de l'éclairement et devient négatif. Sa valeur absolue commence à croître très rapidement au début du transitoire pour atteindre un palier durant la phase I. Comme U_{pvt} reste très élevé devant U_{nvt} en valeur absolue signifie que la QBV émet les trous excédentaires, piégés auparavant pendant l'éclairement, vers la bande de valence pour retrouver sa concentration d'équilibre.

Au début de cette première phase, la concentration des électrons libres décroît lentement du fait de l'émission d'électrons de la QBC qui a lieu en même temps que leur recombinaison sur les LPs. La décroissance rapide à la fin de la zone I résulte de l'épuisement des électrons dans la QBC. Les trous, qui présentent une faible décroissance tout au long de la phase I, proviennent de l'émission de trous de la QBV. Leur recombinaison s'effectue sur les LPs. Nous avons $U_{pdb} = -U_{pvt}$ pendant tout le transitoire excepté pendant un très court instant juste après l'interruption de l'éclairement [Fig. D.12(c)]. Les trous émis par la QBV se recombinent à la même vitesse sur les LPs.

Dans la phase II suivante, seul U_{ndb} change de signe et devient négatif. Les LPs passent ainsi de capteurs à émetteurs d'électrons. Ce qui explique le ralentissement à nouveau dans la décroissance de Δn et l'apparition du deuxième palier. C'est les liaisons D^- qui émettent des électrons dont la concentration Q_{db}^- diminue d'abord lentement puis très rapidement à la fin du transitoire pour retrouver sa valeur à l'équilibre (voir Figures. D.7 et D.8).

Contrairement à U_{nvt} , qui continue à diminuer lentement, U_{nct} devient très faible dans la phase II car il ne reste presque plus d'électrons excédentaires piégés sur la QBC [Fig. D.10(a)]. Le rôle joué par la QBC devient insignifiant à cause de la faible valeur de kT_c . Pour U_{pdb} et U_{pvt} , la situation initiale persiste jusqu'à la fin du transitoire.

La fin de la phase II est marquée par une décroissance rapide de Δn et Δp vers zéro accompagnée naturellement de l'annulation de tout les taux de capture [Fig. D.11(b)].

Avant de conclure cette section, notons que la concentration des trous Δp décroît d'abord lentement dans la première phase puis plus rapidement avant de s'annuler. Son allure s'explique de la même manière que pour les électrons à l'aide des taux nets de capture les concernant. Durant tout le transitoire, U_{pct} est très faible en valeur absolue devant U_{pdb} et U_{pvt} , U_{pdb} est positif et U_{pvt} devient très vite négatif. Cela signifie que

c'est les états de la QBV qui émettent des trous vers la bande de valence et les liaisons pendantes sont centres de recombinaison.

En résumé, on voit ainsi que la première partie du transitoire (I) est contrôlé principalement par l'émission d'électrons à partir de la QBC (pièges peu profonds), la recombinaison se fait sur les LPs. Après l'épaulement, c'est les liaisons pendantes qui émettent des électrons d'où le ralentissement dans la décroissance de la PCD. A la fin du transitoire, la décroissance de la PCD est le résultat combinée de la décroissance de U_{nvt} et U_{ndb} .

D.5.2. Effet des états localisés

Pour compléter les descriptions données précédemment, nous présentons dans cette section l'action de divers paramètres microscopiques liés aux états localisés du a-Si:H sur la PCD. En particulier, nous faisons varier l'énergie caractéristique de chaque queue de bande, $k_B T_c$ et $k_B T_v$, ainsi que la concentration totale de liaisons pendantes N_{db} .

D.5.2.a. La queue de bande de conduction (QBC)

Les figures D.13(a) et D.13(b) montrent l'influence de l'énergie caractéristique $k_B T_c$ de la QBC sur la décroissance de la conductivité PCD et les taux de capture partiels des électrons U_{nct} , U_{nvt} et U_{ndb} . 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, l'amplitude de $\sigma_{PCD}(t)$ ne change pas beaucoup: il y a juste un petit décalage de l'épaulement. Lorsque $k_B T_c$ devient importante, l'épaulement a tendance à apparaître plus tard dans le transitoire. On voit bien sur la figure D.13(b) que l'annulation de U_{ndb} se décale dans le même sens. Ce retard est occasionné par le fait que la QBC est plus large et donc se vide plus tard de ses électrons piégés initialement sous éclaircissement. U_{nvt} ne subit aucune modification car très peu influencé par $k_B T_c$. Pour les taux nets de capture partiels des trous, ils restent inchangés car la QBC influence très peu la population des trous libres.

D.5.2.b. La queue de bande de valence (QBV)

Les figures D.14(a) et D.14(b) montrent l'influence de l'énergie caractéristique ($k_B T_v$) de la QBV sur la décroissance de la photoconductivité (PCD) et les taux de capture partiels des électrons U_{nct} , U_{nvt} et U_{ndb} . Nous avons là également considéré deux valeurs de $k_B T_v$ (60 et 80 meV) autour de la valeur standard (70 meV). Notons en particulier que lorsque la largeur de la queue de bande de valence diminue, l'amplitude de la PCD diminue

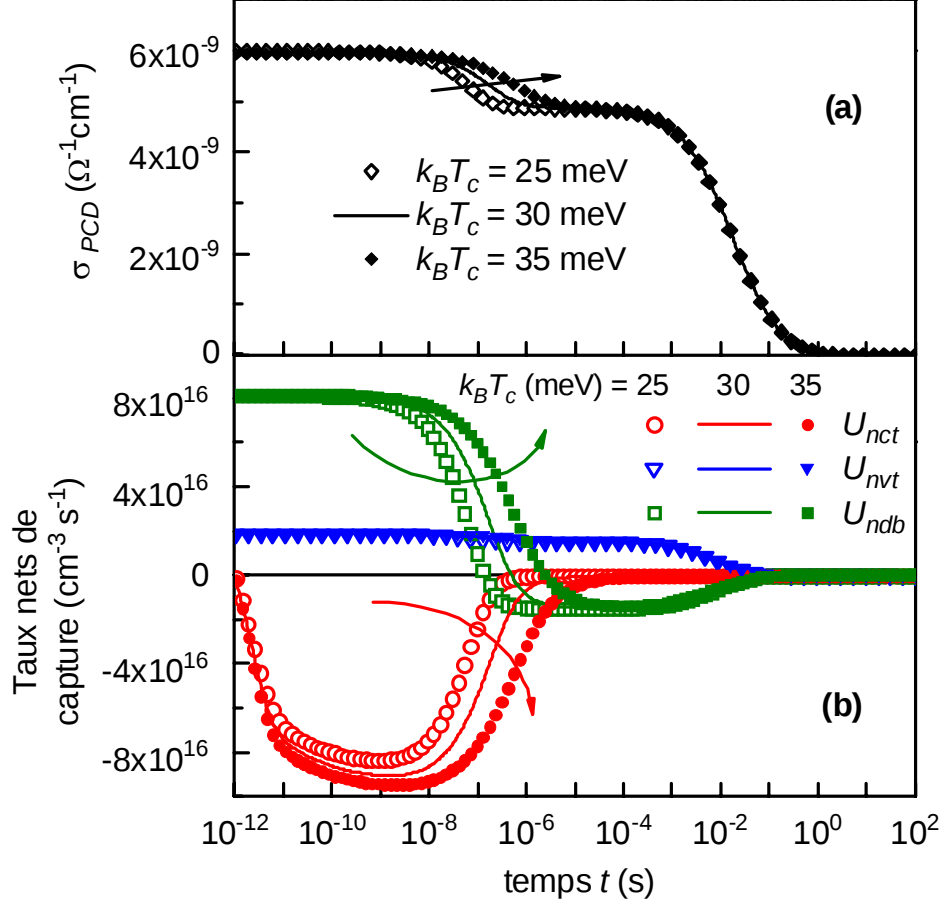


Figure D.13: Photoconductivité transitoire σ_{PCD} calculée pour trois valeurs différentes de l'énergie caractéristique $k_B T_c$ de la QBC **(a)** ainsi que les taux nets de capture des électrons (U_{nct} , U_{nvt} et U_{ndb}) correspondants **(b)**. Toutes les flèches indiquent dans quel sens $k_B T_c$ augmente.

tout en conservant la même allure générale. En particulier, l'épaule survient presque au même instant où U_{ndb} s'annule.

Comme cela est prévisible, U_{nct} ne change pas car ce taux est peu influençable par la population des trous. Par contre les amplitudes de U_{ndb} et U_{nvt} changent tout en conservant les mêmes signes dans quasiment les mêmes gammes de temps. U_{ndb} diminue dans la phase I et augmente en valeur absolue dans la zone II. Comme U_{nvt} augmente avec $k_B T_v$, la recombinaison sur la QBV devient plus importante. Par conséquent, la recombinaison sur les LPs devient moins efficace car Q_{db}^0 est plus faible du fait que Q_{db}^- est plus importante pour compenser Q_{vt} et satisfaire ainsi la neutralité électrique (entre Q_{vt} et Q_{db}^-), d'où la diminution de Δn et donc de σ_{PCD} . Il est important de noter ici que la pente de la décroissance finale de σ_{PCD} est plus élevée quand $k_B T_v$ augmente.

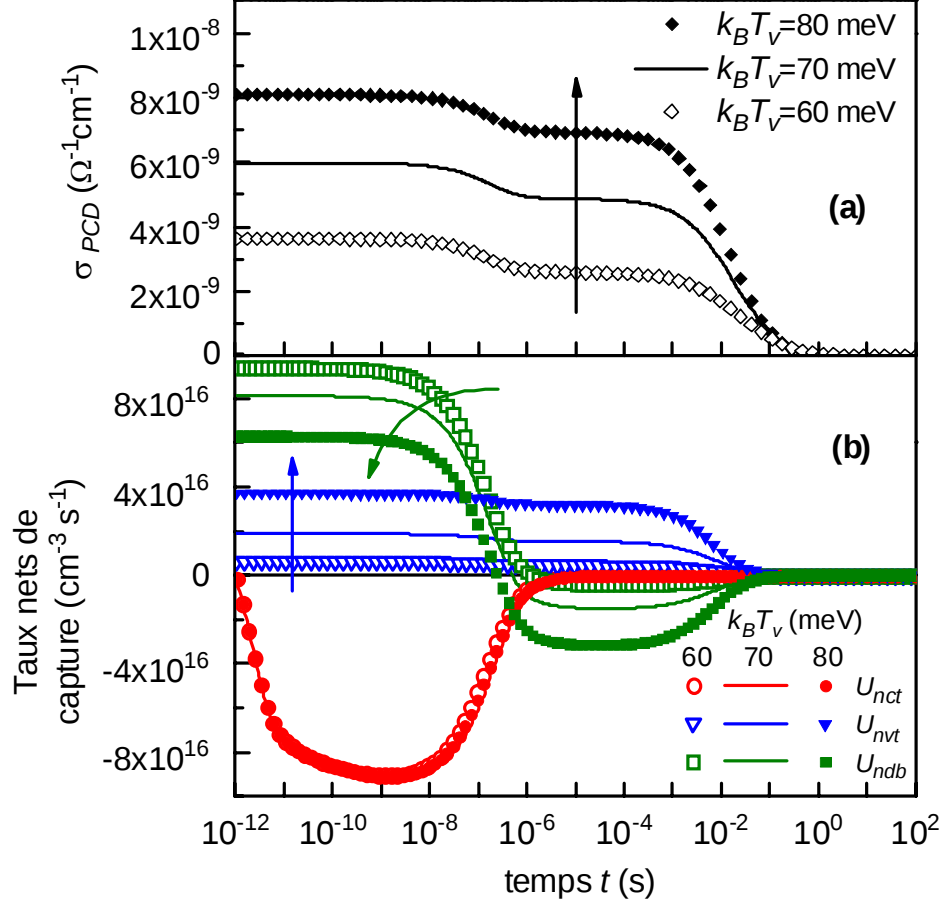


Figure D.14: Photoconductivité transitoire σ_{PCD} calculée pour trois différentes valeurs de l'énergie caractéristique $k_B T_v$ de la QBV (a) ainsi que les taux nets de capture des électrons (U_{nct} , U_{nvt} et U_{ndb}) correspondants (b). Toutes les flèches indiquent dans quel sens $k_B T_v$ augmente.

D.5.2.c. Les liaisons pendantes (LPs)

Les figures D.15(a) et D.15(b) montrent l'influence de la concentration totale de liaisons pendantes N_{db} sur la décroissance de la photoconductivité σ_{PCD} et les taux de capture partiels des électrons U_{nct} , U_{nvt} et U_{ndb} . Deux valeurs de N_{db} (10^{16} et $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$), supérieures à la valeur standard ($5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$), sont examinées.

L'amplitude de la photoconductivité transitoire diminue du fait de l'augmentation des centres de recombinaison. L'épaulement devient moins accentué lorsque N_{db} augmente car le passage de U_{ndb} par zéro se fait de manière moins franche. De plus, après son annulation, U_{ndb} reste proche de zéro.

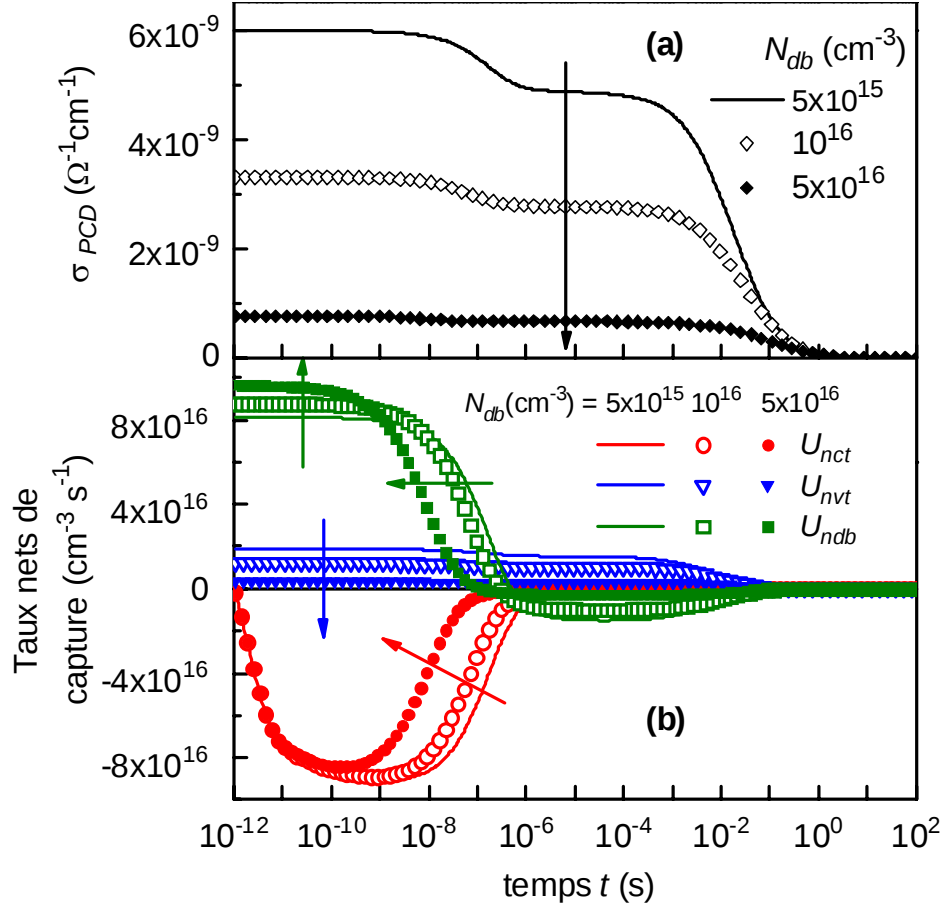


Figure D.15: Photoconductivité transitoire σ_{PCD} calculée pour trois différentes valeurs de la concentration totale de LPs, N_{db} (a) ainsi que les taux nets de recombinaisons des électrons (U_{nct} , U_{nvt} et U_{ndb}) correspondants (b).

D.5.3. Exploitation des résultats: comparaison avec le cas de la structure métal/a-Si:H

D.5.3.a. Cas du champ faible et du champ fort

La simulation présentée dans ce travail a été réalisée en un point. Les résultats obtenus peuvent traduire les propriétés du matériau en volume sous champ électrique faible. Expérimentalement, cela se fait en explorant les propriétés électriques de l'échantillon à l'aide de contacts ohmiques, en configuration coplanaire. La dépendance en temps des phénomènes étudiés, en plus de la densité complexe des états localisés du a-Si:H, rend le calcul très délicat lorsque la variable espace est introduite. Des problèmes importants de convergence et de stabilité apparaissent rendant les résultats incertains. De plus le calcul est très long dans ce cas. Toutefois, une tentative d'un tel calcul a pu être réalisée au laboratoire pour une structure métal/a-Si:H [125]. Quelques résultats

préliminaires ont été obtenus. Dans cette partie, nous allons comparer les quelques résultats obtenus avec ceux de notre travail et discuter leur pertinence. Dans la suite, nous désignons par LEF (*low electric field*) la simulation déjà décrite dans ce travail et par HEF (*high electric field*) celle réalisée dans une structure métal/a-Si:H [125].

Il est à noter que le calcul HEF a été réalisé à l'aide du même modèle de densité d'états en incluant les mêmes chemins de transition d'électrons et de trous que le présent travail. Les paramètres microscopiques standard [Table C.1] sont utilisés sauf pour les énergies caractéristiques des deux queues de bandes ($k_B T_c = 40 \text{ meV}$ et $k_B T_v = 60 \text{ meV}$). La température et le taux de génération sont également maintenus ($T = 300 \text{ K}$ et $G = 10^{17} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$).

La simulation HEF a nécessité l'utilisation des équations cinétiques de transport: l'équation de continuité et l'équation de Poisson à une dimension. Elles ont été résolues en temps et en espace pour différents champs électriques en incluant les champs forts [125].

D.5.3.b. Comparaison des résultats et discussion

Nous représentons sur la figure D.16 les caractéristiques transitoires de la photoconductivité σ_{PCD} , en unité relative, en fonction du temps obtenues à partir des simulations LEF et HEF. Dans le cas HEF, les courbes de conductivité PCD calculées pour trois valeurs du champ électrique moyen, en polarisation inverse, sont représentées. On retrouve sur chaque caractéristique les deux phases principales de variations (I et II) séparées par un épaulement (voir § D.5.1). Sous HEF, cet épaulement intervient plus tôt dans le transitoire lorsque le champ électrique augmente. De plus, le premier plateau a tendance à disparaître pour les champs élevés. Il est à noter que ce premier plateau est difficilement détectable expérimentalement pour les champs forts ou élevés. D'autre part, nous remarquons que lorsque le champ électrique diminue, les caractéristiques transitoires de la PCD tendent vers la limite "champs faible" représenté par le calcul LEF. Sur la figure D.16, nous avons également repéré les instants t_0 et t_2 qui délimitent les phases (I) et (II) pour les cas LEF et HEF ($E_2 = 3 \times 10^3 \text{ V/cm}$).

Pour comprendre les variations de la PCD en fonction du temps, il faut suivre l'évolution des profils dans la structure (partie a-Si:H) des différentes grandeurs à partir du régime permanent (interruption de la lumière) jusqu'à leurs valeurs respectives d'équilibre.

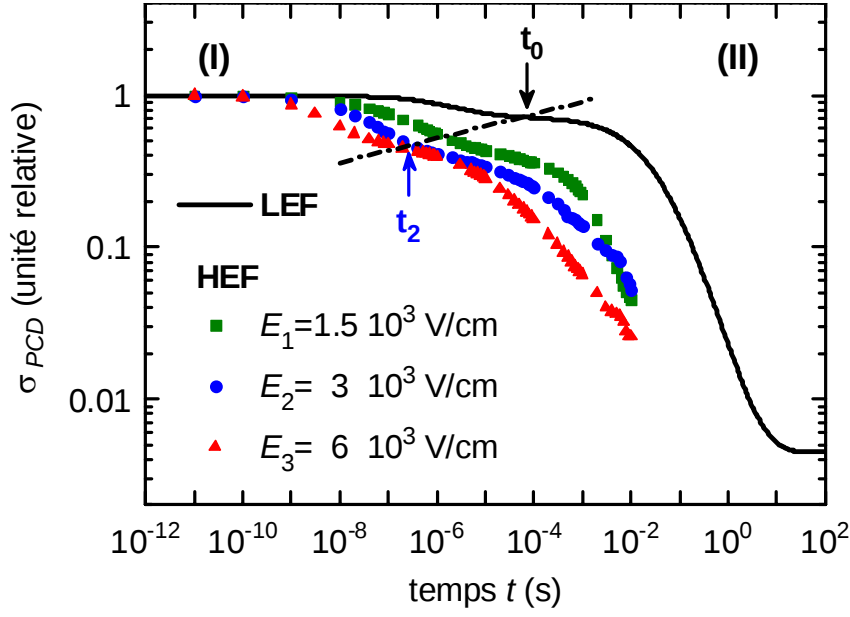


Figure D.16: Caractéristiques de photoconductivité transitoire σ_{PCD} calculées sous champ faible (LEF) et sous champ fort (HEF) pour différentes valeurs du champ électrique E_1, E_2 et E_3 .

Sur la figure D.17 sont reportés les profils des taux nets de capture des électrons par la QBC, la QBV et les LPs, U_{nct} , U_{nvt} et U_{ndb} , respectivement, pour une valeur du champ électrique ($E_2 = 3 \times 10^3 \text{ V/cm}$) et pour divers instants choisis. La profondeur x de la structure concerne la partie a-Si:H bien entendu et le contact métal est en $x = 0$.

En régime stationnaire ($t = 0 \text{ s}$), les profils du taux net de recombinaison des électrons U_n ainsi que toutes ses composantes sont tous positifs et égaux aux taux respectifs concernant les trous. Les états localisés sont tous centres de recombinaison pour équilibrer la génération optique comme dans le cas du calcul LEF. Dans ce cas, la recombinaison des électrons est dominée par les liaisons pendantes à la température ambiante [124].

Après interruption de l'éclairement, le taux net de capture U_{nct} devient négatif sur toute la profondeur comme c'est le cas dans le calcul LEF (§ D.5.1.b). Cela signifie là également que la QBC commence à émettre des électrons. Le taux U_{nct} reste négatif jusqu'à la fin du transitoire. Quant à U_{nvt} , il présente un profil positif pendant tout le transitoire. Il devient centre émetteur de trous pour pouvoir retrouver l'occupation à l'équilibre.

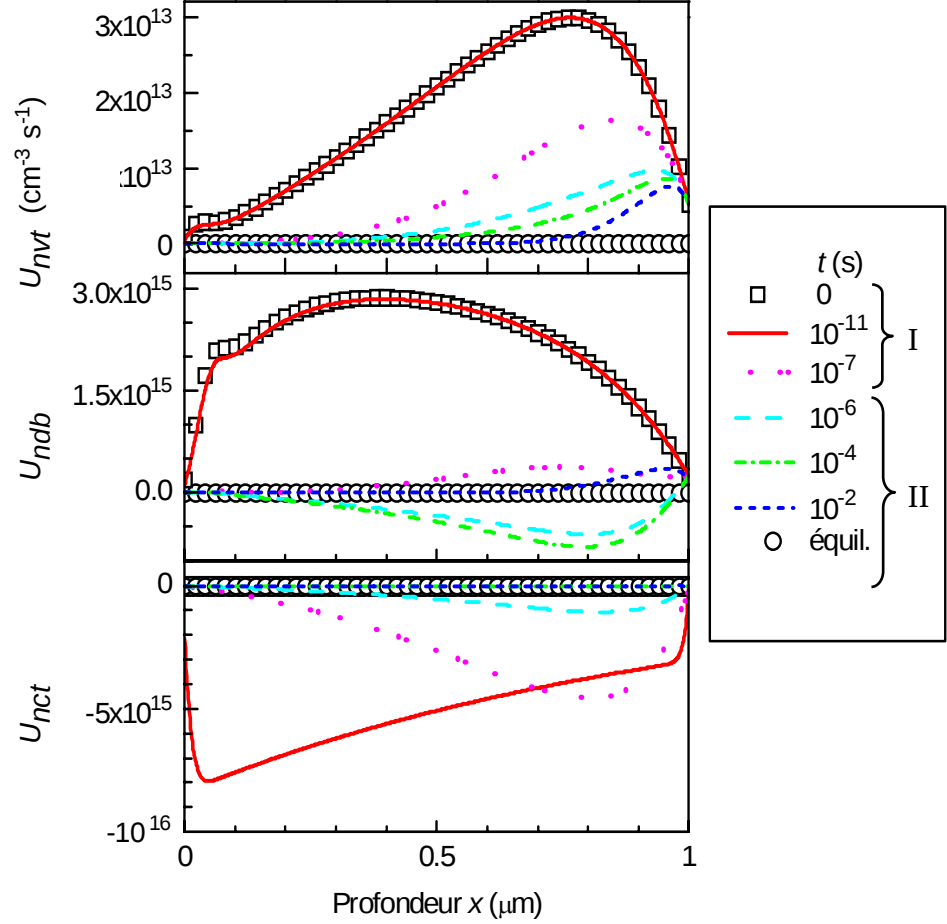


Figure D.17: Tracés des profils des taux nets de capture des électrons en fonction de la profondeur de la structure pour une valeur fixée du champ électrique ($E_2 = 3 \times 10^3$ V/cm) à différents instants de la caractéristique du transitoire de la photoconductivité.

U_{ndb} est positif durant la première phase de la PCD (I) et devient négatif dans la deuxième phase (II). Les états profonds des LPs changent de comportement durant le transitoire: ils passent de centres recombinants à centres capteurs d'électrons et de trous (phase I), à centres capteurs d'électrons (phase II). Cette discussion a été déjà donnée pour le calcul LEF précédent. On peut voir sur la figure D.17 que chaque profil des taux nets de capture montre un extremum qui se déplace vers le contact arrière lorsque le temps augmente. Leurs positions indiquent une zone d'espace où le centre électronique concerné devient le plus actif. Les valeurs de ces extrema sont utilisées dans la suite pour étudier les variations de ces différents taux en fonction du temps et les comparer à celles du calcul LEF.

La figure D.18 présente les taux nets de capture, U_{nct} , U_{nvt} et U_{ndb} , du calcul LEF [Fig. D.18(a)], conjointement aux valeurs maximales respectives obtenues à partir du

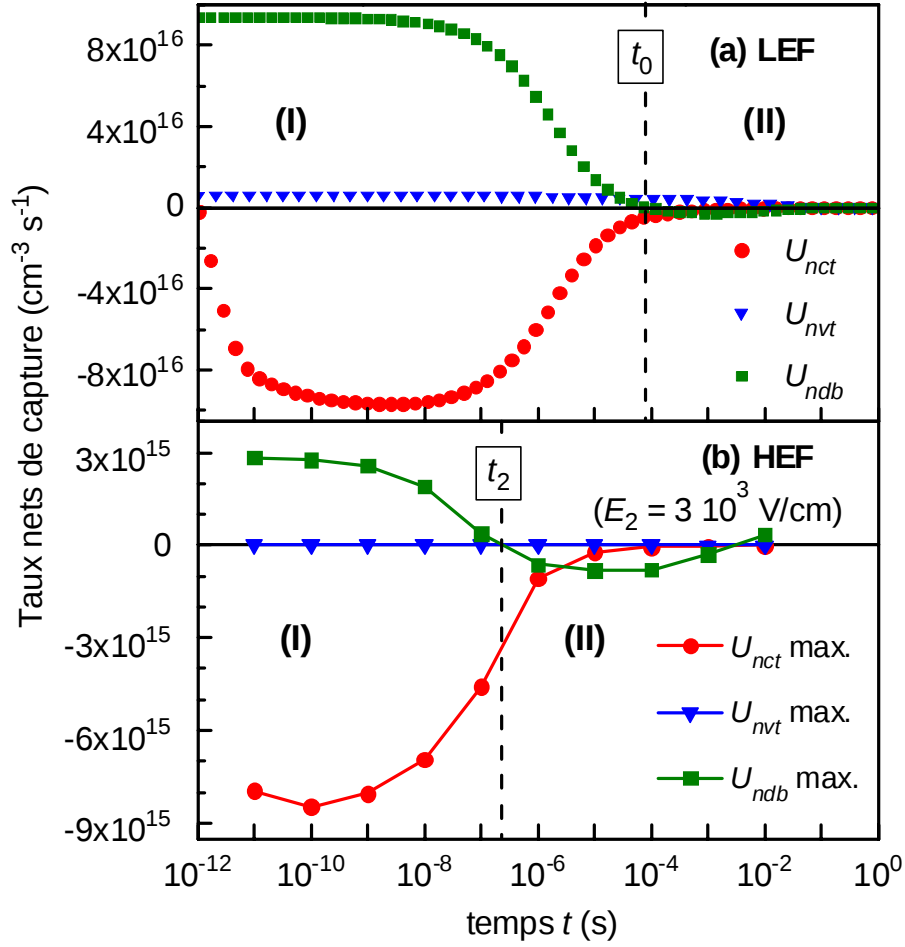


Figure D.18: Transitoires des taux nets de capture des électrons par la QBC, la QBV et les LPs sous champ faible (LEF) **(a)** et de leurs maxima respectifs relevés des profils calculés sous champs fort (HEF) **(b)**. Les instants t_0 et t_2 marquent les instants où U_{ndb} s'annule.

calcul HEF [Fig. D.18(b)]. L'instant $t_0 = 7 \times 10^{-5}$ s délimité dans le calcul LEF est repéré. On rappelle que c'est l'instant qui correspond à l'annulation du taux net de capture des électrons par les LPs U_{ndb} (passage des LPs de capteurs à émetteurs). Dans la figure D.18(b) sont reportés les maxima des différents taux de capture pour une valeur du champ électrique ($E_2 = 3 \times 10^3$ V/cm). Les deux phases de variations sont également délimitées par l'annulation de U_{ndb} en $t_2 = 2 \times 10^{-7}$ s. Nous retrouvons ainsi dans le calcul HEF les deux zones déjà délimitées dans le calcul LEF.

D.6. Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre une simulation numérique du transitoire de la photoconductivité résultant de la cessation de l'éclairement. Le modèle standard de densité

d'états du a-Si:H est utilisé. Dans les équations cinétiques, nous avons tenu compte de toutes les transitions entre états localisés et états étendus.

L'allure générale des transitoires de la photoconductivité obtenus expérimentalement sur le a-Si:H et les semiconducteurs similaires est retrouvée par notre calcul. En particulier, on voit l'apparition de deux paliers sur $\sigma_{PCD}(t)$ séparés par un épaulement plus ou moins accentué. Expérimentalement, cette décroissance est plus diffuse car en réalité les états des liaisons pendantes ne sont pas discrets mais présentent plutôt un élargissement. En effet, cet épaulement résulte directement d'un changement de comportement des liaisons pendantes. De plus, afin d'évaluer l'influence des états localisés sur la PCD, nous avons étudié l'influence de quelques paramètres associés aux états localisés. Nous voyons clairement que l'allure du transitoire de la photoconductivité dépend de tous les paramètres microscopiques examinés ici. Nous remarquons que souvent, il s'agit d'une influence concomitante de plus d'un paramètre. Il faut rappeler que nous n'avons pas étudié l'influence des différents coefficients de capture et d'émission des différents états localisés qui pourraient également affecter la forme de la PCD.

Nous avons trouvé que le premier palier, très rapide, résulte de l'émission d'électrons de la QBC et de la recombinaison sur les LPs. Le deuxième palier apparaît suite à l'émission d'électrons par les LPs qui ralentit ainsi la décroissance de $\sigma_{PCD}(t)$. A la fin du transitoire, on observe une décroissance rapide de $\sigma_{PCD}(t)$ car les porteurs de charges se recombinent rapidement sur les LPs et la QBV simultanément.

Cette décroissance ultime est celle généralement accessible expérimentalement. On voit que nous ne pouvons pas la relier à un type particulier d'état localisés et ne peut être associée à la température caractéristique T_c de la QBC comme cela est généralement fait dans la théorie du piégeage multiple.

Les principaux résultats de notre calcul, valable sous champ électrique faible (LEF), sont comparés à des résultats préliminaires calculés en tenant compte de l'espace et donc du champ électrique (code numérique HEF). Le calcul HEF est long et présente des problèmes de convergence et de stabilité plus importants que dans le calcul LEF. Ces inconvénients le rendent moins pratique pour toute étude systématique pour comprendre les variations du transitoire de la photoconductivité. Nous avons trouvé plusieurs similitudes entre les résultats des calculs LEF et HEF qui valident ainsi les deux codes numériques.

Chapitre E

La conductivité thermiquement stimulée (TSC)

E.1. Introduction

La mesure de la conductivité thermiquement stimulée (TSC: *Thermally Stimulated Conductivity or Current*) est une méthode qui a été largement utilisée pour caractériser les niveaux d'énergie dans la bande interdite des semiconducteurs cristallins résistifs photoconducteurs. La théorie y est bien établie pour ce type de matériaux [126,11,12].

Cette méthode est basée sur le remplissage des niveaux d'énergie sous lumière à basse température, généralement prise entre 80 et 90 K. Après interruption de l'éclairement, le matériau est relaxé pendant un certain temps d'attente sous obscurité avant d'appliquer une remontée linéaire en température. Le courant résultant en fonction de la température, auquel on a retranché le courant d'obscurité relevé dans les mêmes conditions de chauffage, constitue le spectre de TSC. Les courbes typiques de TSC présentent généralement un ou plusieurs pics. Ils sont associés individuellement à des centres électroniques de niveaux d'énergie discrets dans la bande interdite des semiconducteurs cristallins. Un rappel des traitements analytiques existant pour de tels semiconducteurs est donné en détail dans les références [127] et [128].

La simplicité de la mise en œuvre expérimentale de cette méthode a poussé tout naturellement son utilisation pour la caractérisation des semiconducteurs amorphes photoconducteurs. Le courant résultant de la relaxation thermiquement activée est soit directement relevé en configuration coplanaire de l'échantillon (champs faibles) ou en préparant ce dernier sous forme de diode Schottky (champs forts). Malheureusement, pour les semiconducteurs amorphes, l'interprétation des résultats expérimentaux de courants TSC devient difficile et controversée à cause de la présence d'un grand nombre d'états localisés de différentes natures dans le gap. Néanmoins, il existe des théories adaptées moyennant des hypothèses pour la caractérisation de ce type de semiconducteurs désordonnés ainsi que des simulations numériques des spectres de TSC.

Dans le présent chapitre, nous rappelons dans une première partie les travaux antérieurs et actuels les plus importants rapportés par la littérature sur le TSC dans le a-Si:H et quelques semiconducteurs comparables. Ensuite, nous donnons une description détaillée de la technique de mesure de courant TSC.

Nous présentons ensuite le modèle pour lequel nous avons opté dans la simulation du TSC de ce travail ensuite nous donnons la procédure de calcul utilisée ainsi que la méthode numérique utilisée. Les résultats du calcul obtenus sont décrits et discutés.

E.2. Travaux antérieurs

La facilité de sa mise en œuvre rend l'expérience de TSC séduisante pour caractériser un semiconducteur résistif et photoconducteur tel que le a-Si:H. C'est la raison pour laquelle il y a eu plusieurs travaux publiés dans le domaine.

Plusieurs mesures de courants TSC ont été réalisées sur le a-Si:H et différentes approches théoriques ont été proposées depuis 1980. Un grand nombre de spectres de TSC relevés montrent généralement deux pics [129-135]. A titre indicatif nous reproduisons sur la figure E.1 un résultat de TSC obtenu sur un échantillon de a-Si:H, en configuration coplanaire, déposé par la méthode *rf Glow Discharge-CVD* [135]. Le premier pic est observé à basse température vers 130 K et le second apparaît aux alentours de 265 K. Le

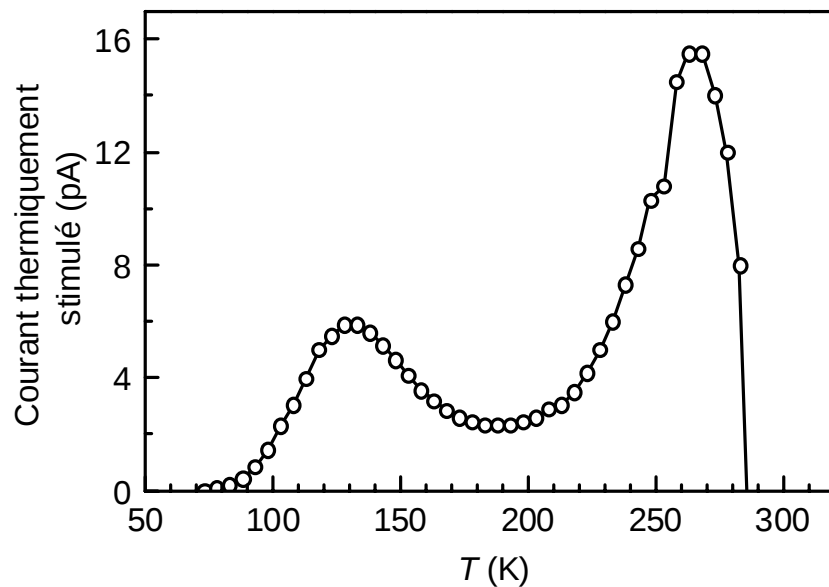
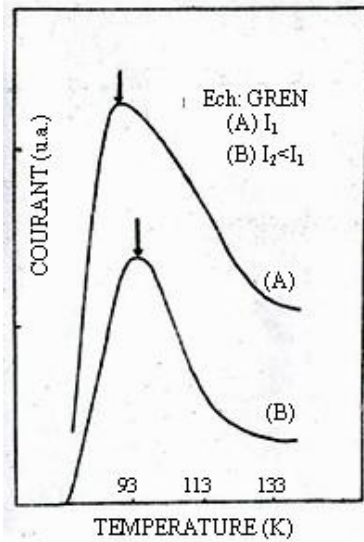


Figure E.1: Spectre de TSC expérimental typique de a-Si:H de bonne qualité électronique obtenu sur un échantillon en configuration coplanaire [135].

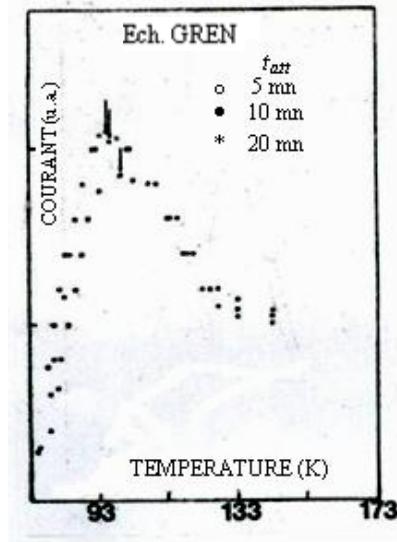
nombre, l'aspect et la température des pics dépendent des paramètres expérimentaux du TSC et des conditions de préparation de l'échantillon considéré. D'autre part, divers traitements peuvent causer des variations sur les courbes de TSC. En particulier, le pic des basses températures peut disparaître après un éclaircissement prolongé [130,131,133] suite à l'effet Staebler-Wronski [6].

Dans d'autres cas, seul un pic est observé [136,137,128]. Cela survient sans que l'échantillon n'ait subi un quelconque traitement après sa préparation. Il semble que cela

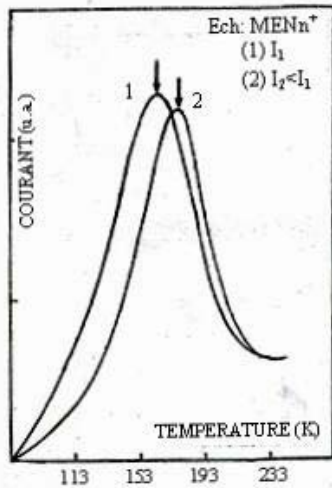
soit lié à des propriétés moins performantes du matériau dues à une forte densité d'états localisés. Nous présentons sur les figures E.2 et E.3 quelques résultats obtenus sur des échantillons, avec différentes géométries, à base de a-Si:H préparé à l'aide de diverses techniques [128,137]. Nous constatons à travers ces différents résultats que les spectres obtenus sur les échantillons MEN [Figs. E.2(b) et E.2(d)] et ceux de la figure E.3 montrent un pic unique dont la position est proche de 200 K. Par contre, pour les échantillons GREN [Fig. E.2(a) et E.2(c)] il y a apparition d'un pic à basse température à moins de 100 K.



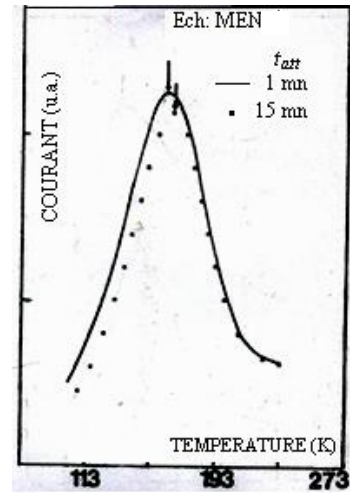
(a)



(c)



(b)



(d)

Figure E.2: Spectres de courant TSC expérimentaux mesurés sur deux diodes schottky à base de a-Si:H non dopé (Echantillons GREN et MEN) pour deux intensités d'éclairement (I_1 et I_2), (a) et (b), et en fonction du temps d'attente (t_{att}), (c) et (d) [128]. Les échantillons GREN et MEN ont été préparés par les techniques *rf Glow Discharge* et de la pulvérisation cathodique triode *dc*.

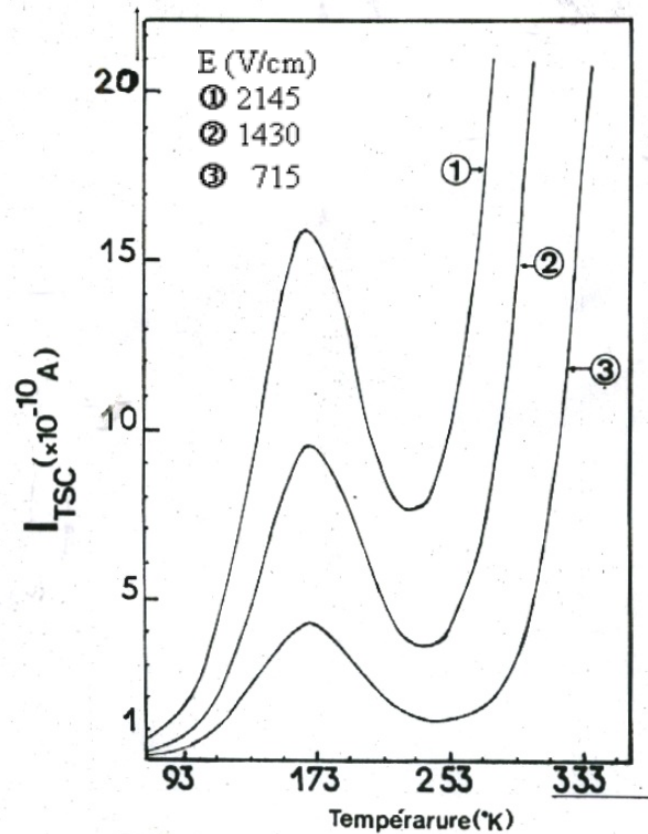


Figure E.3: Spectres de courant TSC expérimentaux relevés, pour différentes valeurs du champ électrique, sur un échantillon de a-Si:H, en géométrie coplanaire, déposé par la méthode *rf Glow Discharge* [137].

Il est à noter également que lorsque le champ électrique augmente, soit en configuration coplanaire ou lorsque l'échantillon est monté en structure Schottky, l'amplitude des pics a en général tendance à augmenter tout en s'affinant.

Dans les premiers travaux publiés sur le TSC dans le a-Si:H, de nombreux auteurs [129,130,138] ont essayé de relier les pics observés à une éventuelle structure de la densité d'états (via un formalisme théorique) à la manière des semiconducteurs cristallins.

Une des premières études a été rapportée par Simmons *et al.* [139] pour des semiconducteurs présentant un continuum d'états d'énergie dans le gap. Dans leur théorie, où ils supposent qu'un fort champ électrique est appliqué, le repiégeage et la recombinaison des porteurs libres sont alors négligés. Une résolution analytique des équations cinétiques simplifiées leur a permis d'obtenir des solutions approchées des spectres de TSC. Ils montrent également que la forme des caractéristiques reflète directement la distribution des niveaux pièges dans la partie supérieure du gap. Dijon [132] a appliqué directement cette théorie pour déterminer l'énergie caractéristique de la queue de bande de conduction du a-Si:H. La mesure des spectres de TSC a été réalisée dans des structures Schottky qui fournit justement des champs électriques forts. Toutefois, ce champ

n'est pas uniforme dans la zone de charge d'espace. Ceci requiert en réalité des équations cinétiques plus compliquées qui tiennent compte des variables d'espace et des phénomènes de diffusion.

Pour contourner cette difficulté, une autre technique adaptée du TSC aux structures Schottky a été proposée [140]. Un champ électrique uniforme est obtenu dans l'échantillon étudié en utilisant une polarisation en régime pulsé. En utilisant l'approche théorique de Simmons *et al.* [139], le TSC pulsé a donné de bons résultats sur des alliages de a-SiGe:H cohérents avec des expériences de temps de vol (TOF: *Time Of Flight*). Malheureusement, cette méthode adaptée nécessite de préparer le matériau sous forme de structure Schottky et une mise en œuvre plus complexe de l'expérience que ne l'est l'expérience de TSC conventionnelle.

Misra *et al.* [133] ont établi une théorie incluant le repiégeage en faisant une analogie avec le travail de Haering et Adams [126] concernant leur analyse du TSC dans les semiconducteurs cristallins des pièges discrets.

Fritzsche et Ibaraki [134] ont appliqué la théorie de Simmons *et al.* aux semiconducteurs amorphes en incluant la recombinaison des porteurs. Ils supposent en outre que le repiégeage est négligeable et que le système est dans un état de quasi-équilibre pour simplifier les équations. Il ont développé une méthode pour déterminer partiellement la densité d'états dans le a-Si:H en combinant des mesures de TSC et de photoconductivité stationnaire [141].

Cette analyse a été étendue par Landweer [142,143] en associant aux mesures de TSC des mesures simultanées de photoconductivité de faible intensité créée par des impulsions de lumière. Lee et Lee [144] ont appliqué cette méthode pour analyser l'effet de l'éclairement prolongé sur leurs spectres de TSC dans le a-Si:H. Karoutsos [145] a utilisé également cette technique pour calculer la densité d'états dans la moitié supérieure du gap.

Gu *et al.* [146] ont présenté une théorie du TSC dans les semiconducteurs amorphes dans laquelle l'émission thermique, le piégeage et la recombinaison des électrons sont pris en compte. Le TSC est numériquement calculé à partir des équations cinétiques contrôlant la densité des électrons. Toutefois, ils utilisent la statistique de Fermi-Dirac et les trous ne sont pas pris en compte.

Zhou et Elliott [147] ont étudié expérimentalement l'effet de la température, à laquelle se fait l'éclairement, sur le pic à basse température. Ils n'ont pas pu expliquer leurs résultats à l'aide des modèles publiés jusqu'alors. Ils ont montré que la forme du TSC est fortement corrélée à celle de la photoconductivité stationnaire en fonction de la température. Ils ont déduit que le TSC est contrôlé par la recombinaison des porteurs et non par l'émission des électrons piégés. Ils concluent ainsi que le TSC, au stade des

travaux publiés à cette époque, n'était pas alors une méthode appropriée pour déterminer la densité d'états du a-Si:H.

Par ailleurs, Baranovskii *et al.* [148] ont expliqué les résultats de TSC à basse température [147] en considérant le transport des électrons par sauts (*hopping*) via les états localisés de la queue de bande de conduction.

Une première simulation numérique du TSC dans le a-Si:H, qui tient compte dans les équations cinétiques de toutes les transitions significatives des électrons et des trous, a été rapportée par Smaïl *et al.* [149]. Suite aux résultats obtenus, il a été montré la difficulté de corréler simplement la densité d'états du a-Si:H et des semiconducteurs à densité d'états similaire aux résultats du TSC. L'importance des rôles joués par chacun des deux types de porteurs et des phénomènes de recombinaison est expliquée. Le contenu de cette publication représente une partie du thème exposé dans le chapitre E courant.

Schmidt *et al.* [150] ont récemment développé une simulation numérique de la conductivité TSC utilisant un modèle de densité d'états comprenant les centres monovalents des queues de bandes exponentielles et les états corrélés des liaisons pendantes distribués en gaussiennes. Un calcul analytique, avec des approximations, est utilisé pour déterminer la densité d'états dans la moitié supérieure du gap du a-Si:H. L'approche qui consiste à combiner la conductivité TSC avec la photoconductivité stationnaire proposée par Zhu *et al.* [141] a été une fois de plus utilisée.

Plus récemment encore, Souffi *et al.* [151] ont publié des mesures de TSC effectuées sur du silicium microcristallin hydrogéné ($\mu\text{c-Si:H}$) qui présente une structure de la bande interdite voisine de celle du a-Si:H. L'approche théorique de Schmidt *et al.* [150] a été utilisée pour déterminer la densité d'états dans la moitié supérieure du gap.

Suite à cette mise au point historique sur le TSC dans le a-Si:H et les matériaux connexes, il faut retenir que l'exploitation du TSC n'est possible que si des hypothèses sont faites. En particulier, le rôle joué par les trous dans les différentes transitions et la recombinaison sur tous les états localisés sont omis lorsqu'il s'agit de déterminer la densité d'états. Il est à noter que la plupart de ces travaux sont basés sur les approches de Simmons *et al.* puis sur le travail de Fritzsche et Ibaraki [134]. Il est à rappeler que la plupart des expériences de TSC conventionnelles sont généralement menées avec des champs électriques faibles et en configuration coplanaire dans laquelle les phénomènes de recombinaison et de repiégeage ne peuvent être ignorés.

E.3. Description de la méthode TSC

La technique de mesure du courant TSC comprend principalement quatre étapes dont le chronogramme est schématisé sur la figure E.4:

- (IV) Après un recuit thermique de l'échantillon, celui-ci est refroidi jusqu'à une température T_0 , en général voisine de celle de l'azote liquide (80 à 90 K). Le matériau est alors dans un état d'équilibre thermodynamique.
- (V) La phase d'excitation lumineuse avec une lumière blanche ou monochromatique interbande (énergie de l'ordre du gap) pendant un temps t_{expo} pas trop long pour éviter l'effet Staebler-Wronski, mais suffisant pour atteindre le régime stationnaire du courant mesuré. Dans la suite, cet éclairage sera traduit par le taux de génération G bande à bande dans les équations cinétiques.
- (VI) La troisième phase débute par l'interruption de l'éclairage et dure un certain temps appelé temps d'attente (t_{att}) durant lequel les porteurs libres commencent à relaxer en se recombinant rapidement. Après ce temps, on atteint une espèce de quasi-équilibre où les porteurs se mettent en équilibre avec les bandes.

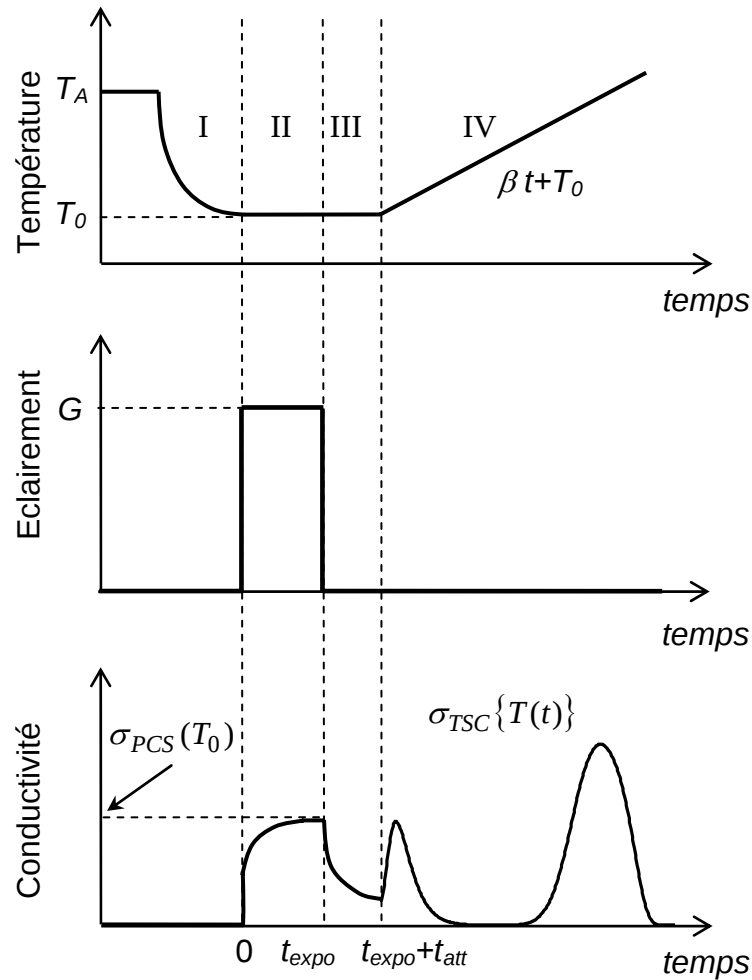


Figure E.4: Chronogrammes décrivant les différentes étapes de l'expérience de TSC. Les phases successives (I à IV) et les différentes notations sont expliquées dans le texte.

- (VII) Après ce temps d'attente, l'échantillon est chauffé généralement à vitesse constante β suivant la loi en température en fonction du temps t suivante: $T(t) = \beta t + T_0$. On mesure alors un courant de relaxation $I_{TSC}\{T(t)\}$ qui constitue le courant TSC majoré du courant d'obscurité.

E.4. Mise en équations et simulation

E.4.1. Calcul de la conductivité TSC

Dans notre simulation numérique, la conductivité TSC est calculée à partir de l'équation suivante:

$$\sigma_{TSC}\{T(t)\} = e [\mu_n n\{T(t)\} + \mu_p p\{T(t)\}] - \sigma_0\{T(t)\} \quad (\text{E.1})$$

où e est la charge électronique, μ_n et μ_p sont les mobilités des électrons et des trous dans les états étendus, $n\{T(t)\}$ et $p\{T(t)\}$ sont les densités des électrons et des trous libres et $\sigma_0\{T(t)\}$ est la conductivité sous obscurité (cf. § C.5.1).

Pour chaque calcul de la conductivité TSC en fonction de la température (spectre de TSC) il faut fixer un certain nombre de paramètres nécessaires qui sont:

- les paramètres microscopiques du a-Si:H choisis (voir Tableau C.1 pour les paramètres standard),
- les paramètres relatifs au déroulement des étapes du TSC, c'est à dire T_0 , G , t_{att} et β (voir § E.3).

E.4.2. Procédures de calcul

Dans de telles conditions d'hors équilibre, les concentrations $n\{T(t)\}$ et $p\{T(t)\}$ doivent être calculées à partir de la résolution numérique des deux équations cinétiques couplées régissant les concentrations des porteurs libres. Elles sont obtenues en faisant le bilan détaillé des transitions de charges (voir chap. C). Il est à noter que durant le processus de TSC, toutes les grandeurs qui dépendent de la température dépendent également du temps. On rappelle que nous utilisons pour ce calcul la densité d'états standard du a-Si:H: une queue de bande de conduction (QBC), une queue de bande de valence (QBV) et les états corrélés discrets des liaisons pendantes (LPs).

Les densités à l'extinction de la lumière, à l'instant t_{expo} et à la température T_0 , correspondent aux densités respectives du régime stationnaire. Elles sont calculées comme pour la photoconductivité stationnaire (PCS) du régime permanent, avec le taux de génération considéré G (voir section C.6).

Pendant le temps d'attente t_{att} , la décroissance de la photoconductivité en fonction du temps (phase III) est calculée à partir du même système d'équations différentielles que pour le transitoire de la PC (PCD) étudié dans le chapitre D précédent.

La conductivité TSC est calculée numériquement pendant le chauffage linéaire de la même manière que la PCD. Le même algorithme et les mêmes méthodes numériques sont utilisés. Il faut seulement noter que les différents coefficients d'émission à partir de tous les états localisés dépendent dans ce cas du temps lorsque la température varie. Il faut en tenir compte dans les différents développements utilisés dans les calculs, en particulier dans les dérivées par rapport au temps.

Comme pour le régime stationnaire et pour le transitoire isotherme, on peut par analogie définir deux quasi-niveaux de Fermi, E_{Fn} et E_{Fp} , pendant le processus du TSC. En effet, pour les mêmes raisons évoquées pour le régime permanent (cf. § C.6.3), nous optons ici également pour ces variables dans le calcul de la conductivité TSC. Néanmoins, il faut faire attention aux dérivées par rapport au temps lorsque nous passons des variables n et p aux quasi-niveaux de Fermi respectifs. Les équations (D.3.a) et (D.3.b) s'écrivent dans le cas présent comme suit à cause de la dépendance temporelle de la température:

$$\frac{dE_{Fn}(t)}{dt} = \left(\frac{k_B T}{n} \frac{dn(t)}{dt} + \frac{\beta}{T} (E_{Fn} - E_g) - k_B \beta \right) \quad (\text{E.2.a})$$

$$\frac{dE_{Fp}(t)}{dt} = \left(-\frac{k_B T}{p} \frac{dp(t)}{dt} + \frac{\beta}{T} E_{Fp} + k_B \beta \right) \quad (\text{E.2.b})$$

Il faut alors résoudre numériquement les équations cinétiques en E_{Fn} et E_{Fp} ainsi que celles décrivant les différentes densités de charges sur les états localisés. Comme on l'a vu dans le calcul de la PCD, le système à résoudre est raide (*stiff*). De plus, comme la température est variable, ceci contribue à rendre les coefficients encore moins monotones qu'ils ne l'étaient dans le calcul de la décroissance isotherme de la photoconductivité (PCD). La dépendance en temps des coefficients d'émission augmente la raideur du système. Le calcul devient difficile et instable surtout au voisinage des singularités (début du chauffage, maximum et minimum) et aussi lorsqu'on s'éloigne du jeu de paramètres standard du a-Si:H. En effet, en faisant varier individuellement un paramètre donné pour étudier son action sur le spectre, cela augmente les disparités existant entre les différentes grandeurs recherchées. Cela nous contraint à réduire le pas de calcul en température qui conduit à un allongement du temps de calcul.

E.5. Résultats de la simulation numérique et discussion

Dans cette section, nous présentons les résultats obtenus à partir du calcul. La première partie est consacrée à la description du spectre de la conductivité TSC en fonction de la température. La deuxième partie porte sur l'étude de l'influence de quelques paramètres microscopiques sur la forme du spectre de TSC. La troisième et dernière partie concerne l'analyse de l'influence de quelques paramètres du TSC tels la température de départ, le taux de génération de l'éclairement initial, le temps d'attente sous obscurité et la vitesse de chauffage.

E.5.1. Description générale

E.5.1.a. La conductivité thermiquement stimulée (TSC)

En utilisant les paramètres microscopiques (voir Tableau C.1), correspondant aux échantillons de a-Si:H dits de bonne qualité électronique, on obtient la caractéristique de la conductivité TSC ($\sigma_{TSC}(T)$) en fonction de la température présentée sur la figure E.5.

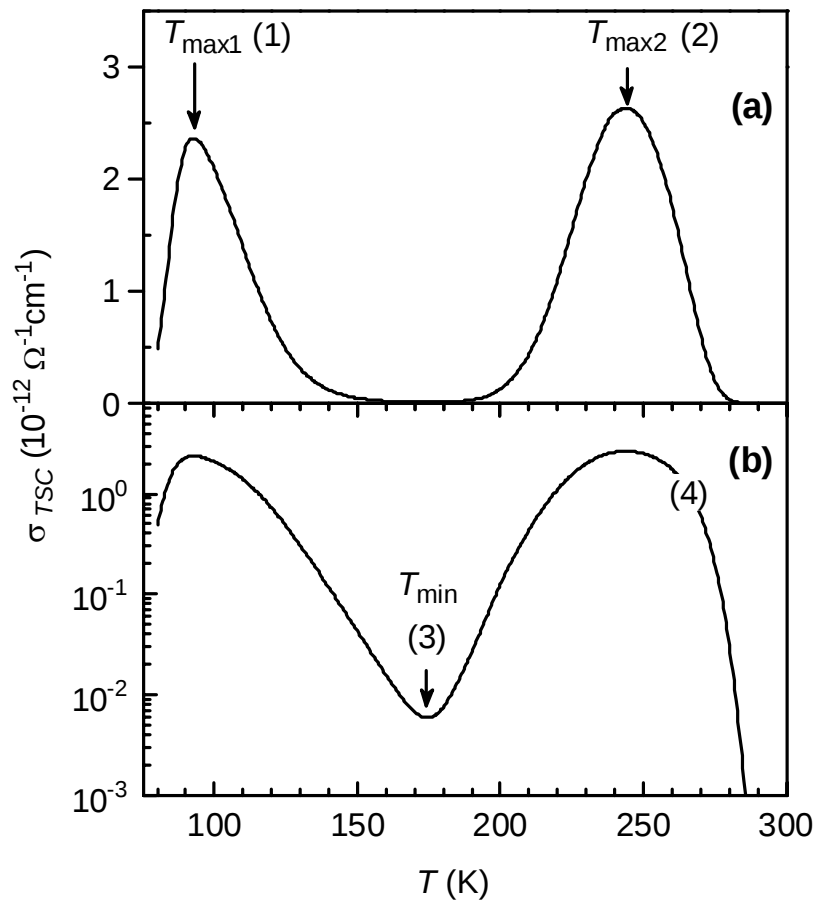


Figure E.5: Conductivité TSC calculée en fonction de la température en échelle linéaire (a) et logarithmique (b). Les notations et les numéros sont explicités dans le texte.

Dans cette simulation, nous fixons les paramètres du TSC comme suit: la température de départ à $T_0 = 80\text{ K}$, le taux de génération de l'excitation initiale à $G = 10^{17}\text{ cm}^{-3}\text{ s}^{-1}$, le temps d'attente à $t_{att} = 1\text{ mn}$ et la vitesse de chauffage à $\beta = 15\text{ K/mn}$. Ces valeurs sont maintenues dans tous les calculs dont les résultats sont présentés, sauf mention contraire.

On distingue clairement deux pics intenses: l'un est situé à basse température ($T_{\max 1} = 92\text{ K}$) et l'autre à une température plus élevée ($T_{\max 2} = 244\text{ K}$). La température du minimum est repérée dans la représentation logarithmique et elle vaut dans notre cas $T_{\min} = 175\text{ K}$. Le deuxième pic marque la fin du TSC et il est obtenu en retranchant la conductivité d'obscurité à la conductivité TSC totale. Un tel spectre à deux pics est observé expérimentalement le plus souvent sur des échantillons de a-Si:H de bonne qualité électronique avec des positions des pics plus ou moins décalées [129,132,135] et également sur des échantillons de $\mu\text{c-Si:H}$ [151]. Le premier pic est généralement bien déterminé alors que le deuxième pic reste tributaire de la précision des mesures des courants de TSC et d'obscurité, de la qualité du traitement des données et de la propreté chimique des échantillons.

Les points remarquables du spectre, marqués par les numéros (1), (2), (3) et (4), indiquent respectivement les deux maxima, le minimum ainsi qu'un point proche de la fin du TSC ($T_4 = 265\text{ K}$). Ces repères seront utiles pour les discussions et les tracés graphiques qui vont suivre.

Les figures E.6(a) et E.6(b) montrent simultanément, en fonction de la température, la concentration d'électrons dans la QBC (Q_{ct}), la concentration de trous dans la QBV (Q_{vt}), les densités des LPs dans les états de charge D^- (Q_{db}^-), D^0 (Q_{db}^0), et D^+ (Q_{db}^+), et les concentrations excédentaires d'électrons et de trous (Δn et Δp), ainsi que les deux quasi-niveaux de Fermi des électrons et des trous (E_{Fn} et E_{Fp}). Les points remarquables sont nettement reportés sur ces figures. On voit clairement que la concentration Δn suit les mêmes variations que la conductivité TSC. Cela signifie que la concentration des trous contribue peu à σ_{TSC} et confirme le type n du a-Si:H non dopé. Toutefois, ces trous jouent un rôle important dans les différents échanges et ne peuvent être négligés dans les équations cinétiques de la simulation. Pour expliquer la forme de $\sigma_{TSC}(T)$ il suffit donc de décrire les processus de capture et d'émission régissant particulièrement les électrons. Néanmoins, il faut remarquer que même $\Delta p(T)$ présente un spectre à deux pics moins marquée que celui de $\Delta n(T)$.

Les concentrations de charges sur les états localisés présentent différentes variations avant de rejoindre leurs valeurs à l'équilibre respectives. Il faut noter cependant qu'à très

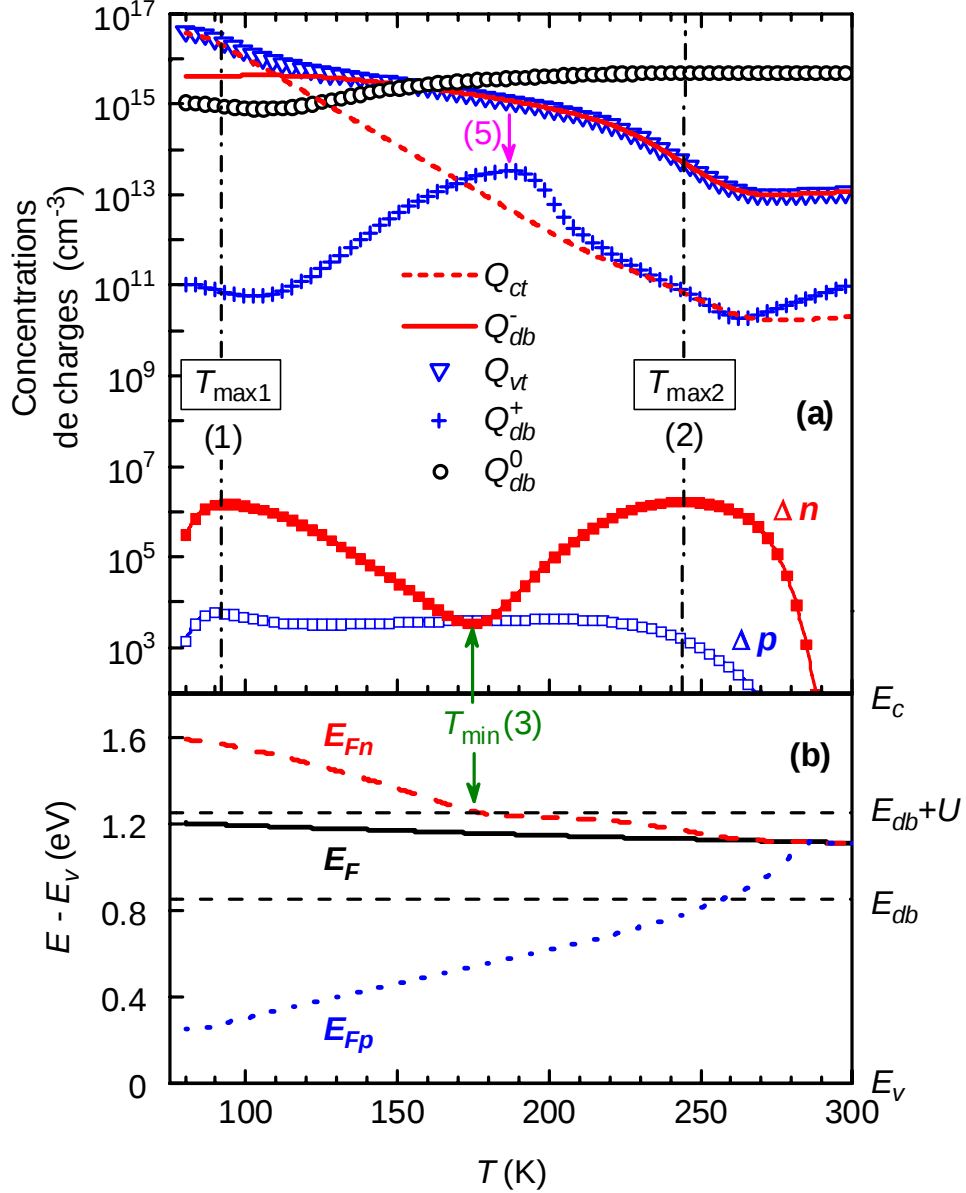


Figure E.6: Tracés de toutes les densités de charge, en fonction de la température, sur les états localisés durant le TSC: densité de charge positive sur la QBV (Q_{vt}), densité de charge négative sur la QBC (Q_{ct}), concentration des liaisons pendantes D^- (Q_{db}^-), D^0 (Q_{db}^0) et D^+ (Q_{db}^+), et ainsi que les concentrations excédentaires des électrons libres (Δn), et des trous libres (Δp) (a) et évolution des quasi-niveaux de Fermi des électrons (E_{Fn}) et des trous (E_{Fp}) (b).

basse température, juste au début du TSC, Q_{vt} et Q_{ct} sont majoritaires et la neutralité est maintenue par ces deux concentrations. Puis lorsque Q_{ct} diminue, c'est Q_{db}^- qui prend la relève pour assurer la neutralité avec Q_{vt} et ce jusqu'à la fin du TSC. En effet, mise à part Q_{db}^0 qui est neutre, Q_{db}^+ et Q_{ct} restent faibles devant les autres charges. Cependant, notons

que Q_{db}^+ présente un maximum à la température $T_5 = 186\text{ K}$, repérée par (5) sur le graphe. Ces variations des densités de charges sont proches de celles observées sur la simulation de la photoconductivité stationnaire en fonction de la température [124]. Cet état quasi-stationnaire traduit bien une situation de champ électrique faible dont il est question ici.

La figure E.6(b) montre que E_{Fp} tend vers sa valeur d'équilibre de façon monotone alors que E_{Fn} présente un ralentissement au passage de l'énergie $(E_{db} + U)$ du niveau D^- des LPs. Ce point coïncide justement avec le minimum du TSC à la température $T_{\min}$. Les LPs D^- commencent à émettre des électrons vers la bande de conduction. Rappelons que les positions des quasi-niveaux de Fermi constituent une bonne approximation des niveaux de démarcation définis par Rose [152]. Ces niveaux distinguent entre les niveaux pièges (vides) et les niveaux de recombinaison (pleins). Les électrons qui sont par exemple sur les niveaux au dessus de E_{Fn} ont une plus grande probabilité d'être réémis dans la bande de conduction que de se recombiner avec un trou provenant de la bande de valence.

Pour mieux comprendre ces observations, nous décrivons ci-après la répartition des charges sur les deux queues de bandes dans le gap pour les trois points remarquables repérés sur le spectre de TSC. Nous représentons sur la figure E.7 les diagrammes d'énergie illustrant l'occupation des états localisés des deux queues de bandes du modèle aux températures des points (1), (3) et (4) relatifs au premier maximum, au minimum et à la fin du TSC. On rappelle que $N_{Q_{ct}}(E)$ est la répartition des électrons piégés sur la QBC et $N_{Q_{vt}}(E)$ celle des trous piégés sur la QBV (voir équations (D.9.a) et (D.9.b)). Le niveau de Fermi en T_4 ainsi que les quasi-niveaux de Fermi aux points (1), (3) et (4) sont également représentés. Les queues de bandes se remplissent par des électrons et des trous pendant l'illumination. Pendant le processus du TSC, le chauffage entraîne la libération de ces charges à partir des deux queues de bandes pour qu'elles puissent retrouver leurs profils à l'équilibre. Les électrons libérés contribuent à la conductivité jusqu'à ce qu'ils se recombinent avec les trous ou rejoignent les états localisés pour permettre à ces derniers de retrouver leurs occupations d'équilibre.

Comme pour le transitoire de la photoconductivité (PCD), on voit là également que E_{Fn} atteint le niveau de Fermi à l'équilibre E_F dès la température T_4 contrairement à E_{Fp} [Fig. E.6(b)]. Cette observation confirme là encore la dissymétrie qui existe entre les deux queues de bandes (la QBV est plus large que la QBC).

Il faut noter que l'occupation de la QBC est proche de l'occupation à l'équilibre car la fonction de distribution passe d'une valeur proche de l'unité à une valeur nulle en E_{Fn} sans

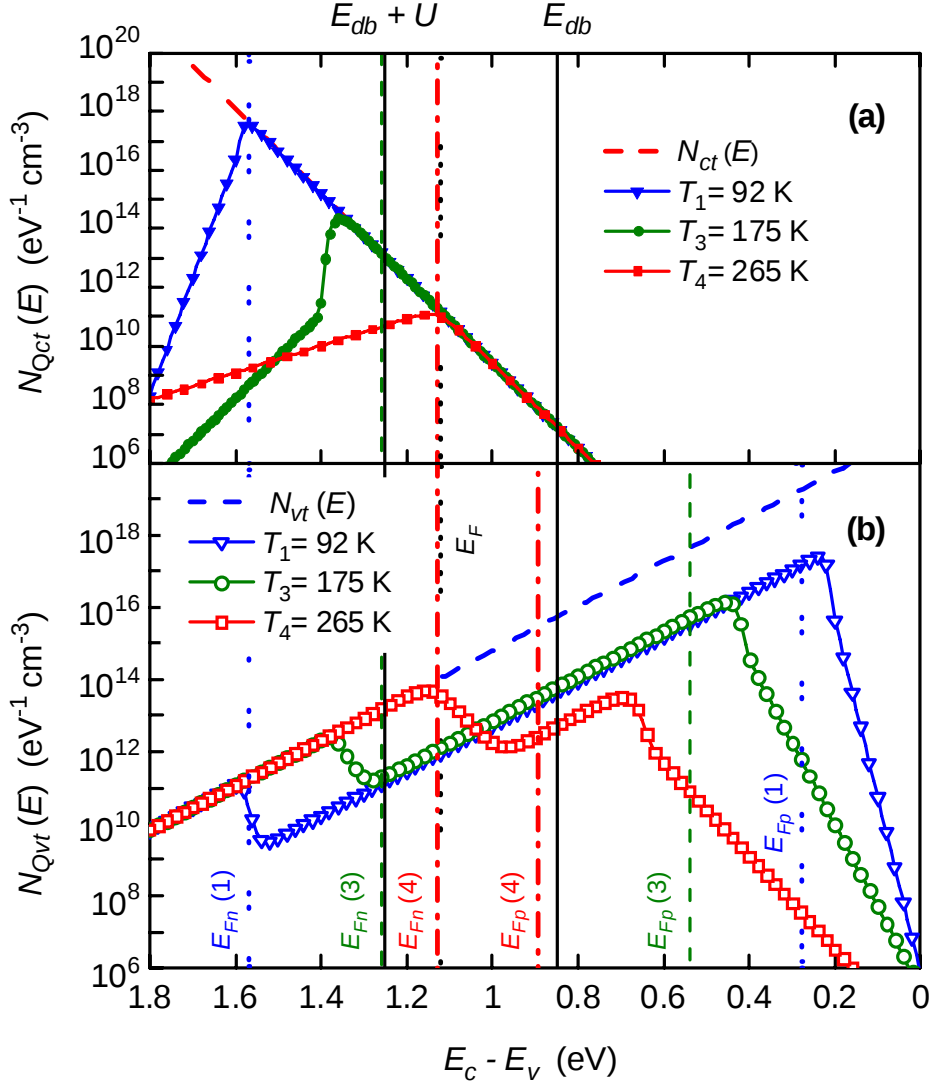


Figure E.7: Tracés des profils d'occupation des états localisés de la QBC, $N_{Qct}(E)$ (a) et de la QBV, $N_{Qvt}(E)$ (b) en fonction de l'énergie du gap pour trois températures remarquables sélectionnés sur le spectre de TSC: (1) (2) et (4). E_{Fn} et E_{Fp} sont les quasi-niveaux de Fermi pour les électrons et les trous en ces mêmes points. Les niveaux d'énergie discrets des LPs, E_{db} et $(E_{db} + U)$, sont représentées.

passer par une valeur intermédiaire. On parle alors d'un état de quasi-équilibre. Par contre, la fonction d'occupation typique d'un régime stationnaire en "marches d'escalier" [91] est obtenue pour l'occupation de la QBV.

E.5.1.b. Taux nets de capture

Comme pour l'étude de la photoconductivité transitoire du chapitre précédent, nous reportons dans cette section l'évolution avec la température des taux nets de capture partiels concernant les différents états localisés. La signification et la définition de chaque terme sont données dans la section D.5.1.b. Nous représentons sur les figures E.8(a)

et E.8(b) les taux nets de capture partiels des électrons concernant la QBC (U_{nct}), la QBV (U_{nvt}), et les LPs (U_{ndb}). Deux échelles sont utilisées pour visualiser entièrement l'évolution en fonction de la température des différents taux. Les températures des deux maxima (1 et 2) et du minimum (3) du TSC sont clairement indiquées. Les taux de capture partiels respectifs pour les trous, U_{pct} , U_{pvt} et U_{pdb} , sont donnés dans la figure E.9. Le taux net de capture d'électrons par les LPs U_{ndb} est aussi retracé pour mieux distinguer ses variations aux basses températures grâce à l'échelle écartée.

Aux basses températures, autour du premier pic, les taux U_{nvt} et U_{ndb} sont positifs alors que U_{nct} est négatif. Lorsque la température commence à croître, les trois taux augmentent en valeur absolue, passe par un maximum à une température légèrement inférieure à T_1 . Dans cette première étape, les électrons initialement piégés sur la QBC sont émis jusqu'à épuisement.

Juste après la température T_3 du minimum du TSC, U_{ndb} s'annule en T_5 du point (5) déjà repéré sur la figure E.6(a) qui correspond au maximum de $Q_{db}^+(T)$. Suite à cette annulation, U_{ndb} change de signe pour décrire un pic négatif et U_{nvt} présente un nouveau pic d'amplitude inférieure au premier. U_{nct} reste très faible dans cette gamme de température car la QBC a émis presque tous ses électrons excédentaires piégés à basse température avant le chauffage. A plus haute température, c'est tous les taux qui s'annulent car l'équilibre est atteint marquant ainsi la fin du TSC. On voit bien que le pic négatif de U_{ndb} , qui traduit une émission d'électrons à partir des LPs doublement occupée D^- , explique bien l'origine du deuxième pic de TSC.

Quant aux taux nets de capture des trous, on voit que U_{pdb} et U_{pct} sont positifs et U_{pvt} est négatif. La QBV émet des trous vers la bande de valence pour pouvoir retrouver son état d'occupation à l'équilibre. U_{pct} reste faible car les transitions concernées sont peu probables. Autour du premier pic, U_{pdb} et U_{ndb} présentent des valeurs proches qui traduit bien le rôle de centre de recombinaison joué par les LPs qui prédomine dans cette gamme de température.

Au terme de ces descriptions, on peut conclure que le premier pic du TSC résulte de la libération d'électrons par la QBC et le deuxième pic découle de la libération d'électrons par les LPs doublement occupées D^- .

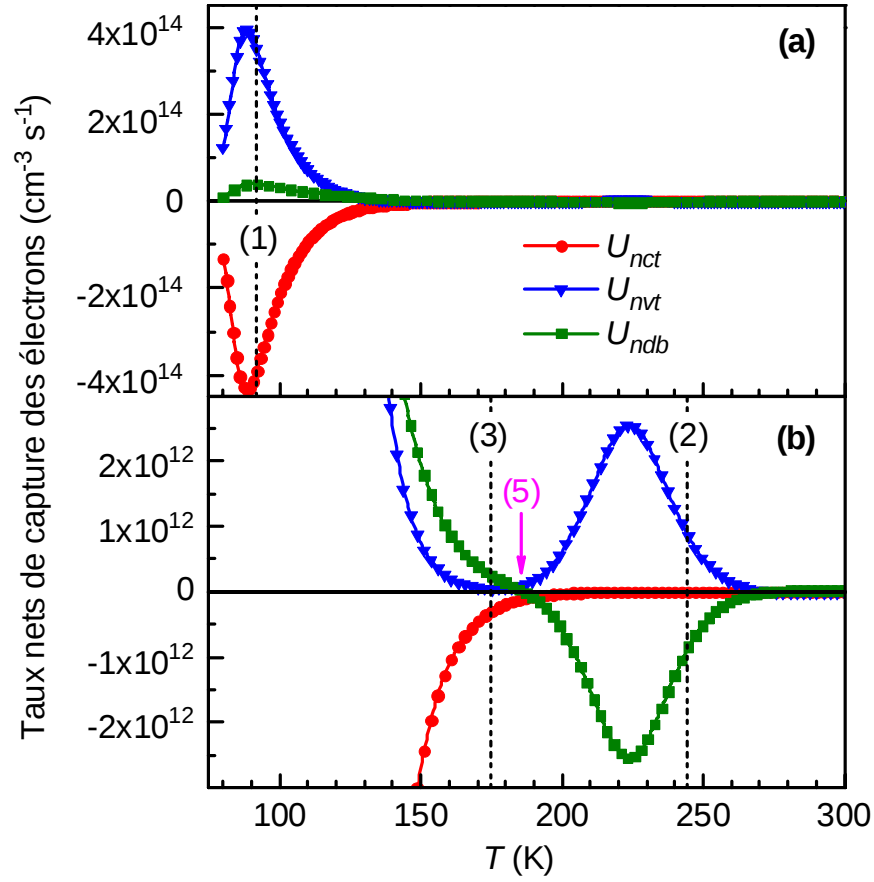


Figure E.8: Représentation en fonction de la température des taux nets de recombinaisons partiels des électrons sur la QBC, la QBV et les LPs, U_{nct} , U_{nvt} et U_{ndb} , à l'aide de deux échelles différentes: **(a)** et **(b)**. Les températures des deux maxima et du minimum du spectre de TSC sont clairement indiquées.

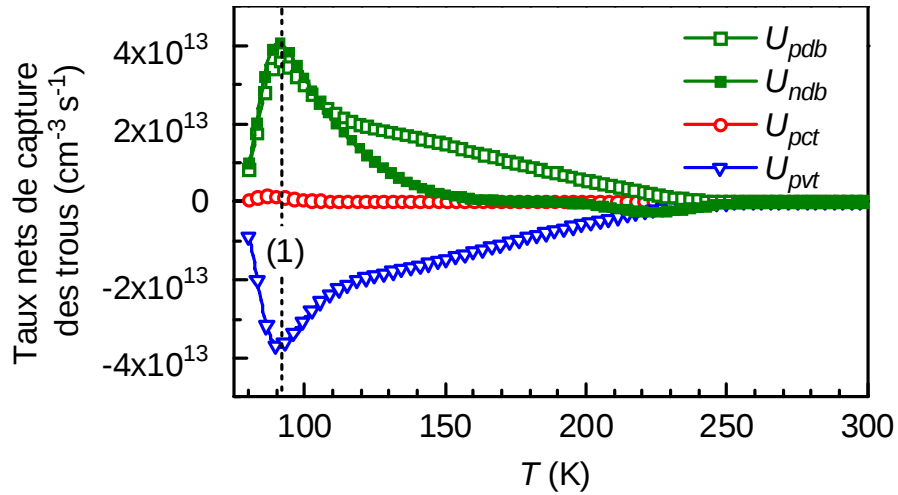


Figure E.9: Représentation en fonction de la température des taux nets de recombinaisons partiels des trous sur la QBC, la QBV et les LPs, U_{pct} , U_{pvt} et U_{pdb} , ainsi que le taux net de recombinaison des électrons sur les LPs, U_{ndb} . La température du maximum (1) du TSC est indiquée.

E.5.2. Effets des états localisés

Pour compléter les descriptions données précédemment, nous présentons dans cette section l'action de divers paramètres microscopiques liés aux états localisés du a-Si:H sur la conductivité TSC calculée. En particulier, nous faisons varier l'énergie caractéristique de chaque queue de bande, $k_B T_c$ et $k_B T_v$, ainsi que la concentration totale et la position énergétiques des LPs, N_{db} et E_{db} . Pour chaque paramètre étudié, nous calculons la conductivité TSC pour deux valeurs supplémentaires pas très éloignées de la valeur standard pour rester dans un groupe de paramètres cohérents du a-Si:H.

E.5.2.a. La queue de bande de conduction (QBC)

La figure E.10 montre l'influence de l'énergie caractéristique de la QBC sur le spectre de TSC. Deux valeurs de $k_B T_c$ (25 et 35 meV) sont prises autour de la valeur standard (30 meV). Lorsqu'on fait varier la largeur de la QBC, seul le premier pic est affecté. Cela est prévisible puisque son apparition provient de la libération des électrons en excès piégé initialement dans la méthode TSC (voir section E.5.1). Lorsque $k_B T_c$ augmente, T_1 se décale vers les hautes températures et le pic s'élargit du fait de la libération de plus d'électrons à partir d'une QBC plus large. Par voie de conséquence, le minimum est

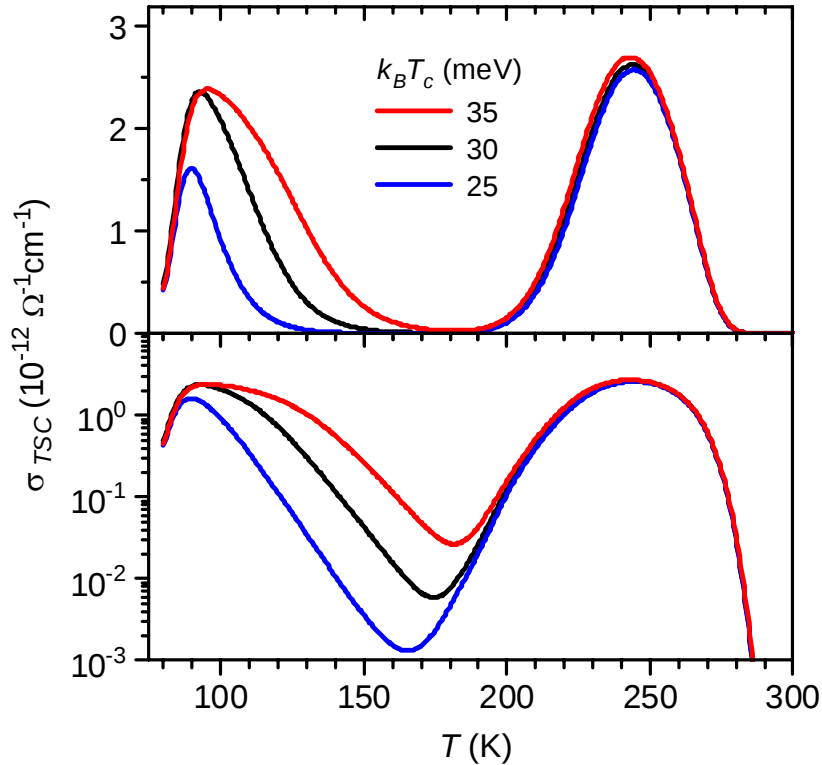


Figure E.10: Conductivité TSC σ_{TSC} , suivant une échelle linéaire et logarithmique, calculée pour trois valeurs différentes de l'énergie caractéristique $k_B T_c$ de la QBC.

également décalé vers de plus hautes températures [Fig. E.10(b)]. Le second pic est très peu influencé par $k_B T_c$ car, comme nous l'avons vu dans la section précédente, la QBC a atteint quasiment son état d'équilibre et agit peu dans cette gamme de température.

D'autre part, nous remarquons que dans la représentation logarithmique que la décroissance du premier pic montre une partie linéaire intéressante. Elle pourrait être associée à $k_B T_c$ car, comme on le verra plus loin, la QBV et les LPs n'influent pas sur la pente de cette décroissance.

Pour cela, on trace la conductivité TSC en fonction du niveau de démarcation E_d qui sépare les niveaux pièges, en équilibre avec les états étendus de la bande de conduction, des niveaux profonds de recombinaison. Dans le cas où le coefficient de capture est constant pour une distribution continue d'états monovalents, comme dans le cas présent pour la QBC, le niveau de démarcation peut s'écrire dans le cadre du modèle du piégeage multiple [86]:

$$E_d(t) = -k_B T \ln \nu_0 t \quad (\text{E.3})$$

où la fréquence de sauts ν_0 représente le terme pré-exponentiel dans l'expression du coefficient d'émission et s'écrit $\nu_0 = C_n^{ct} N_c$. C_n^{ct} est le coefficient de capture pour les niveaux de la QBC et N_c est la densité effective d'électrons en E_c .

On peut montrer que le quasi-niveau de Fermi des électrons E_{Fn} reste proche de E_d à tout instant. Nous avons vu que l'occupation de la QBC est proche de celle de l'équilibre après le premier pic et que le maximum d'émission d'électrons a lieu autour du niveau E_{Fn} .

Dans le cas où seules l'émission et la recombinaison des électrons sur la QBC prédominent dans les échanges, comme cela semble être le cas dans cette gamme de température, et où une situation de quasi-équilibre existe pendant la décroissance du premier pic, on peut approximer la concentration n par l'expression donnée par Fritzsche *et al.* [134] suivante:

$$n = \frac{k_B T}{R_{ct} t} N_{ct}(E_d) \quad (\text{E.4})$$

où R_{ct} est le taux de recombinaison et $N_{ct}(E_d)$ est la densité d'états de la QBC à l'énergie E_d . Dans notre cas, cette relation devient:

$$n = \frac{k_B T}{R_{ct} t} N_{ct}^0 \exp \frac{E_d - E_c}{k_B T_c} \quad (\text{E.5})$$

Cette proportionnalité entre n et la densité d'états de la QBC en E_d permet ainsi d'évaluer pendant la décroissance l'énergie caractéristique $k_B T_c$. Sur la figure E.11, nous représentons pour trois différentes valeurs de $k_B T_c$ σ_{TSC} en fonction de l'énergie E_d . Après avoir calculé l'inverse des pentes dans les décroissances de $\sigma_{TSC}(E_d)$ on a trouvé les valeurs respectives reportées près de chaque courbe. On retrouve bien, à quelques dixièmes d'eV près, la valeur de l'énergie caractéristique $k_B T_c$ introduite initialement dans le calcul.

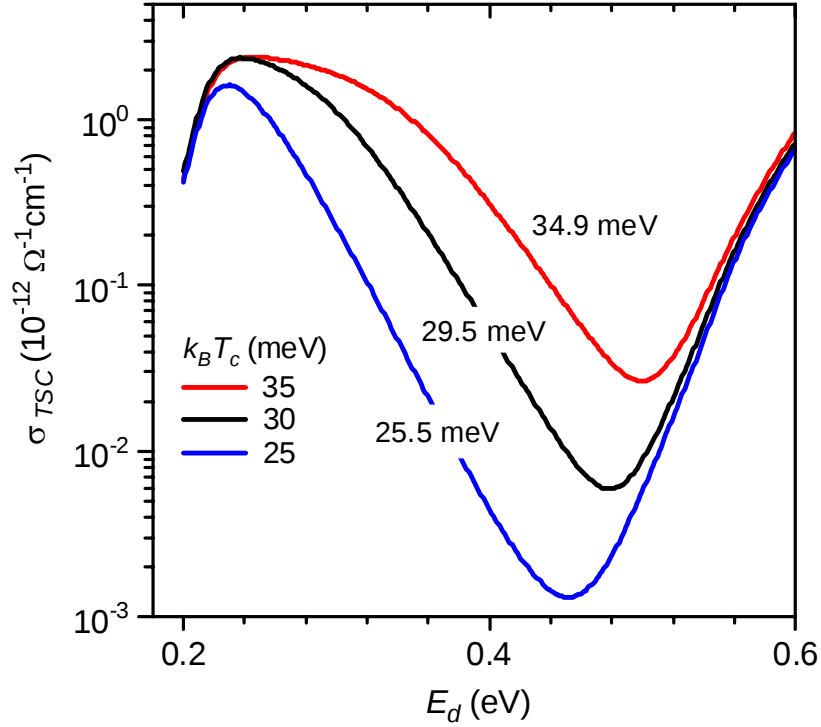


Figure E.11: Tracés de σ_{TSC} en fonction du niveau de démarcation E_d calculés pour différentes valeurs de l'énergie caractéristique $k_B T_c$ de la QBC.

E.5.2.b. La queue de bande de valence (QBV)

Les figures D.12(a) et D.12(b) montrent l'action de l'énergie caractéristique de la QBV ($k_B T_v$) sur la conductivité TSC. Nous avons également considéré deux valeurs de $k_B T_v$ (60 et 80 meV) autour de la valeur standard (70 meV). L'énergie caractéristique de la QBV agit surtout sur le second pic. Quand $k_B T_v$ augmente, ce pic tend vers les basses températures, augmente en amplitude et sa largeur diminue. Lorsque la QBV est plus large, la concentration des LPs D^- , Q_{db}^- , est plus élevée car la neutralité est assurée pratiquement par les concentrations Q_{db}^- et Q_{vt} dans cette gamme de température (voir section E.5.1.a).

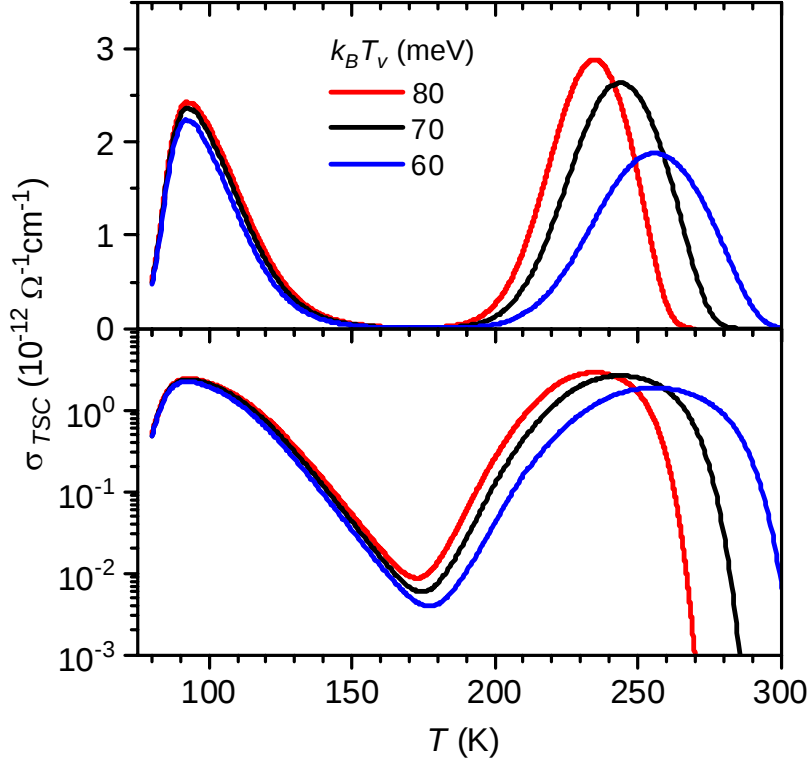


Figure E.12: Conductivité TSC $\sigma_{TSC}(T)$, suivant une échelle linéaire et logarithmique, calculée pour trois valeurs différentes de l'énergie caractéristique $k_B T_v$ de la QBV.

Les liaisons pendantes (LPs) vont émettre moins d'électrons pour retrouver leur valeur d'équilibre qui est dans ce cas plus élevée. L'augmentation de Q_{db}^- entraîne une diminution des concentrations des LPs dans les deux autres états de charges, c'est à dire Q_{db}^0 et Q_{db}^+ . La concentration des centres de recombinaison se retrouve ainsi diminuée et explique dès lors l'augmentation de l'amplitude du deuxième pic.

Le premier pic est très peu modifié. En particulier, la pente de sa décroissance reste inchangée comme cela est prévisible.

E.5.2.c. Les liaisons pendantes (LPs)

La figure E.13 montre l'influence de la densité totale de LPs N_{db} . Nous avons examiné deux valeurs de N_{db} (10^{15} et 10^{16} cm^{-3}) pas très éloignées de la valeur standard ($5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$). Une augmentation de N_{db} entraîne une diminution en amplitude des deux pics. Cette atténuation s'explique par l'augmentation de la concentration de centres profonds de recombinaisons dus aux LPs. Le premier pic tend vers les basses températures tout en s'affinant. L'augmentation des liaisons pendantes tend à faire

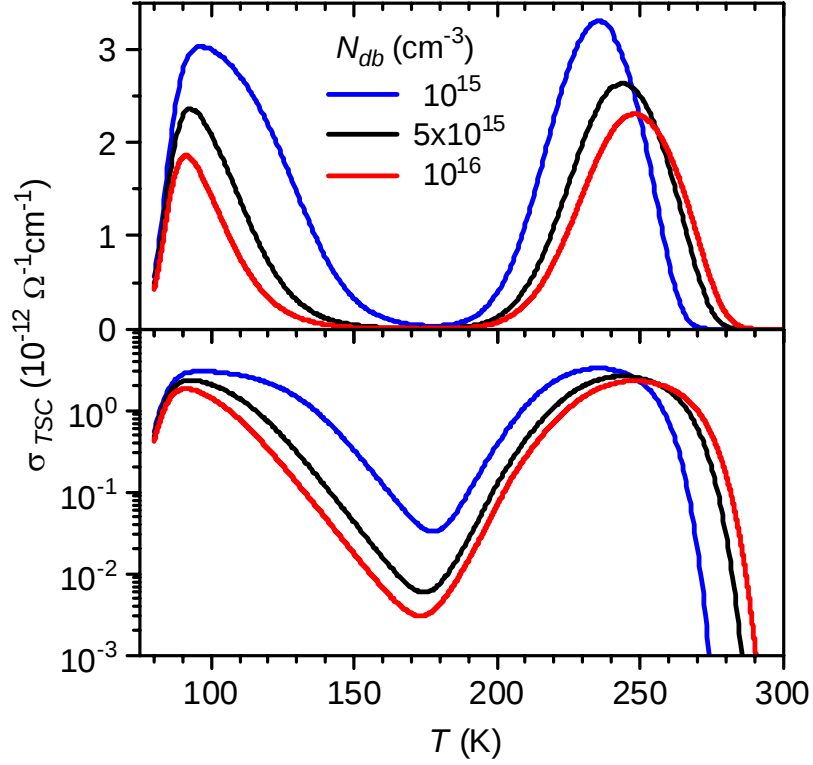


Figure E.13: Conductivité $\sigma_{TSC}(T)$, suivant une échelle linéaire et logarithmique, calculée pour trois valeurs différentes de la concentration totale N_{db} de LPs.

disparaître ce premier pic. Par contre le second pic se déplace vers de plus hautes températures et s'élargit.

La figure E.14 montre que la position du niveau D^0/D^+ agit principalement sur la position et l'amplitude du deuxième pic. Il faut noter que l'énergie de corrélation est maintenue ($U = 0.4\text{eV}$). Lorsque le niveau d'énergie du niveau D^- se rapproche de la bande de conduction, il répond plus tôt dans le processus de TSC. L'amplitude plus élevée du pic provient principalement d'une émission plus importante d'électrons des LPs D^- à cause de sa position plus élevée dans le gap.

Le minimum se décale naturellement vers les hautes températures lorsque D^- devient plus profond et donc répond à plus haute température.

Le premier pic reste inchangé car le rôle joué par les LPs dans cette partie reste faible. La position des LPs n'influe pas sur la recombinaison dans cette gamme de température. Notons que la pente de la décroissance du premier pic reste inchangée quand les paramètres inhérents aux LPs varient.

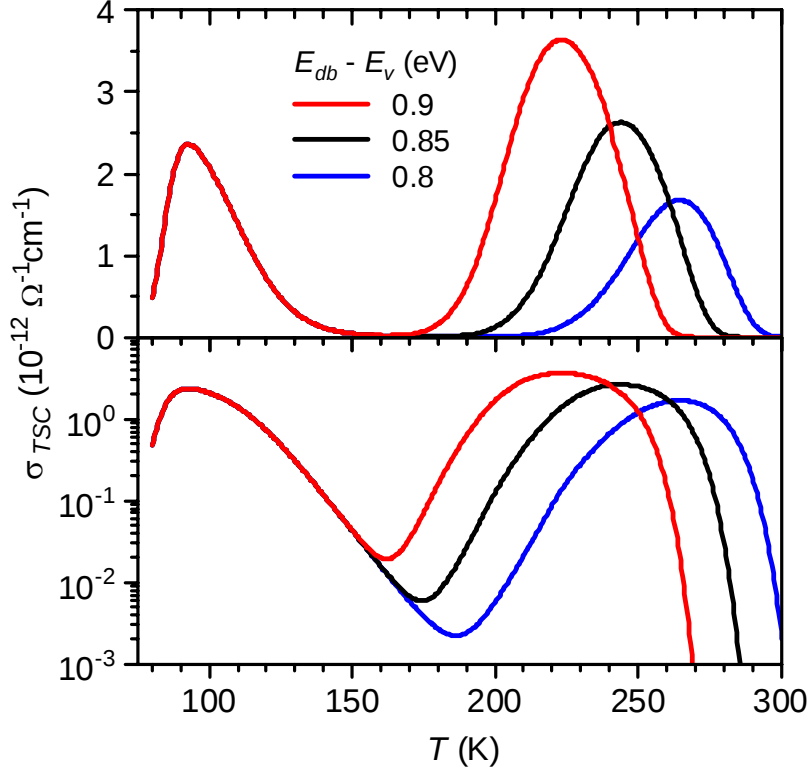


Figure E.14: Conductivité $\sigma_{TSC}(T)$, suivant une échelle linéaire et logarithmique, calculée pour trois valeurs différentes de la position énergétique E_{db} du niveau D^0/D^+ des LPs.

E.5.3. Effets des paramètres du TSC

Dans la méthode de TSC il est généralement intéressant d'étudier l'effet des paramètres de départ, avant que la température ne commence à augmenter, et celui de la vitesse de chauffage. Ces grandeurs sont en effet accessibles pendant l'expérience de TSC.

E.5.3.a. Influence des paramètres de départ: T_0 , G et t_{att}

Nous représentons sur les figures E.15, E.16 et E.17 l'effet des paramètres de commencement du TSC: la température de départ T_0 , le taux de génération G de l'éclairement initial et le temps d'attente t_{att} .

Lorsque T_0 augmente, le maximum du premier pic tend vers de plus hautes températures [Fig. E.15]. Après l'excitation initiale, le niveau de la QBC le plus élevé occupé par des électrons est d'autant plus proche du bas de la bande de conduction E_c que la température est plus basse.

L'augmentation de l'intensité de l'éclairement initial entraîne un déplacement du premier pic vers les basses températures [Fig. E.16]. Un accroissement du taux de

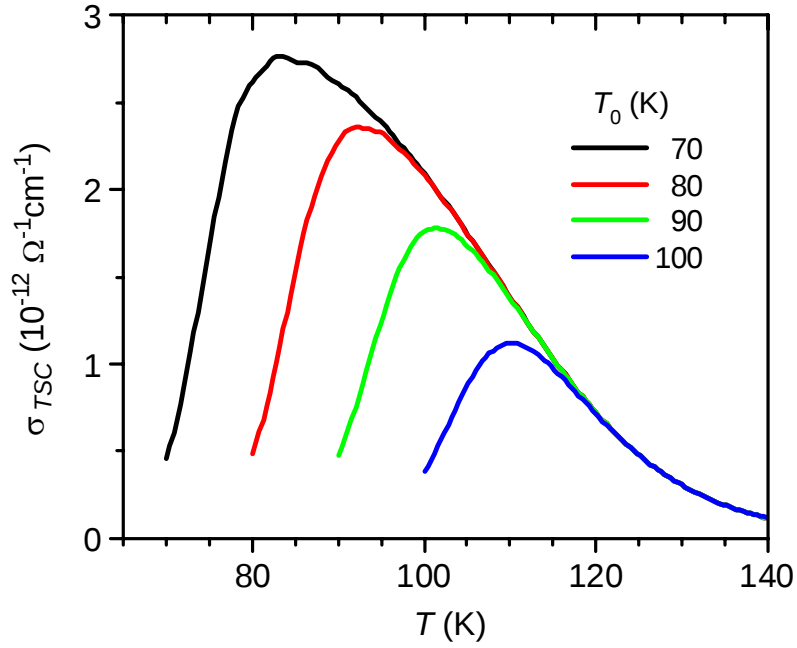


Figure E.15: Effet de la température de départ T_0 sur le pic à basse température du spectre de TSC.

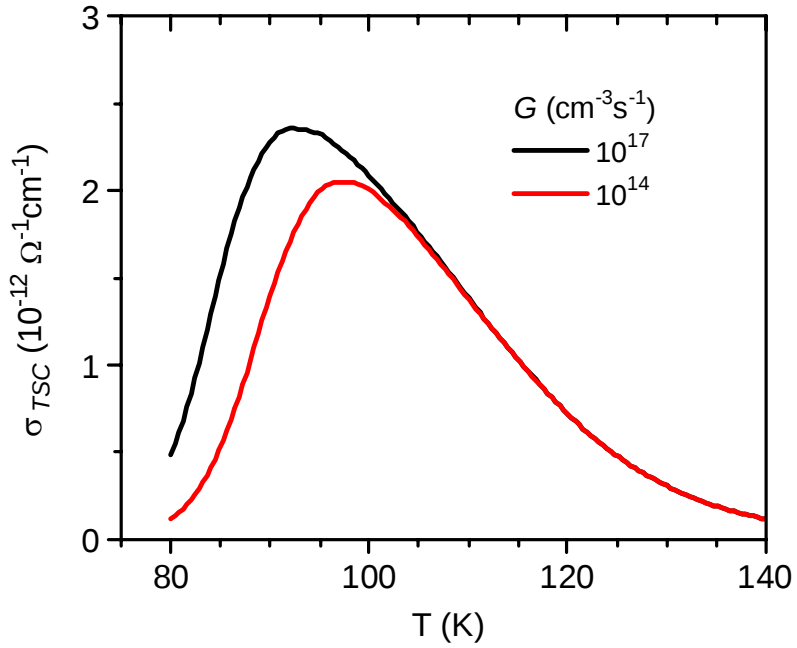


Figure E.16: Effet du taux de génération G dû à l'éclairement initial sur le pic à basse température du spectre de TSC.

génération G entraîne celui du nombre de paires électron-trou générés. Les quasi-niveaux de Fermi sont alors plus proches des bandes d'états étendus. Lorsque le chauffage commence, les niveaux qui répondent au début du TSC sont plus élevés et donc

commencent à émettre à plus basse température. Ceci est confirmé par l'expérience [128] (voir Figs. E.2(a) et E.2(b)).

La figure E.17 montre que l'augmentation de t_{att} induit un déplacement du pic vers les hautes températures. Après l'éclairement initial, les états sont remplis jusqu'à leur niveau maximal conformément aux valeurs de G et de T_0 . Plus le temps d'attente est long, plus le niveau maximum rempli est profond. Cela entraîne une réponse du TSC à plus haute température. Cela a été observé expérimentalement sur les échantillons MEN et GREN [128] (voir Figs. E.2(c) et E.2(d)).

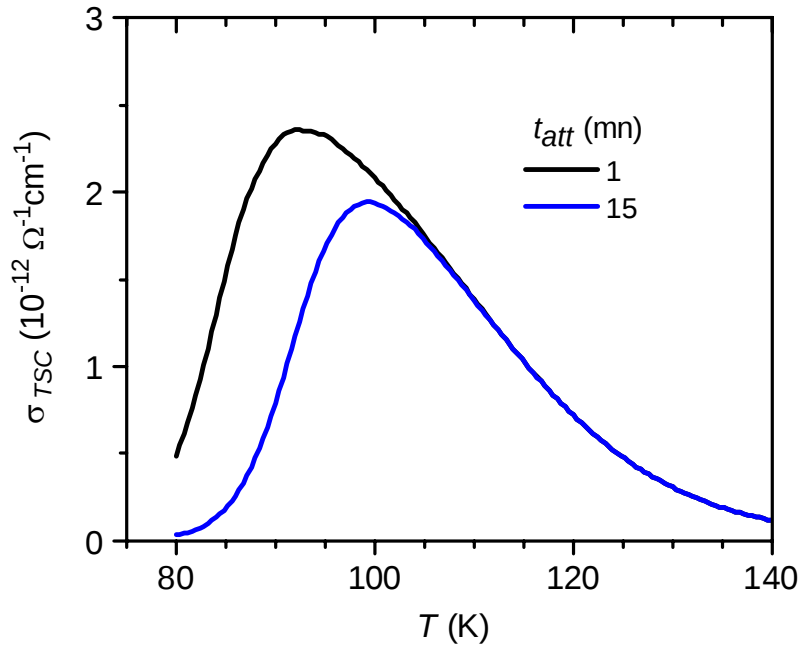


Figure E.17: Effet du temps d'attente t_{att} sur le pic à basse température du spectre de TSC.

Il faut noter ici que ces trois paramètres influencent particulièrement la montée du premier pic, la décroissance restant quant à elle inchangée. Quant au deuxième pic, qui concerne les niveaux profonds des LPs, il reste insensible aux paramètres de départ du TSC.

E.5.3.b. La vitesse de chauffage β

Nous traçons sur la figure E.18 des spectres de TSC calculés pour différentes vitesses de chauffage β en échelle linéaire [Fig. 18(a)], et en représentation d'Arrhenius ($\text{Log } \sigma_{TSC}$ en fonction de l'inverse de la température) [Fig. 18(b)]. La vitesse β influe sur la position, l'amplitude et la largeur des deux pics. Toutefois, la pente de la décroissance du premier pic associée à la QBC, décrite dans la section E.5.2.a, reste inchangée quand β varie. En

particulier, le deuxième maximum (2) et le minimum (3) sont activés thermiquement par les énergies $E_{\max 2} = 0.57 \text{ eV}$ et $E_{\min} = 0.56 \text{ eV}$ respectivement. Ces valeurs sont proches de la position du niveau des LPs doublement occupées $D^- (E_{db} + U)$ par rapport au bas de la bande de conduction E_c . On rappelle que cette valeur a été prise égale à 0.55 eV dans notre simulation. Pour le minimum en particulier, nous avons vu dans la section E.5.1.a qu'à $T = T_{\min}$, le quasi-niveau de Fermi E_{Fn} traverse l'énergie $(E_{db} + U)$. C'est à cette température que le niveau D^- commence à émettre des électrons. Ensuite, le deuxième maximum apparaît à la fin du TSC qui correspond justement au recouvrement des LPs de leurs densités d'équilibre.

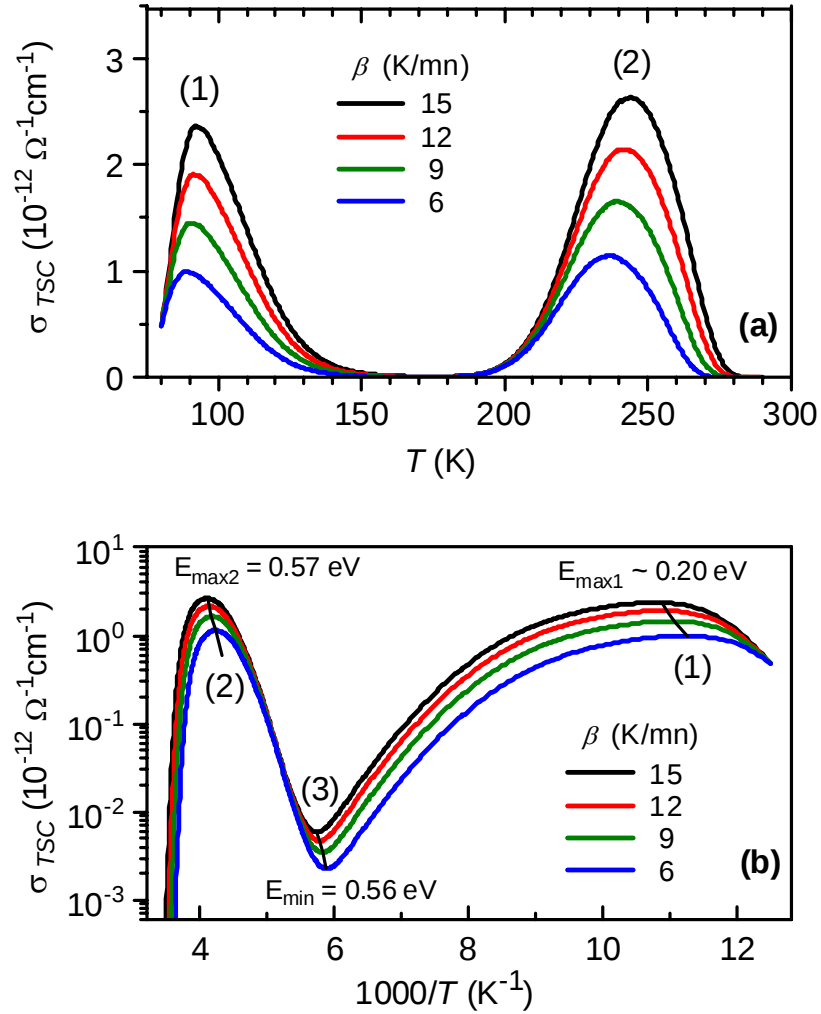


Figure E.18: Effet de la vitesse de chauffage β sur le spectre de TSC $\sigma_{TSC}(T)$ suivant une échelle linéaire (a) et en représentation d'Arrhenius (b).

Dès les premiers développements sur le TSC dans les semiconducteurs cristallins, l'énergie d'activation du maximum du pic a déjà été associée à la position dans la bande interdite du niveau piège discret associé [126].

Le premier maximum semble également être thermiquement activé mais avec un coefficient de corrélation moindre. Les valeurs obtenues tournent autour de 0.2 eV, proche de la position moyenne des quasi-niveaux de Fermi des électrons E_{Fn} aux différentes températures $T_{\max 1}$ et donc du maximum d'occupation de la QBC. Cette valeur n'est à associer à aucune position énergétique d'un niveau particulier dans le gap. Elle ne traduit qu'un équilibre entre la QBC et la bande de conduction.

E.6. Discussion et conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre une simulation numérique de la conductivité thermiquement stimulée. Le modèle standard de densité d'états du a-Si:H est utilisé. Dans les équations cinétiques, nous avons tenu compte de toutes les transitions entre états localisés et états étendus. Le calcul nécessite la résolution d'un système d'équations différentielles non linéaire et raide.

Les spectres calculés à l'aide des paramètres standard présentent des allures usuellement obtenues sur des échantillons de bonne qualité électronique. Après une étude systématique des variations des spectres en fonction des paramètres microscopiques examinés un par un, on voit que la taille des pics et leur position en dépendent. Il semble que seul un pic unique apparaît lorsque l'échantillon est de mauvaise qualité. A titre d'illustration, nous reportons sur la figure E.19 un spectre de TSC calculé pour un jeu de paramètres caractéristiques d'un échantillon de mauvaise qualité électronique: forte densité de défauts profonds des liaisons pendantes (N_{db}), les énergies caractéristiques $k_B T_c$ et $k_B T_v$ des deux queues de bandes plus importantes et la position plus élevée du niveau de la liaison pendante doublement occupée $D^{\cdot-} (E_{db})$ due à l'élargissement de la QBV. Les paramètres modifiés par rapport aux paramètres standard sont donnés sur le graphe. Le spectre de TSC ainsi obtenu présente un pic prééminent à 178 K et un pic atrophié à plus basse température au commencement du TSC. Il est à noter que les pics de faible amplitude sont difficilement détectables expérimentalement. Ce calcul test de la conductivité TSC effectué avec des paramètres appropriés nous permet d'expliquer l'absence du pic à basse température survenant dans les échantillons de mauvaise qualité. Une forte densité d'états localisés peut apparaître dès la préparation du matériau ou après que celui-ci ait subi un éclaircissement prolongé qui a pour conséquence l'augmentation de défauts (effet Staebler-Wronski).

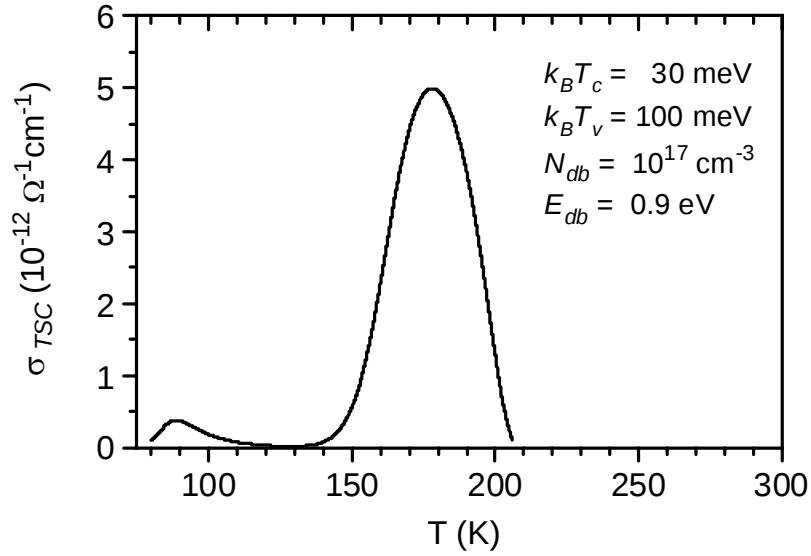


Figure E.19: Spectre de TSC calculé dans le cas d'un échantillon de mauvaise qualité électronique. Les paramètres microscopiques utilisés sont donnés sur le graphe.

D'autre part, l'exploitation du premier pic, lorsqu'il existe, permet d'obtenir l'énergie caractéristique de la queue de bande de conduction $k_B T_c$. Le second pic est attribué à la libération des électrons à partir du niveau D^- des liaisons pendantes. L'énergie d'activation du minimum et du maximum du second pic, lorsque la vitesse de chauffage β varie, donne une indication de la position énergétique du niveau D^- par rapport au bas de la bande de conduction.

Chapitre F

Récapitulatif et conclusions

Au cours de ce travail nous avons présenté une simulation numérique de deux méthodes transitoires de caractérisation électrique usuellement utilisée pour le a-Si:H qui sont la photoconductivité transitoire (PCD) et la conductivité thermiquement stimulée (TSC).

Après une introduction et une présentation du semiconducteur amorphe a-Si:H, nous décrivons le modèle de densité d'états employé dans les deux simulations numériques. C'est le modèle standard (queues de bandes exponentielles et deux niveaux discrets corrélés des liaisons pendantes). Le calcul de la conductivité en fonction du temps a conduit à la résolution en un point d'un système d'équations différentielles couplées, non linéaire et mal conditionné. La raideur du système à résoudre numériquement est accentuée lorsque la température dépend du temps comme c'est le cas dans le TSC. Nous avons tenu compte, dans les deux simulations, de toutes les transitions électroniques possibles entre états localisés du gap et états étendus des deux bandes d'énergie. Un tel traitement, basé sur les équations cinétiques régissant les différentes densités en fonction du temps et l'équation de neutralité de charge, est valable pour les échantillons à géométrie coplanaire où on peut considérer un champ électrique faible et uniforme. Les équations de base communes à la PCD et au TSC ont été alors explicitées. Chaque simulation a été alors développée séparément dans un chapitre. Chaque chapitre débute par un rappel sur les travaux antérieurs sur le sujet, suivi du développement du calcul et des résultats obtenus.

F.1. Photoconductivité transitoire (PCD)

La PCD est la décroissance de la photoconductivité à partir de sa valeur stationnaire. La simulation numérique a permis de reproduire le transitoire observé en général expérimentalement. La représentation de la PCD en fonction du temps, en échelle logarithmique, montre deux paliers séparés par un épaulement plus ou moins marqué aux environs de la microseconde après interruption de l'éclairement. A cause de la rapidité de la première phase, cette structure sur le transitoire a été rarement rapportée par la littérature. En effet, pour de tels phénomènes furtifs, un équipement expérimental adapté permettant l'enregistrement de signaux très rapides de l'ordre de la picoseconde, est nécessaire.

Cet épaulement est plus diffus expérimentalement car il marque le début de la réponse des niveaux des liaisons pendantes. En effet, ces défauts profonds présentent en réalité une distribution en énergie due au désordre structural. L'apparition de l'émission d'électrons du niveau D^- se fait progressivement en fonction du temps. La mise en valeur de l'épaulement se retrouve ainsi compromise par la densité d'états existant réellement dans le a-Si:H.

Une étude systématique de l'effet des paramètres associés aux états localisés et l'analyse des variations temporelles des taux nets de capture par les différents états localisés ont été présentées. Nous avons trouvé que les différents paramètres microscopiques influent simultanément sur l'amplitude et la forme du transitoire PCD. Nous avons montré que la première partie très rapide du transitoire résulte de l'émission d'électrons de la queue de bande de conduction et de la recombinaison sur les liaisons pendantes. La deuxième partie du transitoire découle de l'émission d'électrons par les liaisons pendantes qui ralentit ainsi la décroissance du transitoire. La conductivité transitoire se termine par une décroissance rapide où les porteurs de charge se recombinent rapidement sur les états des liaisons pendantes et ceux de la queue de bande de valence.

Pour conclure cette partie, nous avons proposé une comparaison entre nos principaux résultats, valables sous champ électrique faible (LEF), et des résultats préliminaires calculés à partir d'une simulation de la conductivité transitoire dans une structure métal/a-Si:H (HEF). La prise en compte de la variable d'espace dans le calcul HEF, en plus du temps, rend ce dernier ardu et incertain à cause des problèmes de convergence et de stabilité engendrés par les problèmes des conditions aux limites. La concordance trouvée entre les résultats des deux calculs permet de valider d'une certaine façon chacun d'eux.

F.2. Conductivité thermiquement stimulée (TSC)

En introduisant un jeu de paramètres microscopiques généralement admis pour des échantillons de a-Si:H de bonne qualité électronique, la simulation numérique du TSC a permis d'obtenir un spectre à deux pics. L'analyse des variations en fonction de la température des différents taux de capture par les différents groupes d'états localisés a montré que le premier pic est associé à la libération des électrons piégés par la queue de bande de conduction et que le deuxième pic à plus haute température résulte des électrons provenant des liaisons pendantes. Pour confirmer ces conclusions, une étude systématique de l'effet des paramètres microscopiques, pris un à un, est également présentée.

La décroissance du premier pic à basse température, tracée en fonction du niveau de démarcation pour les électrons, permet de déterminer l'énergie caractéristique $k_B T_c$ de la queue de bande de conduction. Cette détermination est tributaire de l'existence du pic concerné sur le spectre de TSC.

La variation de la vitesse de remontée en température induit une activation thermique des différents points remarquables (les deux maxima et le minimum). L'énergie d'activation du minimum et du maximum à haute température permet de positionner le niveau occupé par deux électrons D^+ de la liaison pendante par rapport au bas de la bande de conduction.

Expérimentalement, il arrive que seul un pic apparaît sur les spectres de TSC relevés sur divers échantillons de a-Si:H. Suite aux différentes observations des études menées ci-dessus, on peut associer l'apparition d'un pic unique à la qualité de l'échantillon. En effet, en optant pour un jeu de paramètres caractéristique d'un "mauvais" échantillon, on a obtenu un spectre de TSC à un seul pic.

F.3. Perspectives ultérieures

Les simulations numériques présentées peuvent être adaptées à d'autres semiconducteurs ayant des densités d'états voisines de celle du a-Si:H. On peut citer en particulier le silicium microcristallin hydrogéné ($\mu\text{c-Si:H}$) et le silicium polycristallin qui présentent de meilleures qualités, telle que la stabilité, pour certaines applications.

Pour se rapprocher de la forme réelle de la densité d'états du a-Si:H, on pourrait également introduire dans les simulations une distribution en forme de gaussiennes des niveaux de liaisons pendantes et procéder à une étude systématique similaire.

Pour pouvoir exploiter entièrement le transitoire de la photoconductivité et la conductivité thermiquement stimulée, il serait judicieux d'approximer les spectres, selon les gammes de temps, par des expressions analytiques simplifiées. Leur authenticité serait vérifiée à chaque fois à l'aide du calcul complet. Ce procédé pourrait permettre de caractériser les états localisés du a-Si:H. Néanmoins, l'exploitation optimale du transitoire isotherme est tributaire de la qualité des résultats expérimentaux qui devraient permettre d'atteindre des instants très courts.

Les simulations numériques réalisées dans ce travail étant valables en champ électrique faible, il serait intéressant d'améliorer le calcul HEF pour le transitoire: réduire le temps de calcul en utilisant des outils mathématiques adaptés pour résoudre les problèmes de stabilité et de convergence. Il serait également avantageux d'introduire la variable d'espace pour le calcul de la conductivité thermiquement stimulée. Il serait possible par exemple de procéder à une étude en fonction du champ électrique et de calculer le TSC pour différentes configurations des échantillons telles que les structures Schottky. Néanmoins, les problèmes de stabilité dans le calcul numérique seront plus importants que pour le transitoire isotherme.

Enfin, ces deux méthodes pourraient être combinées à d'autres méthodes de caractérisation du a-Si:H pour optimiser leurs utilisations.

Liste des abréviations

a-Si	Silicium amorphe
a-Si:H	Silicium amorphe hydrogéné
BC	Bande de conduction
BV	Bande de valence
c-Si	Silicium cristallin
<i>ct</i>	<i>Conduction tail</i>
D ⁻	Liaison pendante chargée négativement
D ⁺	Liaison pendante chargée positivement
D ⁰	Liaison pendante neutre
<i>db</i>	<i>Dangling bond</i>
HEF	<i>High electric field</i>
LEF	<i>Low electric field</i>
LP	Liaison pendante
MT	<i>Multiple trapping</i>
PCD	<i>Photoconductivity decay</i>
PCS	Photoconductivité stationnaire
QBC	Queue de bande de conduction
QBV	Queue de bande de valence
RDF	<i>Radial Distribution Function</i>
TSC	<i>Thermally stimulated current or conductivity</i>
<i>vt</i>	<i>Valence tail</i>
μc-Si:H	Silicium microcristallin hydrogéné

Liste des symboles

C_n^+	Coefficient de capture des électrons par les LPs D^+
C_n^0	Coefficient de capture des électrons par les LPs D^0
C_p^0	Coefficient de capture des trous par les LPs D^0
C_p^-	Coefficient de capture des trous par les LPs D^-
$C_n^{ct(vt)}$	Coefficient de capture des électrons par la QBC (QBV)
$C_p^{ct(vt)}$	Coefficient de capture des trous par la QBC (QBV)
e_n^0	Coefficient d'émission des électrons par les LPs D^0
e_n^-	Coefficient d'émission des électrons par les LPs D^-
e_p^0	Coefficient d'émission des trous par les LPs D^0
e_p^+	Coefficient d'émission des trous par les LPs D^+
$e_n^{ct(vt)}$	Coefficient d'émission des électrons par la QBC (QBV)
$e_p^{ct(vt)}$	Coefficient d'émission des trous par la QBC (QBV)
E	Energie
E_c	Bord de la BC
E_{db}	Niveau d'énergie des liaisons pendantes D^0/D^+
E_F	Niveau de Fermi
E_{Fn}	Quasi-niveau de Fermi des électrons
E_{Fp}	Quasi-niveau de Fermi des trous
E_g	Largeur du gap de mobilité
E_v	Bord de la BV
f_0	Fonction de Fermi-Dirac
f_{ct}	Fonction d'occupation de la QBC en régime permanent
f_{vt}	Fonction d'occupation de la QBV en régime permanent
f^+	Probabilités pour que la LP soit dans l'état de charge D^+ en régime permanent
f^0	Probabilités pour que la LP soit dans l'état de charge D^0 en régime permanent
f^-	Probabilités pour que la LP soit dans l'état de charge D^- en régime permanent
G	Taux de génération bande à bande de paires électron-trou
$k_B T_c$	Energie caractéristique de la QBC
$k_B T_v$	Energie caractéristique de la QBV
n	Concentration des électrons libres
N_c	Densité effective d'électrons en E_c
N_{ct}	Densité d'états de la QBC

N_{db}	Concentration totale de liaisons pendantes
N_v	Densité effective de trous en E_v
N_{vt}	Densité d'états de la QBV
N_{ct}^0	Densité d'états effective au seuil de mobilité E_c
N_{vt}^0	Densité d'états effective au seuil de mobilité E_v
p	Concentration des trous libres
Q_{ct}	Densité d'électrons piégés sur la QBC
Q_{vt}	Densité de trous piégés sur la QBV
Q_{db}^+	Densité de LPs D^+
Q_{db}^0	Densité de LPs D^0
Q_{db}^-	Densité de LPs D^-
t	Temps
t_{att}	Temps d'attente sous obscurité dans la méthode TSC
T	Température
T_0	Température de départ dans la méthode TSC
T_c	Température caractéristique de la QBC
T_v	Température caractéristique de la QBV
U	Energie de corrélation
U_n	Le taux net de capture des électrons
U_{nct}	Le taux net de capture des électrons par la QBC
U_{nvt}	Le taux net de capture des électrons par la QBV
U_{ndb}	Le taux net de capture des électrons par les LPs
U_p	Le taux net de capture des trous
U_{pct}	Le taux net de capture des trous par la QBC
U_{pvt}	Le taux net de capture des trous par la QBV
U_{pdb}	Le taux net de capture des trous par les LPs
β	Vitesse de chauffage dans la méthode TSC
μ_n	Mobilité des électrons dans les états étendus de la BC
μ_p	Mobilité des trous dans les états étendus de la BV
σ_0	Conductivité à l'équilibre
σ_{PCD}	Conductivité transitoire
σ_{PCS}	Photoconductivité stationnaire
σ_{TSC}	Conductivité TSC

NB: Les symboles indicés par le chiffre "0", non répertoriés sur cette liste, correspondent aux grandeurs respectives à l'équilibre.

Bibliographie

- [1] W. C. O'Mara, *Liquid crystal flat panel displays: manufacturing, science & technology*, 1st ed. (Van Nostrand Reinhold, New York, 1993).
- [2] D. E. Carlson, C. R. Wronski, *Appl. Phys. Lett.* 28, 631 (1976).
- [3] Y. Hamakawa, H. Okamoto, Y. Nitta, *Appl. Phys. Lett.* 35, 15 (1979).
- [4] H. Okamoto, Y. Nitta, T. Yamaguchi, Y. Hamakawa, *Sol. Energy Matter.* 3, 313 (1980).
- [5] J. Poortmans, V. Arkhipov, Eds., *Thin Film Solar Cells, Fabrication, characterization and applications*, 1st ed. (Wiley, New York, 2006).
- [6] D. L. Staebler, C. R. Wronski, *Appl. Phys. Lett.* 31, 292 (1977).
- [6] D. L. Staebler, C. R. Wronski, *Appl. Phys. Lett.* 31, 292 (1977).
- [7] P. Kiréev, *La physique des semiconducteurs* (Editions Mir, Moscou, 1975).
- [8] S. M. Sze, *Physics of Semiconductor Devices*, 2nd edition (John Wiley & Sons, New York, 1981).
- [9] P. Blood, J. W. Orton, *The Electrical Characterisation of Semiconductors: Majority Carriers and Electron States* (Academic Press, London, 1992).
- [10] R. A. Street, *Hydrogenated amorphous silicon*, Cambridge Solid State Science Series (Cambridge University Press, Cambridge, 1991).
- [11] P. Bräunlich, *Thermally Stimulated Relaxation in Solids*, Topics in Applied Physics Vol. 37 (Springer-Verlag, Berlin Heidelberg and New York, 1979), chap. 2.
- [12] R. Chen, Y. Kirsh, Eds., *Analysis of thermally stimulated processes*, International Series on the Science of the Solid State Vol. 15 (Pergamon Press, North Holland, 1981), p. 40.
- [13] K. Morigaki, *Physics of Amorphous Semiconductors* (Imperial College Press and World Scientific Publishing, London, 1999).
- [14] R. A. Street, ed., *Technology and Applications of Amorphous Silicon*, Springer Series in Material Science, Vol. 37 (Springer-Verlag, New York, 2001).
- [15] T. M. Searle, ed., *Properties of Amorphous Silicon and its Alloys*, EMIS Datareview Series No. 19 (IEE, London, 1999).

- [16] W. E. Spear, P. G. Le Comber, Solid St. Commun. 17, 1193 (1975).
- [17] W. E. Spear, Adv. Phys. 6, 811 (1977).
- [18] The 22nd International Conference on Amorphous and Nanocrystalline Semiconductors-Science and Technology (ICANS 22), 19-24 August 2007, Colorado, U.S.A. (<http://www.icans22.org>).
- [19] M. H. Brodsky, R. S. Title, K. Weiser, G. D. Petit, Phys. Rev. B 1, 2632 (1971).
- [20] D. Kaplan, D. Lepine, Y. Petroff, P. Thierry, Phys. Rev. Lett. 35, 1376 (1975).
- [21] M. H. Brodsky, M. Cardona, J. J. Cuaomo, Phys. Rev. B 16, 3556 (1977).
- [22] P. A. Thomas, M. H. Brodsky, D. Kaplan, D. Lepine, Phys. Rev. B 18, 3059 (1978).
- [23] M. Stutzmann, Phil. Mag. B 60, 531 (1989).
- [24] M. Stutzmann, W. B. Jackson, C. C. Tsai, Phys. Rev. B 32, 23 (1985).
- [25] R. A. Street, K. Winer, Phys. Rev. 40, 6236 (1989).
- [26] T. D. Moustakas, J. Electron. Materials 8, 432 (1970).
- [27] N. Beldi, *Dépôt de couches minces de silicium amorphe hydrogéné par pulvérisation continue assistée d'un magnétron*, Thèse de Magister, U.S.T.H.B., Alger (1993).
- [28] M. Aoucher, *Propriétés électroniques du silicium amorphe préparé par bombardement électronique - Etude du recuit thermique*, Thèse de Magister, U.S.T.H.B., Alger (1984).
- [29] M. Hanabusa, N. Namiki, K. Yoshihara, Appl. Phys. Lett. 35, 626 (1979).
- [30] R. E. Vitturo, K. Weiser, J. of Non Cryst. Solids 77 & 78, 753 (1985).
- [31] D. Kaplan, N. Sol, G. Velasco, Appl. Phys. Lett. 33, 440 (1978).
- [32] R. Cherfi, *Dépôt du silicium en couches minces à haute température par pulvérisation en continu assistée d'un champ magnétique*, Thèse de Magister, U.S.T.H.B., Alger (2002).
- [33] K. Mokeddem, *Dépôt de nitrure de silicium amorphe hydrogéné par pulvérisation DC magnétron*, Thèse de Magister, U.S.T.H.B., Alger (2004).
- [34] T. D. Moustakas, in *Semiconductors and Semimetals Vol. 21, Part A*, ed. J. I. Pankove (Academic Press, Orlando, 1984), p. 55.
- [35] W. G. J. H. M. van Sark, in *Thin Films and Nanostructures, Vol. 30, Advances in Plasma-Grown Hydrogenated Films*, ed. M. H. Francombe (Academic Press, San Diego, 2002), p. 1.

- [36] A. H. Mahan, J. Carapella, B. P. Nelson, R. S. Crandall, I. Balberg, J. Appl. Phys. 69, 6728 (1991).
- [37] H. Curtins, N. Wyrsh, A. V. Shah, Electron. Lett. 23, 228 (1987).
- [38] S. C. Moss, J. F. Graczyk, Phys. Rev. Lett. 23, 1167 (1969).
- [39] K. Laaziri, S. Kycia, S. Roorda, M. Chicoine, J. L. Robertson, J. Wang, S. C. Moss, Phys. Rev. Lett. 82, 3460 (1999).
- [40] K. Laaziri, S. Kycia, S. Roorda, M. Chicoine, J. L. Robertson, J. Wang, S. C. Moss, Phys. Rev. B 60, 13520 (1999).
- [41] M. L. Rudee, A. Howie, Phil. Mag. 25, 1001 (1972).
- [42] A. Howie, O. L. Krivanek, M. L. Rudee, Phil. Mag. 27, 235 (1973).
- [43] R. Grigorovici, J. Non-Cryst. Solids 1, 303 (1969).
- [44] D. E. Polk, J. Non-Cryst. Solids 5, 365 (1971).
- [45] D. A. Drabold, P. Biswas, D. Tafen, R. Atta-Fynn, in *Noncrystalline materials for Optoelectronics*, eds. G. Lucovsky, M. Popescu (INOE, Bucharest, Rumania 2004), p. 441.
- [46] N. Metropolis, A. Rosenbluth, M. Rosenbluth, A. Teller E. Teller, J. Chem. Phys. 21, 1087 (1953).
- [47] F. Wooten, K. Winer, D. Weaire, Phys. Rev. Lett. 54, 1392 (1985).
- [48] R. L. C. Vink, G. T. Barkema, M. A. Stijnman, R. H. Bisseling, Phys. Rev. B 64, 245214 (2001).
- [49] S. Nakhmanson, P. M. Voyles, N. Mousseau, G. T. Barkema, D. A. Drabold, Phys. Rev B 63, 235207 (2001).
- [50] N. Mousseau, L. J. Lewis, J. Non-Cryst. Solids 114, 202 (1989).
- [51] R. L. Mc Greevy, L. Pusztai, Mol. Simul. 1, 359 (1988).
- [52] R. L. Mc Greevy, J. Phys.: Condens. Matter 13, R877 (2001).
- [53] P. Biswas, R. Atta-Fynn, D. A. Drabold, Phys. Rev. B 69, 195207 (2004).
- [54] S. M. Nakhmanson, D. A. Drabold, J. Non-Cryst. Solids 266-269, 156 (2000).
- [55] S. M. Nakhmanson, D. A. Drabold, Phys. Rev. B 61, 5376 (2000).
- [56] P. Hohenberg, W. Kohn, Phys. Rev. B 136, 864 (1964).
- [57] R. Car, M. Parrinello, Phys. Rev. Lett. 55, 2471 (1985).

- [58] M. Ishimaru, J. Phys.: Condens. Matter 13, 4181 (2001).
- [59] F. Buda, G. L. Chiarotti, R. Car, M. Parrinello, Phys. Rev. B 44, 5908 (1991).
- [60] R. Atta-Fynn, P. Biswas, P. Ordejo'n, D. A. Drabold, Phys. Rev. B 69, 085207 (2004).
- [61] R. O. Jones, B. W. Clare, P. J. Jennings, Phys. Rev. B 64, 125203 (2001).
- [62] Y.-S. Su, S. T. Pantelides, Phys. Rev. Lett. 16, 165503 (2002).
- [63] P. A. Fedders, D. J. Leopold, P. H. Chan, R. Borzi, R. E. Norberg, Phys. Rev. Lett. 85, 401 (2000).
- [64] C. Kittel, *Introduction à la physique de l'état solide*, 7ème édition, (Dunod, Paris, 1998).
- [65] D. Weaire, M. F. Thorpe, Phys. Rev. B 4, 2508 (1971).
- [66] P. W. Anderson, Phys. Rev. 109, 1492 (1958).
- [67] N. F. Mott, Adv. Phys. 16, 49 (1967).
- [68] N. F. Mott, Phil. Mag. B 19, 835 (1969).
- [69] M. H. Cohen, H. Fritzsche, S. R. Ovshinsky, Phys. Rev. Lett. 22, 1065 (1969).
- [70] G. D. Cody, T. Tiedje, B. Abeles, B. Brooks, Y. Goldstein, Phys. Rev. Lett. 47, 1480 (1981).
- [71] J. Tauc, R. Grigorovici, A. Vancu, Phys. Stat. Sol. 15, 627 (1966).
- [72] G. D. Cody, B. Brooks, B. Abeles, Sol. Energy Mat. 4, 231 (1982).
- [73] K. Hammoudi-Fedala, *Simulation et modélisation de la méthode du photocourant constant (CPM) appliquée au silicium amorphe hydrogéné: étude de l'absorption optique*, Mémoire de Magister, U.S.T.H.B., Alger (2007).
- [74] E. A. Davis, N. F. Mott, Phil. Mag. 22, 903 (1970).
- [75] N. F. Mott, E. A. Davis, *Electronic Processes in Non-Crystalline Materials*, 2nd edition (Clarendon Press, Oxford, 1979).
- [76] N. F. Mott, E. A. Davis, R. A. Street, Phil. Mag. 32, 961 (1975).
- [77] P. W. Anderson, Phys. Rev. Lett. 34, 953 (1975).
- [78] M. A. Kastner, D. Adler, H. Fritzsche, Phys. Rev. Lett. 1504 (1976).
- [79] H. Dersch, J. Stuke, J. Beichler, Phys. Status Solidi B 105, 265 (1981).
- [80] M. Stutzmann, W. Jackson, Solid State Comm. 62, 153 (1987).

- [81] J. M. Holinder, G. J. Morgan, R. Jones, Phys. Rev. B 47, 3991 (1993).
- [82] N. Mousseau, G. T. Barkema, S. Nakhmanson, Phil. Mag. B 82, 171 (2002).
- [83] O. F. Sankey, D. A. Drabold, G. B. Adams, Bull. Am. Phys. Soc. 36, 924 (1991).
- [84] K. Winer, Phys. Rev. B 41, 12150 (1990).
- [85] G. Schumm, J. Non-Cryst. Solids 164-166, 317 (1993).
- [86] T. Tiedje, A. Rose, Solid St. Commun. 37, 49 (1980).
- [87] J. Orenstein, M. A. Kastner, Phys. Rev. Lett. 48, 1241 (1981).
- [88] H. Fritzsche, in *Physical Properties of Amorphous Materials*, eds. D. Adler, B. Schwartz, M. C. Steele (Plenum Press, New York, 1985), p. 313.
- [89] R. N. Hall, Phys. Rev. 87, 387 (1952).
- [90] W. Shockley, W. T. Read, Phys. Rev. 87, 835 (1952).
- [91] J. G. Simmons, G. W. Taylor, Phys. Rev. B 4, 502 (1971).
- [92] W. Shockley, J. T. Last, Phys. Rev. 107, 392 (1957).
- [93] E. I. Yoffa, D. Adler, Phys. Rev. B 12, 2260 (1975).
- [94] C. T. Sah, W. Shockley, Phys. Rev. 109, 1103 (1958).
- [95] G. W. Taylor, J. G. Simmons, J. of Non Cryst. Solids 8-10, 940 (1972).
- [96] R. A. Street, Appl. Phys. Lett. 41, 1060 (1982).
- [97] W. E. Spear, H. L. Steemers, P. G. LeComber, R. A. Gibson, Phil. Mag. B 50, 133 (1984).
- [98] F. Vaillant, D. Jousse, Phys. Rev. B 34, 4088 (1986).
- [99] T. Tiedje, B. Abeles, J. M. Cebulka, Solid State Comm. 47, 493 (1983).
- [100] H. Okushi, T. Takahama, Y. Tokumaru, S. Yamasaki, H. Oheda, K. Tanaka, Phys. Rev. B 27, 5184 (1983).
- [101] T. Smaïl, *Photoconductivité et recombinaison dans le silicium amorphe hydrogéné*, Thèse de Magister, U.S.T.H.B., Alger (1991).
- [102] D. T. Stevenson, R. J. Keyes, J. Appl. Phys. 26, 190 (1955).
- [103] R. H. Bube, Photoconductivity of Solids (John Wiley & Sons, New York, U.S.A, 1960).
- [104] J. M. Hvam, M. H. Brodsky, Phys. Rev. Lett. 46, 371 (1981).

- [105] R. Pandya, E. A. Schiff. J. Non-Cryst. Solid 66, 193 (1984).
- [106] H. Oheda, Phil. Mag. B 52, 857 (1985).
- [107] L. Aïnouche, *Détermination de la densité d'états localisés par les techniques du photocourant modulé et du transitoire du photocourant dans le silicium amorphe hydrogéné déposé par pulvérisation DC magnétron*, Thèse de Magister, U.S.T.H.B., Alger (2003).
- [108] T. Tiedje, in *Semiconductors and Semimetals Vol. 21, Part C*, ed. J. I. Pankove (Academic Press, Orlando, 1984), p. 207.
- [109] J. M. Marshall, P. G. Le Comber, W. E. Spear, Solid State Commun. 54, 11 (1985).
- [110] D. M. Goldie, J. Non-Cryst. Solids 353, 130 (2007).
- [111] C. Main, R. Brüggemann, D. P. Webb, S. Reynolds, J. Non-Cryst. Solids 164-166, 481 (1993).
- [112] S. Reynolds, V. Smirnov, C. Main, R. Carius, F. Finger, Mat. Res. Soc. Symp. Proc. 715, A21.2.1 (2002).
- [113] F. W. Schmidlin, Phys. Rev. B16, 2362 (1977).
- [114] J. Orenstein, M. A. Kastner, V. Vaninov, Phys. Rev. Lett. 46, 1421 (1981).
- [115] G. J. Adriaenssens, S. D. Baranovskii, W. Fuhs, J. Jansen, Ö. Öktü, Phys. Rev. B 51, 9661 (1995).
- [116] C. Main, R. Brüggemann, D. P. Webb, S. Reynolds, Solid State Commun. 83, 401 (1992).
- [117] H. Naito, J. Ding, M. Okuda, Appl. Phys. Lett. 64, 1830 (1994).
- [118] N. Ogawa, T. Nagase, H. Naito, J. Non-Cryst. Solids 266-269, 367 (2000).
- [119] C. Main, J. Berkin, A. Merazga, in *New Physical Scientific Problems in Electronic Materials*, eds. M. Borisov, N. Kirov, J. M. Marshall, A. Vavrek (World Scientific, Singapore, 1991), p. 55.
- [120] E. Bassanese, J. Furlan, J. phys. chem. solids 56, 1201 (1995).
- [121] A. Allag, T. Smaïl, M. Aoucher, J. Non-Cryst. Solids 352, 1184 (2006).
- [122] N. Bakhvalov, *Méthodes numériques* (Editions Mir, Moscou, 1976).
- [123] B. Démidovitch, I. Maron, *Eléments de calcul numérique* (Editions Mir, Moscou, 1979).
- [124] T. Smaïl, T. Mohammed-Brahim, Phil. Mag. B 64, 675 (1991).
- [125] A. Allag, *Simulation numérique des phénomènes transitoires d'une structure métal/semiconducteur à base de silicium amorphe hydrogéné*, Thèse de Magister, U.S.T.H.B., Alger (2004).

- [126] R. R. Haering, E. N. Adams, Phys. Rev. 117, 451 (1960).
- [127] T. Mohammed-Brahim, *Etude des niveaux d'énergie profonds dans l'iodure mercurique - Application à la détection nucléaire*, Thèse de Doctorat ès sciences Physiques, Université de Paris-Sud, Paris (1982).
- [128] A. Rahal, *Etude du silicium amorphe hydrogéné sur structure Schottky*, Thèse de Magister, U.S.T.H.B., Alger (1988).
- [129] L. Vieux-Rochas, A. Chenevas-Paule, J. Non-Cryst. Solids 35-36, 737 (1980).
- [130] W. Fuhs, M. Milleville, Phys. Status Solidi B 98, K29 (1980).
- [131] M. Yamaguchi, J. Non-Cryst. Solids 59-60, 425 (1983).
- [132] J. Dijon, Solid State Commun. 48, 79 (1983).
- [133] D. S. Misra, A. Kumar, S. C. Agarwal, Phys. Rev. B 31, 1047 (1985).
- [134] H. Fritzsche, N. Ibaraki, Phil. Mag. B 52, 299 (1985).
- [135] M. Aoucher, T. Mohammed-Brahim, B. Fortin, J. Appl. Phys. 79, 7041 (1996).
- [136] H. Hamdi, A. Deneuville, E. Bustarret, J. Non-Cryst. Solids 77-78, 683 (1985).
- [137] B. Hadj-Arab, *Courant thermiquement stimulé et photoconductivité dans le silicium amorphe hydrogéné*, Thèse de Magister, U.S.T.H.B., Alger (1988).
- [138] A. Chenevas-Paule, J. Dijon, J. Phys., Paris, C4-605 (1981).
- [139] J. G. Simmons, G. W. Taylor, M. C. Tam, Phys. Rev. B 7, 3714 (1973).
- [140] C. Longeaud, J. P. Kleider, D. Mencaraglia, T. Mohammed-Brahim, A. Rahal, in *Amorphous Silicon Technology*, MRS Symposia Proceedings No. 192, eds. P. C. Taylor, M. J. Thomson, P. G. LeComber, Y. Yamakawa, A. Madan, (Material Research Society, Pittsburgh, 1990), p. 311.
- [141] M. Zhu, H. Fritzsche, Phil. Mag. B 53, 41 (1986).
- [142] G. Landweer, R. Schreutelkamp, H. Simons, J. Bezemer, W. F. van der Weg, J. Non-Cryst. Solids 97-98, 711 (1987).
- [143] G. Landweer, J. Bezemer, in *Amorphous Silicon and Related Materials Vol. A*, ed. H. Fritzsche (World Scientific, Singapore, 1988), p. 525.
- [144] K. B. Lee, K. H. Lee, J. Non-Cryst. Solids 181, 116 (1995).
- [145] V. Karoutsos, K. Pomoni, A. Vomvas, J. Sotiropoulos, Phys. Status Solidi B 199, 127 (1997).
- [146] B. Gu, Z. Xu, B. Dong, J. Non-Cryst. Solids 97-98, 479 (1987).

- [147] J-H. Zhou, S. R. Elliott, Phys. Rev. B 46, 9792 (1992).
- [148] S. D. Baranovskii, M. Zhu, T. Faber, F. Hensel, P. Thomas, M. B. von der Linden, W. F. van der Weg, Phys. Rev. B 55, 16226 (1997).
- [149] T. Smaïl, M. Aoucher, T. Mohammed-Brahim, J. Non-Cryst. Solids 266-269, 376 (2000).
- [150] J. A. Schmidt, R. R. Koropecski, R. Arce, A. Dussan, R. H. Buitrago, J. Non-Cryst. Solids 338-340, 322 (2004).
- [151] N. Souffi, G. H. Bauer, R. Brüggemann, J. Non-Cryst. Solids 352, 1109 (2006).
- [152] A. Rose, *Concepts in Photoconductivity and Allied Problems* (Interscience, New York, 1963).

Publications relatives à cette thèse

T. Smaïl, T. Mohammed-Brahim, "Temperature dependence of steady state photoconductivity in hydrogenated amorphous silicon", Philosophical Magazine B 64, 675 (1991).

T. Smaïl, M. Aoucher, T. Mohammed-Brahim, "Numerical simulation of low-field thermally stimulated conductivity in a-Si:H", Journal of Non-Crystalline Solids 266-269, 376 (2000).

T. Smaïl, M. Aoucher, T. Mohammed-Brahim, "La Conductivité Thermiquement Stimulée et l'occupation des Etats Localisés dans Le Silicium Amorphe Hydrogène", Rev. Energ. Ren. :ICPWE, 87 (2003).

A. Allag, **T. Smaïl**, M. Aoucher, "Numerical simulation of a low- and a high-electric-field photocurrent decay in a-Si:H", Journal of Non-Crystalline Solids 352, 1184 (2006).

Autres publications

T. Smaïl, T. Mohammed-Brahim, "Characterization of the recombination processes of hydrogenated amorphous silicon by steady state photoconductivity", Proceedings of the 11th European Photovoltaic Solar Energy Conference and Exhibition, Montreux (Switzerland) 699-702 (1992).

N. Beldi, J. Sib, L. Chahed, **T. Smaïl**, T. Mohammed-Brahim, Z. Djebbour, J.P. Kleider, "Optimisation of the hydrogen content in a-Si:H deposited at high rate by dc magnetron sputtering", C. Longeaud, D. Mencaraglia, Journal of Non-Crystalline Solids 164-166, 309 (1993).

K. Mokeddem, M. Aoucher, **T. Smaïl**, "Hydrogenated amorphous silicon nitride deposited by DC magnetron sputtering", Superlattices and Microstructures 40, 598 (2006).