

UNIVERSITE DE NEUCHATEL

INSTITUT DE MICROTECHNIQUE

**Effets des Etats Localisés du Silicium
Amorphe Hydrogéné sur le transport
électronique**

THESE

Présentée à la Faculté des Sciences

pour obtenir le grade de docteur ès science

par

Jacques Hubin

IMPRIMATUR POUR LA THÈSE

Effets des états localisés du silicium amorphe
hydrogéné sur le transport électronique

de Monsieur Jacques Hubin

UNIVERSITÉ DE NEUCHÂTEL

FACULTÉ DES SCIENCES

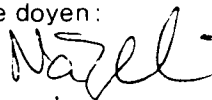
La Faculté des sciences de l'Université de Neuchâtel
sur le rapport des membres du jury,

Messieurs A. Shah, H. Beck, J.-D. Chatelain
(Yverdon) et P. Thomas (Marburg)

autorise l'impression de la présente thèse.

Neuchâtel, le 11 février 1994

Le doyen :



H.-H. Nägeli

Table des matières

Traduction "French-English" of some terms	1
A. Introduction	3
B.. Modèle de la recombinaison et des charges électriques dans les états localisés	8
B.1. Densité des états électroniques du silicium amorphe hydrogéné. Notions de base.	9
B.1.1. Effet de l'ordre et du désordre: bandes de valence et de conduction, queues de bandes et liaisons pendantes.	9
B.1.2. Description de la DOS du a-Si:H : états localisés et états délocalisés, leurs conditions de charge, valeurs numériques typiques.	11
B.2. Transitions entre les différents niveaux d'énergie de la DOS du a-Si:H.	19
B.2.1. Transitions admises pour le modèle	19
B.2.2. Niveaux de démarcation dans les états localisés: une séparation entre centres de recombinaison et pièges. Fonctions d'occupations des pièges. Classification pour le a-Si:H.	21
B.3. Fonctions de recombinaison et expressions des charges électriques pour les états localisés	43
B.3.1. Centres de recombinaison par les liaisons pendantes	43
B.3.2. Tableau (B.7) des situations "remarquables" des résultats pour les liaisons pendantes et comparaison avec la théorie de Schockley-Read-Hall (SRH)	50
B.3.3. Centres de recombinaison des queues de bande	56
B.3.4. Pièges des queues de bande et Tableau résumé B.8	60

C.. Application au transport électronique à température ambiante, en condition stationnaire et sous illumination	64
C.1. Equations de base admises pour le transport	64
C.2. Théorie du transport petit-signal non-uniforme avec grand-signal uniforme	67
C.2.1. Equations du transport petit signal:linéarisation	67
C.2.2. Solution homogène et modes (vecteurs propres): les modes ambipolaire et de relaxation diélectrique en cas de diffusion et en cas de dérive: condition d'existence de ces deux modes	76
C.2.3. Solution à une excitation particulière: conditions de mesure du mode ambipolaire	86
C.3. Caractérisation du a-Si:H par les mesures petit signal et grand signal (produits $\mu\tau$) et vérification du modèle	94
C.3.1. Photoconductivité (σ_{phot}) et longueur de diffusion ambipolaire (L_{amb}) en termes de porteurs libres. Equations de base pour déduire, de σ_{phot} et de L_{amb} , les paramètres du matériau.	96
C.3.2. Produits $\mu\tau$ caractérisant la qualité du matériau et produits "mobilité \times temps de recombinaison"	100
C.3.3. Prédiction théorique des lois de puissances de L_{amb}^2 , de σ_{phot} et de N_p/P_f avec G_0 , ainsi que des dépendances avec la dégradation, selon les différents cas (microdopé P, compensé, intrinsèque, microdopé N).	104
C.3.4. Résumé des mesures et comparaison avec les prédictions théoriques: justification du modèle de la recombinaison par les liaisons pendantes avec trois conditions d'occupation et incompatibilité avec le modèle de la recombinaison par des états avec deux conditions d'occupation (théorie SRH)	120
C.3.5. Discussion des informations sur le matériau déduites des mesures de photoconductivité et de transport ambipolaire.	131

C.4 Cellule solaire p-i-n en mode de détecteur	134
C.4.1 Principe de fonctionnement, paramètres limitant la collection, et calcul de première approximation des densités des porteurs libres.	134
C.4.2 Déformation du champ électrique, dans la région intrinsèque, due à la charge des états localisés.	139
C.4.3 Influence de la recombinaison par les états des liaisons pendantes sur la collection: produits mt caractérisant la collection (cellule en mode de détecteur). Incompatibilité avec la théorie SRH.	148
C.4.4 Discussion sur les mesures de produits $\mu\tau$ pour caractériser la collection	156

D. Conclusions **158**

Références **165**

Liste des symboles **168**

Traduction “French-English” of some terms

“seuils de mobilité” ≡ “mobility edges”

“Liaisons pendantes” ≡ “Dangling bonds”

“Queue de bande de conduction” ≡ “Band Tail of conduction”

“Queue de bande de valence” ≡ “Band Tail of valence”

“Pièges” ≡ “Traps”

“niveaux de démarcation” ≡ “demarcation levels”

“quasi-niveaux de Fermi pour pièges” ≡ “quasi-Fermi levels for Traps”

“électrons libres” ≡ “free electrons”

“trous libres” ≡ “free holes”

“porteurs libres” ≡ “free carriers”

A. Introduction

La physique des semiconducteurs cristallins, développée depuis déjà plusieurs dizaines d'années, est actuellement bien connue. Elle a été appliquée avec succès pour réaliser différents dispositifs électroniques bien connus tels que la diode à jonction, les transistors bipolaires et à effet de champ, etc... La microélectronique est le champ par excellence d'application des dispositifs en silicium cristallin. Depuis quelques années, on réalise des dispositifs électroniques avec des semiconducteurs amorphes, l'intérêt étant la macroélectronique (le besoin de grandes surfaces, par exemple pour les écrans plats, les détecteurs et les cellules solaires) et la faible quantité d'énergie nécessaire à la fabrication du matériau (comparativement à la quantité d'énergie nécessaire à la fabrication du silicium cristallin).

La physique des semiconducteurs amorphes utilise des notions bien établies de la physique des solides cristallins, telle que la **densité des états électroniques (DOS)**. La mécanique quantique, appliquée aux solides cristallins, permet d'obtenir par un calcul théorique une densité des états électroniques très significative et correspondante à celle mesurée: cette théorie est le **modèle des bandes d'énergies**, elle se base sur un potentiel périodique pour un **cristal parfait**. Lorsque la structure du solide est **amorphe**, il devient très difficile de calculer une densité des états: je me base pour mon travail sur une densité mesurée des états. Il est toutefois possible de comprendre théoriquement les caractéristiques de la densité mesurée des états du silicium amorphe, en introduisant des déviations du cristal parfait (voir Anderson (1958), Mott et Davis (1979), Overhof et Thomas (1989) et paragraphe B.1.1).

La caractéristique essentielle pour la densité des états du silicium amorphe par rapport à la densité des états du silicium cristallin est l'apparition d'une densité continue d'états permis dans la bande interdite (le gap) séparant la bande de conduction de la bande de valence (voir récemment Overhof et Thomas (1989), et moins récemment Mott et Davis (1979), Mott (1970), Street et Mott (1975), Stutzmann, Stuke et Dersch (1983), Cohen, Lang et Harbison (1980)).

On distingue pour la DOS du silicium amorphe hydrogéné les états localisés des états délocalisés. Je distinguerai pour mon travail les états localisés des états délocalisés selon que la mobilité associée à ces états soit admise nulle ou non nulle :

- les **états délocalisés** sont formés par la bande de conduction et la bande de valence. On admet une **mobilité non nulle** pour les porteurs dans ces deux bandes et on considère que seulement ces porteurs forment par leurs mouvements d'ensemble le transport électronique.
- les **états localisés** sont formés par la densité continue des états permis dans la bande interdite d'origine (par contraste avec le cas du semiconducteur parfaitement cristallin où la bande interdite ne possède aucun état permis!). Ces états sont dits "localisés" par le fait que l'on admet **une mobilité nulle** pour les porteurs capturés dans ces états et donc que ces porteurs ne participent pas directement au transport électronique. En réalité un transport électronique par les états localisés existe et se fait par des effets tunnels (en anglais "Hopping transport"), mais le rapport $\frac{\text{transport par états localisés}}{\text{transport par états délocalisés}}$ est faible à température ambiante (alors qu'il est important à basse température). Donc la distinction entre états localisés et états délocalisés telle que je l'utiliserai est valable à température ambiante.

Il est inadéquat de parler de bande interdite pour un semiconducteur amorphe. J'utiliserai donc le terme de "gap" pour désigner l'intervalle d'énergie où se situent les états localisés. Comme ce gap se définit par les états pour lesquels on admet une mobilité nulle, on dit que c'est un **gap de mobilité**.

C'est par l'important effet des états du gap que la théorie du transport électronique pour le silicium amorphe se distingue de la théorie du transport pour le silicium cristallin. A température ambiante, en condition stationnaire et sous illumination, l'influence de ces états sur le transport se résume pour mon travail par:

- Les porteurs capturés dans les états localisés ont une forte influence sur le champ électrique (par la charge électrique qu'ils constituent).
- Les états localisés, essentiellement ceux de la région centrale du gap, sont des centres pour la recombinaison des paires électrons-trous. La recombinaison par ces centres domine fortement sur les autres mécanismes de recombinaison (tant est importante la densité des états localisés du silicium amorphe).

(En dehors des conditions mentionnées ci-dessus, l'influence de ces états peut être bien plus complexe.)

Mon travail intéresse essentiellement l'effet des états localisés du silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) sur le transport électronique à température ambiante, en condition stationnaire et sous illumination.

Il est essentiel de tenir compte de l'effet des états localisés pour interpréter les mesures de transport faites pour caractériser le silicium amorphe (voir Rose (1963), Mott et Davis (1979), Overhof et Thomas (1989), Vaillant, Jousse et Bruyere (1988), Morgado (1991)).

Le lien entre la dégradation d'une couche uniforme en a-Si:H, après exposition à la lumière (effet Staebler-Wronsky (1980)), et l'augmentation de la densité de centres de recombinaison est bien établi actuellement. On pense que la dégradation d'une cellule solaire, après exposition à la lumière, est liée au même phénomène, bien qu'il n'en existe actuellement pas encore de preuve véritable. Je considérerais, pour mon travail, que la recombinaison par les états localisés du gap est un des facteurs principaux de limitation de l'efficacité des dispositifs en a-Si:H tels que les cellules solaires (recombinaison des porteurs photogénérés)

Shockley et Read (1952), et Hall (1952) ont déjà développé une théorie de la recombinaison par état localisé dans le gap de silicium cristallin, en admettant seulement deux conditions d'occupation (inoccupé et occupé) pour ces états (théorie classique SRH). Les trois conditions d'occupation (inoccupé, une fois occupé et doublement occupé) des états localisés du a-Si:H sont considérées par bien des auteurs, particulièrement pour les états dits "liaisons pendantes" (en anglais "dangling bonds"), par exemple par Street et Mott (1975), Mott et Davis (1979), et plus récemment qu'il faut tenir compte de la double occupation pour interpréter le transport électronique dans le a-Si Morgado (1991), Vaillant, Jousse et Bruyere (1988), et Hubin, Shah et Sauvain (1992). On verra dans le chapitre B.3 que la théorie de la recombinaison pour états avec trois conditions d'occupation est significativement différente de la théorie SRH. On verra dans le chapitre C.3 que la théorie pour états avec trois conditions d'occupation est nécessaire pour expliquer les mesures de matériau en a-Si:H, alors que la théorie SRH est insuffisante pour expliquer ces mesures. Finalement, je montrerai le caractère opposé, et donc incompatible, de la théorie de la recombinaison pour états avec trois conditions d'occupation avec la théorie SRH concernant les conclusions pour la collection d'une cellule solaire dans le chapitre C.4

Différents auteurs comme Vaillant et Jousse (1986), Vaillant, Jousse et Bruyere (1988), Main, Berkin et Merazga (1991), Stutzmann, Jackson et Tsai (1985), et Morgado (1991) ont traité de la cinétique des captures et des réémissions thermiques de porteurs libres par des états avec trois conditions d'occupation, mais ces derniers, n'ayant pas fait ou osé faire des simplifications telles que le permet la distinction entre centres de recombinaison et pièges, introduite par Rose (1963) et développée plus formellement par Simmons et Taylor (1971), ont obtenu des expressions très lourdes et donc inutilisables pour faire du traitement par voie analytique des dispositifs en a-Si:H. Seul un traitement numérique peut utiliser de telles expressions. Certains de ces traitements numériques, de certains des

différents auteurs, sont relativement complets quand à tenir compte de tous les paramètres du matériau, permettent de faire des simulations précises et pour des conditions de travail (illumination, dégradation, température, etc..) larges, mais les résultats sont très relatifs aux valeurs numériques utilisées des paramètres et sont souvent difficiles à interpréter par des images physiques simples.

La division de la densité des états localisés en zones de centres de recombinaison et en zones de pièges (niveaux de démarcation) permet d'établir des simplifications, appropriées à chaque zone, et ainsi d'obtenir des expressions plus simplement lisibles et plus appropriées pour une analyse par voie qualitative des dispositifs en silicium amorphe. L'originalité de mon travail est d'avoir, par les différentes simplifications qui seront présentées dans les chapitres suivants, pu faire un traitement purement analytique (et non pas numérique), obtenir des expressions algébriques simples, certes restreintes à des conditions particulières de travail, mais permettant de prescrire des conditions de travail à l'expérimentateur pour interpréter et déduire de ces mesures certains paramètres importants du matériau (essentiellement les paramètres des liaisons pendantes, voir chapitres B.3 et C.3)).

Simmons et Taylor (1971) ont formellement établi cette division en zone de centres de recombinaison et en zones de pièges pour une distribution continue d'états localisés, mais ne possédant que deux conditions d'occupation. J'apporte une image physique directe de la distinction en zones du travail de Simmons et Taylor, et je fais une adaptation à la distribution continue d'états localisés du silicium amorphe possédant trois conditions d'occupation (voir paragraphe B.2.2).

Dans la partie B, appliquant la division de la densité des états localisés en zone de recombinaison et en zones de pièges, je construis un modèle pour les centres de recombinaison, ainsi qu'un modèle des charges électriques pour ces mêmes centres (voir Hubin, Shah et Sauvain (1992), et Shah, Hubin et Sauvain (1992)). J'établis également un modèle des charges électriques pour les pièges.

Dans la partie C, j'applique le modèle de la partie B au transport électronique, particulièrement à l'interprétation des mesures de photoconductivité et de transport ambipolaire: les **produits mobilité \times temps de recombinaison** (produits- $\mu\tau$) **des porteurs majoritaires et minoritaires**. Ces mesures ont pour but de caractériser le matériau. Ensuite, j'applique le modèle aux **cellules solaires p-i-n** en mode de détecteur. Je discute finalement le problème de la caractérisation des cellules solaires par des mesures de transport (mesure de produit- $\mu\tau$).

Les mesures systématiques de photoconductivité et du transport ambipolaire, effectuées par E.Sauvain (1992) (thèse de doctorat), pour des couches en a-Si:H intrinsèques et microdopées, constituent une bonne vérification expérimentale du modèle que je présente

(chapitre C.3). Les couches en a-Si:H, pour les mesures, ont été déposées par la méthode VHF-GD à l'institut de Microtechnique de Neuchatel.

B. Modèle de la recombinaison et des charges électriques dans les états localisés

Les notions de base pour la construction du modèle sont données dans le **chapitre B.1**, à voir la description de la DOS du a-Si:H: queues de bandes de conduction et de valence, états des liaisons pendantes, états localisés et délocalisés (gap de mobilité), conditions d'occupation des états localisés (Tableau B.1), valeurs numériques typiques (figure B.2). Dans le **chapitre B.2**, je présente les différentes transitions, admises pour le modèle, de porteurs entre les états localisés et les états délocalisés (Tableau B.2). Ces transitions sont le mécanisme de la constitution d'une charge électrique et de la recombinaison dans les états localisés (par les captures et réémissions des porteurs photogénérés). Une distinction très importante entre centres de recombinaison et pièges repose sur la notion de niveaux de démarcation (Tableau B.3): je donne une image physique directe de la distinction et j'applique ces concepts à la densité des états localisés du a-Si:H (classification des centres de recombinaison et pièges du a-Si:H : tableau B.4).

Dans le **chapitre B.3**, en exprimant l'équilibre stationnaire pour les transitions entre les états délocalisés et ceux localisés, j'obtiens des expressions algébriques pour les différentes contributions des états localisés à la recombinaison et à la charge électrique totale (Tableau B.7 pour les centres de recombinaison par les liaisons pendantes et Tableau B.8 pour les pièges).

B.1. Densité des états électroniques du silicium amorphe hydrogéné. Notions de base.

B.1.1. Effet de l'ordre et du désordre: bandes de valence et de conduction, queues de bandes et liaisons pendantes.

La mécanique quantique permet de prédire l'organisation des électrons d'un cristal parfait en bandes d'énergies permises, lesquelles sont séparées entre elles par des bandes d'énergies interdites. Ce résultat est obtenu en résolvant l'équation de Schrödinger pour un potentiel périodique: la périodicité du potentiel est donnée par la structure du cristal. Les différentes bandes d'énergies correspondent à de différents degrés d'attachement des électrons aux atomes du réseau. Je rappelle trois bandes d'énergies particulières pour un semiconducteur cristallin:

- la **bande de valence**: formée par des états des électrons encore attachés aux atomes, mais se trouvant au niveau des orbitales de liaison (dite de "valence").
- la bande d'énergies permises directement supérieure à la bande de valence est la **bande de conduction**. Elle correspond aux états des électrons libérés des orbitales de liaisons.
- la bande d'énergies interdites séparant la bande de valence de celle de conduction. On l'appelle le **gap**. Le gap d'un solide parfaitement cristallin est vide de tout état permis.

La **structure du a-Si:H** utilisée dans la technologie électronique, est celle d'un **ordre à court terme**. C'est par cet ordre à court terme que l'on retrouve, similairement au cas cristallin, une bande de valence (avec la notion de trous mobiles) et une bande de conduction (électrons mobiles). Toutefois, contrairement au cas cristallin, le gap est rempli par une distribution continue d'états permis comme représenté à la figure B.1 (et à la figure B.2) du paragraphe B.1.2

Cette distribution continue d'états dans le gap s'explique comme l'effet du désordre. Une illustration théorique de ce qui arrive à la DOS, lorsque l'on introduit un facteur désordre à un cristal parfait, a été faite par Anderson (1958). Ce dernier a résolu l'équation de Schrödinger pour une structure périodique, mais dont les valeurs du potentiel sont prises

aléatoirement de période en période . Le résultat a été l'apparition dans le gap de queues aux bandes de conduction et de valence. Ces queues sont des états localisés (localisation d'Anderson voir Overhof et Thomas (1989))

La situation réelle dans un semiconducteur amorphe est différente de celle du calcul d'Anderson, toutefois on peut comprendre la DOS de la figure B.1 (et de la figure B.2) en considérant le semiconducteur amorphe comme un cristal distordu. Distinguons deux effets de la distorsion des liaisons entre atomes de silicium:

- les queues aux bandes de conduction et de valence (voir figure B.1).
Les états de la **queue de bande de valence** correspondent aux états des électrons des orbitales liantes des liaisons tordues, mais non brisées.
Les états de la **queue de bande de conduction** correspondent aux états des électrons des orbitales antiliantes des liaisons tordues, mais non brisées.
- certaines liaisons entre atomes de silicium vont se briser: ce sont les **liaisons pendantes**. L'ensemble des cassures des liaisons, aura pour conséquence la distribution au centre du gap dite "densité des états des liaisons pendantes" (voir figure B.1).

On trouvera dans Mott (1970), Street et Mott (1975), Mott et Davis (1979), Cohen, Lang et Harbison (1980), et Stutzmann, Stuke et Dersch (1983) les justifications expérimentales et théoriques de cette représentation de la DOS du a-Si:H (voir aussi Vaillant, Jousse et Bruyere (1988), et Morgado (1991)).

B.1.2. Description de la DOS du a-Si:H : états localisés et états délocalisés, leurs conditions de charge, valeurs numériques typiques.

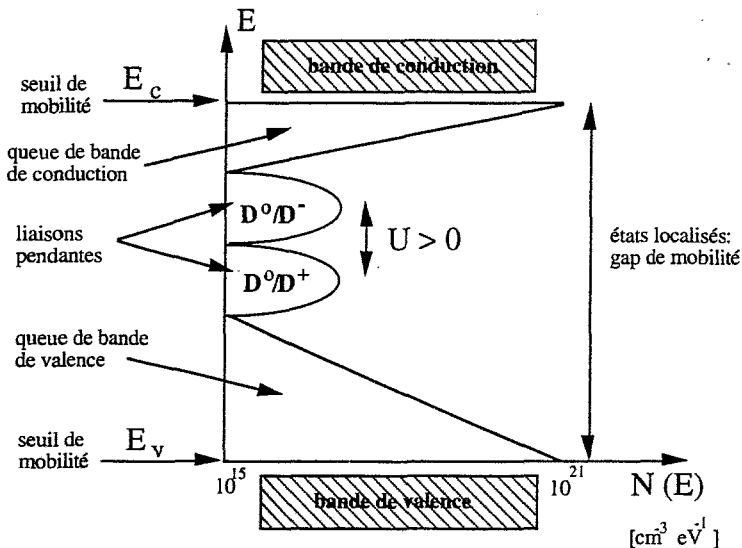


Figure B.1: représentation schématique de la DOS du a-Si:H. $N(E)$ est la densité des états, E est le niveau d'énergie, E_c et E_v sont les seuils de mobilité définissant le gap de mobilité. On distingue pour les états du gap de mobilité les queues de bande et les états des liaisons pendantes. Les bandes de valence et de conduction sont représentées très symboliquement. La Figure est expliquée tout au long du paragraphe.

Distinction entre états localisés et délocalisés (à température ambiante):

A température ambiante, les états des queues de bandes de valence et de conduction, ainsi que ceux des liaisons pendantes sont associés à de faibles mobilités comparativement aux mobilités associées aux bandes de conduction et de valence.

Par une idéalisation, on définit des seuils de mobilité (E_v et E_c): on admettra que la mobilité est nulle dans l'intervalle entre E_v et E_c , non nulle et constante en dehors de cet intervalle.

- Les **états localisés** sont constitués par ceux pour lesquels on admet une **mobilité nulle**, donc situés dans l'intervalle des seuils de mobilité $[E_v, E_c]$. On appelle **gap de mobilité** l'intervalle d'énergie des états localisés. Les états localisés sont constitués par les queues de bande de conduction et de valence, ainsi que des états des liaisons pendantes.
- Les **états délocalisés** sont constitués par ceux pour lesquels on admet une **mobilité non nulle**, donc situés en dehors de l'intervalle des seuils de mobilité $[E_v, E_c]$.

Pour $E > E_c$: bande de conduction avec pour mobilité: μ_n^0

Pour $E < E_v$: bande de valence avec pour mobilité: μ_p^0

Les porteurs dans ces deux bandes sont appelés **porteurs libres**

bande de conduction: électrons libres

bande de valence: trous libres

Remarques:

- On trouve dans Mott (1967), et Cohen, Fritzsche et Ovshinsky (1969) l'introduction au modèle des seuils de mobilité pour les matériaux amorphes, une étude plus détaillée dans Mott et Davis (1979), et un traitement plus récent sur le phénomène de localisation d'Anderson dans Overhof et Thomas (1989)
- Vaillant, Jousse et Bruyere (1988) cite Street (1980) pour admettre que la photoconduction dans une gamme de température allant de 100° K à 350° K est essentiellement due aux porteurs libres
- Une conduction par les porteurs capturés dans les états localisés s'explique par des effets tunnels ("Hopping transport", voir récemment Overhof et Thomas (1989)).
- Le rapport $\frac{\text{transport par états localisés}}{\text{transport par états délocalisés}}$ est faible à température ambiante (alors qu'il est plus important à basse température). Donc il est correct, à température ambiante, de ne considérer que le transport par les porteurs libres. Cette simplification est d'autant plus justifiée par la condition d'illumination du matériau, c'est à dire avec une importante photogénération de porteurs libres.

Conditions d'occupation des états localisés:

Par le principe d'exclusion de Pauli, un état quantique n'a que deux conditions d'occupation: inoccupé ou occupé par un seul électron. J'admetts la représentation plus compacte suivante, à savoir qu'un état de la DOS a trois conditions d'occupation: inoccupé, occupé par un électron et occupé par deux électrons (de spins opposés pour respecter le principe d'exclusion de Pauli). Un état des liaisons pendants doublement occupé a une énergie décalée par rapport à l'énergie du même état simplement occupé. La différence d'énergie est l'énergie de corrélation U entre les deux électrons (voir figure B.1 et tableau B.1). L'énergie de corrélation pour les liaisons tordues liantes et antiliantes (queues de bandes de valence et conduction) est admise nulle . Donc les trois conditions d'occupation pour un état des queues de bandes se représentent au même niveau d'énergie. Overhof et Thomas (1989) admettent $U=0$ pour les queues de bandes et $U=0.3$ eV pour les liaisons pendants du a-Si:H.

Une liaison liante entre deux atomes de Si est neutre lorsqu'elle est occupée par deux électrons, alors qu'une liaison antiliante entre les deux atomes est neutre lorsqu'elle est vide d'électrons. Une liaison brisée est neutre lorsqu'elle est occupée par un électron.

Voir Tableau page suivante.

Tableau B.1: conditions de charge des états localisés

<u>Un état de la queue de bande de valence</u> (liaisons liantes tordues mais non brisées):	
- neutre (B_h^0):	la liaison liante possède ses deux électrons
- une fois positive (B_h^+):	la liaison liante a perdu un électron
- deux fois positive (B_h^{++}):	la liaison liante a perdu ses deux électrons
énergie de corrélation nulle: B_h^0 , B_h^+ et B_h^{++} se représentent au même niveau d'énergie	
<u>Un états de la queue de bande de conduction</u> (liaisons antiliantes tordues mais non brisées):	
- neutre (B_c^0):	la liaison antiliante est vide d'électrons
- une fois négative (B_c^-):	la liaison antiliante est occupé par un électron
- deux fois négative (B_c^{--}):	la liaison antiliante est occupé par deux électrons
énergie de corrélation nulle: B_c^0 , B_c^- et B_c^{--} se représentent au même niveau d'énergie	
<u>Un état des liaisons pendantes</u> (liaison brisée) :	
- positive (D^+):	la liaison brisée est vide d'électrons
- neutre (D^0):	la liaison brisée est occupée par un électron
- négative (D^-):	la liaison brisée est occupée par deux électrons
énergie de corrélation non nulle: D^- se représente à une énergie décalée de U par rapport au niveau des D^0 et D^+	

Remarques:

- On trouvera dans Street et Mott (1975) la mise en évidence des trois conditions d'occupation des états des liaisons pendantes. On trouvera, par exemple, dans Mott et Davis (1979), Morgado (1991), Vaillant et Jousse (1986), Hubin, Shah et Sauvain (1992), et Kocka, Nebel et Abel (1991) des études des propriétés du a-Si:H en considérant les trois conditions d'occupation des liaisons pendantes.

- Une énergie de corrélation significativement non nulle pour des états localisés peut être montrée (Anderson (1975)).
- Street et Biegelsen (1980), Dersch, Stuke et Beichler (1981), et Vardeny et Tauc (1985) discutent et montrent que l'énergie de corrélation est significativement non nulle pour les états des liaisons pendantes: $U > 0$ (a-Si:H) et $U < 0$ (chalcogénides).
- L'importance de tenir compte de U significativement non nulle pour obtenir la hiérarchie des section efficaces de capture des états des liaisons pendantes (paragraphe B.3.2, Eq.(B.33)) sera vérifiée aux paragraphes C.3.4 et C.3.5.
- On verra dans le paragraphe B.2.2 que la double occupation est négligeable pour les pièges dans les queues de bande.

Formes de la densité des états:

- la densité de la queue de bande de valence est exponentielle:

$$N_{VBT}(E) = N_{vbt} \exp\left(\frac{E_v - E}{E_v^0}\right) \quad (B.1)$$

- la densité de la queue de bande de conduction est exponentielle:

$$N_{CBT}(E) = N_{cvt} \exp\left(\frac{E - E_c}{E_c^0}\right) \quad (B.2)$$

E_c^0 et E_v^0 sont les énergies caractéristiques des queues de bandes, $N_{cvt} = N_{CBT}(E=E_c)$ et $N_{vbt} = N_{VBT}(E=E_v)$.

- la forme de la densité des états des liaisons pendantes ne jouera pas de rôle dans le modèle, seule la densité volumique totale (N_{DB}) de ces états interviendra dans les résultats (voir paragraphe B.3.1). Elle est représentée sous la forme de deux bosses séparées par l'énergie de corrélation U dans la Figure B.1

- les densités des bandes de conduction et de valence sont approximativement paraboliques (comme dans le cas cristallin). Admettant l'approximation usuelle de la statistique de Fermi-Dirac par une statistique de Boltzmann pour les électrons et les trous des bandes de conduction et de valence, les densités volumiques des électrons libres (n_f) et trous libres (p_f) sont exprimées avec des densités volumiques effectives d'état pour les bandes de conduction (N_c) et de valence (N_v), par les relations usuelles suivantes:

$$n_f = N_c \exp\left(\frac{E_{fn} - E_c}{kT}\right), \quad p_f = N_v \exp\left(\frac{E_v - E_{fp}}{kT}\right) \quad (\text{B.3})$$

E_{fn} et E_{fp} sont les quasi-niveaux de Fermi pour les électrons libres et les trous libres. kT est l'énergie thermique. N_c et N_v sont des densités volumiques effectives des bandes de conduction et de valence.

Valeurs numériques typiques pour le a-Si:H, déposé par la méthode VHF-GD (du laboratoire de technologie de a-Si:H du Prof. A.Shah, institut de microtechnique de Neuchatel):

gap de mobilité $E_c - E_v \approx 1.8 \text{ eV}$
 queues de bandes $E_c^0 \approx 30 \text{ meV}$, $E_v^0 \approx 50 \text{ meV}$, $N_{cbr} \approx N_{vbr} \approx 10^{21} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$
 largeur de la queue de bande de conduction $E_c - E_{cbr} \approx 0.45 \text{ eV}$
 largeur de la queue de bande de valence $E_{vbr} - E_v \approx 0.8 \text{ eV}$
 densité volumique totale des liaisons pendantes
 $N_{DB} = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ pour un matériau non dégradé
 $N_{DB} = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ pour un matériau très dégradé
 bandes de valence et de conduction $N_c \approx N_v \approx 10^{19} \text{ cm}^{-3}$

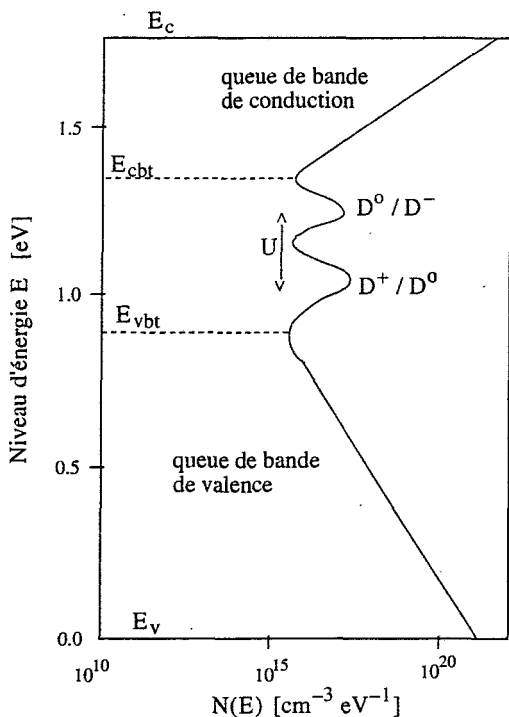


Figure B.2: DOS du a-Si:H, valeurs numériques typique pour le a-Si:H, déposé par la méthode VHF-GD, par le laboratoire de technologie de a-Si:H du Prof. A.Shah, institut de microtechnique de Neuchatel)

Remarque

- La forme exponentielle des queues de bandes, pour le a-Si:H est généralement admise pour des raisons de simplicité (voir par exemple Vaillant, Jousse et Bruyere (1988), Curtins et Favre (1988), et Overhof et Thomas (1989)).
- La queue de bande de valence est plus large que celle de conduction pour le a-Si:H: $E_v^0 > E_c^0$. La valeur de $E_v^0 \approx 50 \text{ meV}$ est généralement bien admise (voir Curtins et Favre (1988), Crandall (1984)) alors que la valeur de E_c^0 est sujette à

plus de controverses. Curtins et Favre (1988), et Crandall (1984) admettent $E_c^0 \approx 30$ meV. Je me baserai sur ces valeurs dans le chapitre C.3.

Dégradation du matériau:

- Le lien entre l'effet Steabler-Wronski (diminution de la photoconductivité d'une couche lorsqu'elle est soumise un certain temps à l'influence de la lumière (Steabler et Wronski (1980)) et l'augmentation de la densité volumique totale des liaisons pendantes N_{DB} est montrée dans Stutzmann, Jackson et Tsai (1985). De plus Wyrsh et Shah (1991 (b)) montre que les paramètres des états des queues de bande ne sont pas affecté par l'exposition de la couche à l'influence de la lumière. Comme on le verra au chapitre B.2, les liaisons pendantes (N_{DB}) agissent comme centres de recombinaison, donc lorsque je parlerai de dégradation du matériau sous l'influence de la lumière, il s'agira d'une augmentation de la densité volumique des liaisons pendantes N_{DB} .

B.2. Transitions entre les différents niveaux d'énergie de la DOS du a-Si:H.

B.2.1. Transitions admises pour le modèle

C'est par ces transitions que se font la génération et la recombinaison de paires de porteurs libres et que se constitue la charge électrique des états localisés. Résumons en 3 groupes les diverses transitions:

- a) Transitions entre états délocalisés (passage interbande d'un électron de la bande de valence dans la bande de conduction et vice versa). C'est un phénomène de **génération dite interbande** de paires électron-trou libres et de **recombinaison dite interbande**.
- b) Transitions entre états localisés et délocalisés. Il s'agit de capture et d'émission de chacun des deux types de porteurs libres par des états localisés. La capture successive de deux porteurs libres de charges opposées par un même état localisé produit une **recombinaison dite via états localisés**. L'émission successive de deux porteurs libres opposés par un même état localisé produit une **génération dite via états localisés** d'une paire électron-trou libres. Les processus d'émission et de capture de porteurs libres par des états localisés ne se font pas toujours par paires (**émissions séparées** et **captures séparées** de porteurs libres).
- c) Transitions entre états localisés de différents niveaux d'énergie. Ces transitions peuvent produire une recombinaison et une génération très indirecte de paires électrons-trous libres. Ce type de transitions n'est important qu'à basse température selon Vaillant, Jousse et Bruyere (1988), Street (1984) montre leur importance à basse température et dans l'obscurité. Je les néglige dans ce modèle conçu pour une température ambiante et sous illumination.

La recombinaison interbande est négligée devant l'importance de la recombinaison via états localisés (due à la relativement grande densité des états localisés).

La génération (interbande et via états localisés) ainsi que l'émission séparée de porteurs libres peut avoir deux origines: thermique et par excitation lumineuse (photogénération et photoémission séparée). Le matériau est excité par une lumière dont les longueurs d'onde correspondent à des énergies supérieures à l'intervalle d'énergie du gap du matériau, donc la photogénération via états localisés et la photoémission séparée sont négligées devant

l'importance de la photogénération interbande: l'intervalle d'énergie du gap (1.8 eV) correspond à une longueur d'onde de 6800 Å (infrarouge), donc cette simplification est valable pour tout le spectre du visible.

Finalement, je néglige la génération thermique devant l'importance de la photogénération (intensité de lumière suffisante).

Je conserve les émissions thermiques et captures séparées de porteurs libres: c'est par ces transitions que se constitue la charge électrique des états localisés dans mon modèle (la recombinaison ou la génération d'une paire de porteurs libres via un état localisé ne modifie pas la condition de charge de ce dernier).

Tableau B.2: transitions admises pour le modèle.

(température ambiante et excitation lumineuse couvrant le spectre du visible)

type de transitions	interbande (de valence à conduction et vice versa)	d'états localisés à états délocalisés et vice versa
photogénération de paires de porteurs libres	Important	négligée
génération thermique de paires de porteurs libres	négligée	négligée
photoémission séparée de porteurs libres	----	négligée
émission thermique séparée de porteurs libres	----	important
recombinaison de paires de porteurs libres	négligée	important
capture séparée de porteurs libres	----	important

B.2.2. Niveaux de démarcation dans les états localisés: une séparation entre centres de recombinaison et pièges. Fonctions d'occupations des pièges. Classification pour le a-Si:H.

Les transitions admises pour un niveau des états localisés sont des captures et des émissions thermiques de porteurs libres (voir paragraphe B.2.1), ces captures et émissions thermiques pouvant se faire par paires ou séparées.

Définition des pièges et des centres de recombinaison par l'équilibre stationnaire pour les taux de capture et d'émission thermique de porteurs libres:

- Un **centre de recombinaison** ne peut que capturer les deux types de porteurs libres, c'est à dire que les taux des émissions thermiques des deux types de porteurs libres sont négligeables. L'équilibre stationnaire sera satisfait par l'égalité du taux de capture des électrons libres avec le taux de capture des trous libres (d'où l'appellation "centre de recombinaison"), et cela pour chaque centre de recombinaison.
- Un **piège d'électrons** ne capture et n'émet thermiquement que des électrons libres, alors que les taux de capture et d'émission thermique des trous libres sont négligeables. L'équilibre stationnaire sera satisfait par l'égalité du taux de capture d'électrons libres avec le taux d'émission thermique d'électrons libres, et cela pour chaque piège d'électrons. Cet équilibre stationnaire fait que la contribution de ces pièges à la recombinaison est nulle.
- Un **piège de trous** ne capture et n'émet thermiquement que des trous libres, alors que les taux de capture et d'émission thermique des électrons libres sont négligeables. L'équilibre stationnaire sera satisfait par l'égalité du taux de capture de trous libres avec le taux d'émission thermique de trous libres, et cela pour chaque piège de trous. Cet équilibre stationnaire fait que la contribution de ces pièges à la recombinaison est nulle.

(voir figure B.3)

Nous allons voir que la densité des états localisés se divise en zones de pièges et en zones de centres de recombinaison. Les zones de pièges sont séparées des zones de centres de recombinaison par les niveaux d'énergie dit "**niveaux de démarcation**". L'intérêt de cette division de la densité des états localisés est d'obtenir des expressions, pour la recombinaison et pour les charges électriques, simplifiées et spécifiques à chaque zone. Pour tenir compte de la densité totale des états localisés, on prendra simplement la somme des contributions dues à chaque zone, selon leur importances dans de différentes situations (situation de dopage, condition d'illumination, condition de dégradation, etc..., voir chapitre C.3).

Les résultats et explications, que je présente ici, sont inspirés de Simmons et Taylor (1971), et de Rose (1963). Simmons et Taylor définissent des "quasi-niveaux pour pièges" par l'étude de la fonction d'occupation d'états localisés ne possédant que deux conditions d'occupation. Ils proposent ces "quasi-niveaux pour pièges" comme séparation entre les pièges et les centres de recombinaison. L'analyse de Simmons et Taylor supprime l'ambiguïté provenant de différentes manières de séparer les pièges des centres de recombinaison: les niveaux de démarcations définis par Rose (1963) et repris par Rivkin (1964) ne sont pas les mêmes que les quasi-niveaux pour pièges de Simmons et Taylor. Simmons et Taylor montre que la définition de Rose est insuffisante. L'analyse de Simmons et Taylor est plus exacte, mais leur analyse prend pour point de départ la fonction d'occupation générale des états localisés et établit la distinction des zones par des comparaisons de fonctions d'occupation: Taylor et Simmons **n'analysent pas la signification** sur l'équilibre stationnaire pour les **taux des transitions en jeux**, des pièges et centres de recombinaison définis ainsi.

Intérêt d'une définition se basant sur l'équilibre stationnaire pour les taux des transitions en jeux pour distinguer chaque zone:

Une définition se basant sur les taux des transitions en jeux et la manière particulière dont l'équilibre stationnaire se réalise, selon la zone, donne une image physique directe de la distinction apportée. Elle permet un calcul rapide et simplifié des fonctions d'occupation spécifiques à chaque zone (plutôt que de calculer d'abord la fonction d'occupation générale et ensuite d'en déduire des approximations valables pour chaque zone). On remarquera la simplicité du calcul des fonctions d'occupation des centres de recombinaison des états des liaisons pendantes, en utilisant une définition par l'équilibre stationnaire, dans le paragraphe B.3.1.

Ma contribution pour ce paragraphe:

Je montre l'équivalence de définir les pièges et centres de recombinaison d'une part par l'équilibre stationnaire particulier des taux des transitions en jeux, selon la zone, et de les définir d'autre part avec les quasi-niveaux donnés par Simmons et Taylor. Ainsi l'ambiguïté, entre les niveaux de démarcation de Rose et les quasi-niveaux pour pièges de Simmons et Taylor, est supprimée par une image physique directe de la signification d'un centre de recombinaison et de celle d'un piège.

Finalement, j'adapte cette distinction entre pièges et centres de recombinaison à la densité des états localisés du a-Si:H possédant trois conditions d'occupation.

Ce paragraphe est construit en trois étapes:

- 1^{ère} étape: analyse de Simmons et Taylor (1971) + définitions des différents niveaux proposés comme démarcation.
- 2^{ème} étape: l'équivalence de définir les pièges et centres de recombinaison d'une part par l'équilibre stationnaire particulier des taux des transitions en jeux, selon la zone, et d'autre part avec les quasi-niveaux donnés par Simmons et Taylor (Tableau B.3 et figure B.5).
- 3^{ème} étape: Pièges, centres de recombinaison et niveaux de démarcation pour des états localisés possédant trois conditions d'occupation (classification pour le a-Si:H, Tableau B.4)

1^{ère} étape: analyse de Simmons et Taylor (1971) + définitions des différents niveaux (Rose (1963), Rivkin (1964), et Simmons et Taylor)

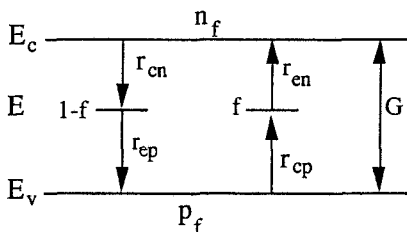


Figure B.3: transitions pour un état localisé au niveau E avec deux conditions d'occupation.

$1-f(E)$: probabilité d'être inoccupé

$f(E)$: probabilité d'être occupé

$$\begin{aligned}
 \text{taux de capture d'électrons libres} & \quad r_{cn} = v_{th} \sigma_n n_f (1-f) N_s = c_n (1-f) N_s \\
 \text{taux de capture de trous libres} & \quad r_{cp} = v_{th} \sigma_p P_f f N_s = c_p f N_s \\
 \text{taux d'émission d'électron libres} & \quad r_{en} = e_n f N_s \\
 \text{taux d'émission de trous libres} & \quad r_{ep} = e_p (1-f) N_s
 \end{aligned} \tag{B.4a}$$

G: taux de photogénération de paires de porteurs libres

N_s : densité d'état associé au niveau E

Probabilités de capture et probabilités d'émission thermiques :

$$\begin{aligned}
 c_n &= v_{th} \sigma_n n_f: \text{ probabilité de capture d'électrons libre} \\
 c_p &= v_{th} \sigma_p P_f: \text{ probabilité de capture de trous libres}
 \end{aligned} \tag{B.4b}$$

v_{th} est la vitesse thermique, σ_n et σ_p sont les sections efficaces de capture respectivement des électrons et trous libres.

e_n et e_p : probabilités d'émissions thermiques respectivement des électrons et des trous libres.

Rapport entre probabilités d'émissions thermiques et de captures.

En exprimant le bilan des transitions (voir Figure B.3), pour le niveau d'énergie (E), à l'équilibre thermodynamique (principe du bilan détaillé):

$$r_{cn} = r_{en}$$

$$r_{cp} = r_{ep}$$

et prenant pour f la statistique de Fermi-Dirac à l'équilibre thermodynamique (l'indice "o" indique l'équilibre thermodynamique):

$$f_o(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_f}{kT}\right)} \quad (E_f: \text{niveau de Fermi})$$

avec Eq.(B.4), on obtient:

$$\frac{e_n}{v_{th} \sigma_n n_{fo}} = \exp\left(\frac{E - E_f}{kT}\right) \quad \text{et} \quad \frac{e_p}{v_{th} \sigma_p p_{fo}} = \exp\left(\frac{E_f - E}{kT}\right)$$

En admettant que les valeurs de e_n , e_p , σ_p et σ_p sont indépendantes de l'équilibre thermodynamique et en utilisant les expressions des densités des porteurs libres (Eq.(B.3)) et Eq.(B.4b), on obtient les deux relations suivantes valables dans et hors équilibre thermodynamique:

$$\frac{e_n}{c_n} = \exp\left(\frac{E - E_{fn}}{kT}\right) \quad \text{et} \quad \frac{e_p}{c_p} = \exp\left(\frac{E_{fp} - E}{kT}\right) \quad (B.5)$$

Par Eq.(B.5), on a:

$$\begin{aligned} e_n = c_n &\Leftrightarrow E = E_{fn} \\ e_p = c_p &\Leftrightarrow E = E_{fp} \end{aligned} \quad (B.6)$$

Selon Eq.(B.6), les quasi-niveaux de Fermi des porteurs libres donnent les niveaux d'énergie où la probabilité de capture d'un type de porteur est égale à la probabilité d'émission thermique du même type de porteur.

De Eq.(B.5), on a:

- $\frac{e_n}{c_n}$ est exponentiellement croissant avec E . Plus E s'approche de E_c , plus la probabilité d'émission d'électrons est grande comparée avec la probabilité de capture d'électrons.

- $\frac{e_p}{c_p}$ est exponentiellement décroissant avec E. Plus E s'approche de E_v , plus la probabilité de d'émission de trous est grande comparée avec la probabilité de capture de trous.

Equilibre stationnaire générale pour un état avec deux conditions d'occupation (cas de la figure B.3)

L'équilibre stationnaire est réalisé indépendamment à chaque niveau d'énergie E. d'où:

$$\frac{df}{dt} = 0 \Leftrightarrow r_{cn} - r_{en} = r_{cp} - r_{ep}$$

⇓

(B.7)

$$f(E) = \frac{e_p + c_n}{e_n + c_n + c_p + e_p}$$

Avec les rapports entre captures et émissions (Eq.(B.5)), on peut expliciter dans Eq.(B.7) la dépendance de f avec le niveau E.

Hypothèse sur les sections efficaces de capture:

Pour ce qui suit j'admettrai l'hypothèse faite par Simmons et Taylor (1971):

le rapport $\frac{\sigma_n}{\sigma_p}$ est indépendant de E.

Pour analyser f(E) (Eq.(B.7)), nous allons regarder les deux situations particulières suivantes.

A) L'équilibre stationnaire particulier suivant (+ Eq.(B.5)):

$$r_{cn} - r_{en} = r_{cp} \gg r_{ep}$$

⇓

$$f(E) = \frac{c_n}{e_n + c_n + c_p} = \frac{c_n}{c_n + c_p} \frac{1}{1 + \exp p\left(\frac{E - E_{TSn}}{kT}\right)} \left. \vphantom{\frac{1}{1 + \exp p\left(\frac{E - E_{TSn}}{kT}\right)}} \right\} \begin{array}{l} \text{statistique de} \\ \text{Fermi - Dirac} \\ \text{modulée et} \\ \text{centrée en } E_{TSn} \end{array} \quad (B.8)$$

$$\text{avec } E_{TSn} = E_{fn} + kT \ln\left(\frac{c_n + c_p}{c_n}\right)$$

est valide pour (par Eq.(B.4), Eq.(B.7) et Eq.(B.5)):

$$r_{cp} \gg r_{ep} \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} c_n \gg e_p \\ \text{et} \\ E_{fn} - E_{fp} \gg kT \end{array} \right\}$$

B) L'équilibre stationnaire particulier suivant (+ Eq.(B.5)):

$$r_{cp} - r_{ep} = r_{cn} \gg r_{en}$$

⇕

$$1 - f(E) = \frac{c_p}{c_n + c_p + e_p} = \frac{c_p}{c_n + c_p} \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_{TSp} - E}{kT}\right)} \left. \vphantom{\frac{c_p}{c_n + c_p}} \right\} \begin{array}{l} \text{statistique de} \\ \text{Fermi - Dirac} \\ \text{modulée et} \\ \text{centrée en } E_{TSp} \end{array} \quad (\text{B.9})$$

$$\text{avec } E_{TSp} = E_{fp} - kT \ln\left(\frac{c_n + c_p}{c_p}\right)$$

est valide pour (par Eqs.(B.4, B.7 et B.5)):

$$r_{cn} \gg r_{en} \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} c_p \gg e_n \\ \text{et} \\ E_{fn} - E_{fp} \gg kT \end{array} \right\}$$

"quasi-niveaux pour pièges" définis par Simmons et Taylor (1971):

Les niveaux E_{TSn} et E_{TSp} , apparaissant dans Eqs.(B.8 et B.9) sont les "quasi-niveaux pour pièges" définis par Simmons et Taylor. On a (avec Eq.(B.5)):

$$E = E_{TSn} = F_{fn} + kT \ln\left(\frac{c_n + c_p}{c_n}\right) \Leftrightarrow e_n = c_n + c_p \quad (\text{B.10a})$$

$$E = E_{TSp} = F_{fp} - kT \ln\left(\frac{c_n + c_p}{c_p}\right) \Leftrightarrow e_p = c_n + c_p$$

Niveaux de démarcation définis par Rose (1963) (et Rivkin (1964)):

Les conditions de validité de Eqs.(B.8 et B.9), $e_p \ll c_n$ et $e_n \ll c_p$, définissent deux autres niveaux. Avec Eq.(B.5), on a:

$$\begin{aligned}
 e_p = c_n &\Leftrightarrow E = E_{Rp} = E_{fp} + kT \ln\left(\frac{c_p}{c_n}\right) \\
 e_n = c_p &\Leftrightarrow E = E_{Rn} = E_{fn} + kT \ln\left(\frac{c_p}{c_n}\right)
 \end{aligned}
 \tag{B.10b}$$

Les deux niveaux E_{Rp} et E_{Rn} sont les niveaux de démarcation définis par Rose (et Rivkin).

Remarque:

Avec l'hypothèse sur les sections efficaces de capture, σ_n/σ_p =indépendant de E, les niveaux E_{TSn} , E_{TSp} , E_{Rn} et E_{Rp} sont indépendants du niveau d'énergie E, et sont donc des points caractéristiques de la DOS pour une illumination donnée.

On a toujours sous illumination:

$$E_{Rn} - E_{Rp} = E_{fn} - E_{fp} \gg kT$$

et donc, on a toujours la hiérarchie suivante sur les niveaux de Simmons et Taylor, de Rose (Rivkin) et des quasi-niveaux des porteurs libres:

$$\left\{ \begin{array}{l} E_{TSp} < E_{Rp} < E_{Rn} < E_{TSn} \\ E_{TSp} < E_{fp} < E_{fn} < E_{TSn} \end{array} \right\}
 \tag{B.10c}$$

On pourra dessiner la fonction d'occupation générale Eq.(B.7) avec les deux statistiques simplifiées données par Eq.(B.8) et Eq.(B.9):

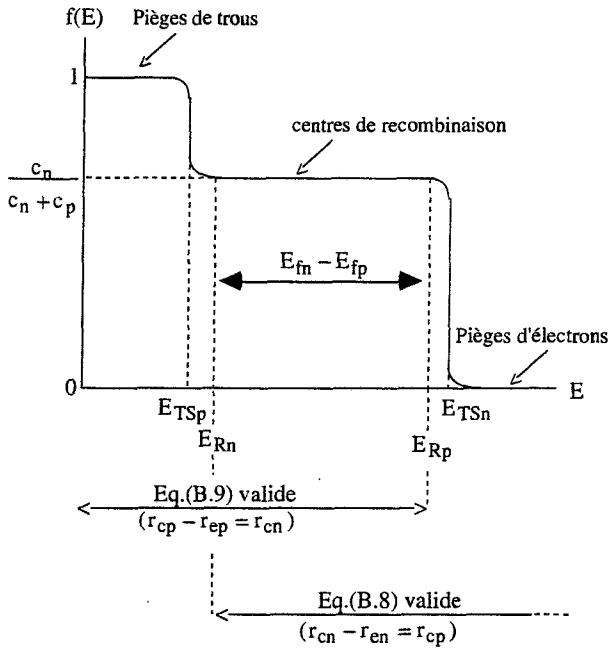


Figure B.4: fonction d'occupation d'états localisés avec deux conditions d'occupation (Eq.(B.7)). On reconnaît pour $E_{R_n} - E > kT$ la statistique de Fermi-Dirac modulée et centrée en E_{TS_p} (Eq.(B.9)). On reconnaît pour $E - E_{R_p} \gg kT$ la statistique de Fermi-Dirac modulée et centrée en E_{TS_n} (Eq.(B.8)). Les localisations des pièges et centres de recombinaison sont dues soit à Rose avec les niveaux E_{R_n} et E_{R_p} , soit à Simmons et Taylor avec E_{TS_n} et E_{TS_p} . La mise en évidence des zones de pièges et de centres de recombinaison suit dans la 2^{ème} étape.

2^{ème} étape: l'équivalence de définir les pièges et centres de recombinaison d'une part par l'équilibre stationnaire particulier des taux des transitions en jeux, selon la zone, et d'autre part avec les quasi-niveaux donnés par Simmons et Taylor, E_{TSn} et E_{TSp} .

Voir figure B.3 et définition des pièges et centres de recombinaison donné en début de ce paragraphe.

Selon Simmons et Taylor:

$$\begin{aligned} \text{piège d'électrons: } & E - E_{TSn} \gg kT \Leftrightarrow e_n \gg c_n + c_p \\ \text{centre de recombinaison: } & \left\{ \begin{array}{l} E - E_{TSp} \gg kT \\ E_{TSn} - E \gg kT \end{array} \right\} \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} c_n + c_p \gg e_p \\ c_n + c_p \gg e_n \end{array} \right\} \\ \text{piège de trous: } & E_{TSp} - E \gg kT \Leftrightarrow e_p \gg c_n + c_p \end{aligned}$$

Pièges d'électrons:

Pour définir un piège d'électrons par l'équilibre stationnaire, on veut substituer à l'équilibre stationnaire:

$$r_{cn} r_{en} = r_{cp} \quad (\gg r_{ep}) \quad (\text{Eq.(B.8)})$$

un équilibre stationnaire de remplacement et plus simple: $r_{cn} = r_{en}$

Cette substitution n'a de sens comme approximation que si elle est appliquée dans des conditions pour lesquelles

$$r_{cp} \rightarrow 0$$

Poser la condition

$$r_{cn}, r_{en} \gg r_{cp} \quad (\gg r_{ep}) \quad \text{pour } r_{cn} = r_{en}$$

ne suffit pas! Car la statistique obtenue peut être en contradiction significative avec l'équilibre stationnaire toujours vrai de notre cas $r_{cn} r_{en} = r_{cp}$. Pour définir un piège d'électrons il faut la condition supplémentaire $r_{cp} \rightarrow 0$.

Avec Eq.(B.4), Eq.(B.8) pour $f(E)$, et les définitions de E_{Rn} et E_{TSn} Eq.(B.10 a,b,c), pour définir un piège d'électrons, on aura:

$$1) \quad r_{cn}, r_{en} \gg r_{cp} \Leftrightarrow \{ e_n \gg c_p \Leftrightarrow \overbrace{E - E_{Rn}}^{\text{niveau de Rose}} \gg kT \} \quad (** \text{ voir note})$$

$$2) \quad r_{cp} \rightarrow 0 \quad \Leftrightarrow \{ e_n \gg c_n + c_p \Leftrightarrow \overbrace{E - E_{TSn}}^{\text{niveau de Simmons \& Tayl.}} \gg kT \quad \}$$

Comme on a toujours $E_{Rn} < E_{TSn}$ (c'est à dire que $e_n \gg c_n + c_p \Rightarrow e_n \gg c_p$), la condition $E - E_{TSn} \gg kT$ est la condition nécessaire et suffisante pour définir un piège d'électrons par l'équilibre stationnaire de remplacement $r_{cn} = r_{en}$ de façon que cette définition ait un sens physique.

Ainsi le quasi-niveau pour pièges d'électrons de Simmons et Taylor, E_{TSn} , est bien celui qu'il faut prendre comme niveau de démarcation des pièges d'électrons.

** Note:

$$r_{en} \gg r_{cp} \Rightarrow r_{cn} \gg r_{cp} \left(\begin{array}{l} \text{en utilisant:} \\ e_n > c_p \Rightarrow c_n > e_p \\ \text{(puisque } E_{Rn} > E_{Rp}) \end{array} \right)$$

Pièges de trous:

Je procède similairement à la définition des pièges d'électrons. Les résultats et calculs sont symétriques à ceux des pièges d'électrons. On obtient l'équivalence suivante avec Eq.(B.4), Eq.(B.9) pour $f(E)$ et Eq.(B.10 a,b,c):

$$r_{cp} - r_{ep} = r_{cn} \rightarrow 0 \Leftrightarrow \{ e_p \gg c_n + c_p \Leftrightarrow \overbrace{E_{TSp} - E}^{\text{niveau de Simmons \& Tayl.}} \gg kT \}$$

pour que l'on puisse définir les pièges de trous par l'équilibre stationnaire $r_{cp} = r_{ep}$, de façon que cette définition ait un sens physique. Ainsi le quasi-niveau pour pièges de trous de Simmons et Taylor, E_{TSp} , est bien celui qu'il faut prendre comme niveau de démarcation des pièges de trous.

Centres de recombinaison:

On obtient l'équivalence suivante avec Eq.(B.4), Eq.(B.7 pour $f(E)$ et Eq.(B.10 a,b,c):

$$\left\{ \begin{array}{l} r_{cn} - r_{cp} = r_{en} - r_{ep} \rightarrow 0 \\ \text{avec} \\ r_{en}, r_{ep} \rightarrow 0 \end{array} \right\} \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} E - E_{TSp} \gg kT \\ E_{TSn} - E \gg kT \end{array} \right\} \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} c_n + c_p \gg e_p \\ c_n + c_p \gg e_n \end{array} \right\}$$

pour que l'on puisse définir les centres de recombinaison par l'équilibre stationnaire $r_{cn} = r_{cp}$, de façon à ce que cette définition ait un sens physique. Ainsi les niveaux de Simmons et Taylor, E_{TSn} et E_{TSp} , sont ceux qu'il faut utiliser comme niveaux de démarcation pour les centres de recombinaison.

Tableau B.3: résumé des définitions des pièges et des centres de recombinaison pour des états localisés ne possédant que deux conditions d'occupation

pièges d'électrons niveau de démarcation des pièges d'électrons: E_{TSn}	$r_{cn} - r_{en} = r_{cp} \rightarrow 0$ \Downarrow $E - E_{TSn} \gg kT$
centres de recombinaison niveaux de démarcation des centres de recombinaison: E_{TSp} et E_{TSn}	$\left\{ \begin{array}{l} r_{cn} - r_{cp} = r_{en} - r_{ep} \rightarrow 0 \\ \text{avec} \\ r_{en}, r_{ep} \rightarrow 0 \end{array} \right\}$ \Downarrow $\left\{ \begin{array}{l} E - E_{TSp} \gg kT \\ E_{TSn} - E \gg kT \end{array} \right\}$
pièges de trous niveau de démarcation des pièges de trous: E_{TSp}	$r_{cp} - r_{ep} = r_{cn} \rightarrow 0$ \Downarrow $E_{TSp} - E \gg kT$

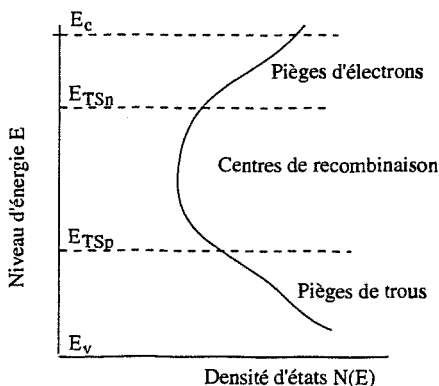


Figure B.5: division de la densité des états localisés en zones. E_{TSn} et E_{TSp} sont définis en Eq.(B.10a)

Remarques:

- J'emploierai désormais le terme de "niveaux de démarcation" pour les "quasi-niveaux pour pièges" de Simmons et Taylor.
- Plus l'illumination est grande plus $E_{TSn} \rightarrow E_c$ et plus $E_{TSp} \rightarrow E_v$.
- On a toujours $E_{TSn} - E_{TSp} > E_{fn} - E_{fp}$ (par Eq.(B.10a,c)).

Plus l'illumination est grande plus le nombre de centres de recombinaison est grand (car n_f et p_f , et donc $E_{fn} - E_{fp}$, augmentent avec l'illumination).

- Selon Eq.(B.10a), les niveaux E_{TSn} et E_{TSp} ne dépendent pas seulement des niveaux E_{fn} et E_{fp} , mais aussi du rapport $c_n/c_p = \sigma_n n_f / \sigma_p p_f$ lequel varie avec le dopage.

$$\text{dopé n: } \sigma_n n_f \gg \sigma_p p_f \rightarrow \left\{ \begin{array}{l} E_{TSn} = E_{fn} \\ E_{TSp} = E_{fp} - kT \ln \frac{c_n}{c_p} \end{array} \right\}$$

Dans le cas dopé n, le niveau de démarcation des pièges d'électrons se confond avec le quasi-niveau de Fermi des électrons libres.

$$\text{dopé p: } \sigma_n n_f \ll \sigma_p p_f \rightarrow \left\{ \begin{array}{l} E_{TSn} = E_{fn} + kT \ln \frac{c_p}{c_n} \\ E_{TSp} = E_{fp} \end{array} \right\}$$

Dans le cas dopé p, le niveau de démarcation des pièges de trous se confond avec le quasi-niveau de Fermi des trous libres.

Fonction d'occupation des pièges pour états localisés ne possédant que deux conditions d'occupation.

Pièges d'électrons

directement par l'équilibre stationnaire, et Eq.(B.4)

$$\underbrace{r_{cn} - r_{en} = r_{cp} \rightarrow 0}_{\Rightarrow f(E) \approx \exp\left(\frac{E_{fn} - E}{kT}\right)}$$

ou bien selon le critère donné par Taylor & Sim. appliqué à Eq.(B.8)

$$\underbrace{E - E_{TSn} \gg kT}_{\Rightarrow f(E) \approx \frac{c_n}{c_n + c_p} \exp\left(\frac{E_{TSn} - E}{kT}\right) = \exp\left(\frac{E_{fn} - E}{kT}\right)}$$

(B.11)

Pièges de trous

directement par l'équilibre stationnaire et Eq.(B.4)

$$\underbrace{r_{cp} - r_{ep} = r_{cn} \rightarrow 0}_{\text{directement par l'équilibre stationnaire et Eq.(B.4)}} \Rightarrow 1 - f(E) \approx \exp\left(\frac{E - E_{fp}}{kT}\right)$$

ou bien selon le critère donné par Taylor & Sim. appliqué à Eq.(B.9)

$$\underbrace{E_{TSP} - E \gg kT}_{\text{ou bien selon le critère donné par Taylor & Sim. appliqué à Eq.(B.9)}} \Rightarrow 1 - f(E) = \frac{c_p}{c_n + c_p} \exp\left(\frac{E - E_{TSP}}{kT}\right) = \exp\left(\frac{E - E_{fp}}{kT}\right) \quad (\text{B.12})$$

Par Eqs.(B.11 et B.12), les **pièges d'électrons et de trous obéissent à des statistiques de Boltzmann** identiques aux statistiques de Boltzmann pour les électrons libres et les trous libres (bien entendu Boltzmann sera valable pour autant que E_{fn} et E_{TSn} soient suffisamment en dessous de E_c (avec l'énergie thermique kT comme critère de comparaison), et que E_{fp} et E_{TSp} soient suffisamment au dessus de E_v (avec l'énergie thermique kT comme critère de comparaison), c'est à dire que je ne m'occupe pas des cas dégénérés).

3^{ième} étape: Pièges, centres de recombinaison et niveaux de démarcation pour des états localisés possédant trois conditions d'occupation

(voir Tableau B.1 et définition des centres de recombinaison et des pièges au début du paragraphe)

Je vais montrer que, pour autant que les niveaux E_{TSn} et E_{TSp} , définis par Simmons et Taylor, soient situés dans des états pour lesquels les sections efficaces de capture gardent la même valeur indépendamment de l'occupation de l'état, alors il y a toujours seulement deux niveaux de démarcation séparant les pièges des centres de recombinaison et ils sont toujours donnés par E_{TSn} et E_{TSp} . Cela signifie pour le a-Si:H que E_{TSn} et E_{TSp} doivent se trouver respectivement dans la queue de bande de conduction et dans la queue de bande de valence (voir remarque à la fin du paragraphe pour la situation où E_{TSn} et E_{TSp} sont situés dans des états, tels que les liaisons pendantes, pour lesquels les valeurs des sections efficaces de capture diffèrent selon l'occupation de l'état).

Prenons, pour l'exemple, la queue de bande de conduction.

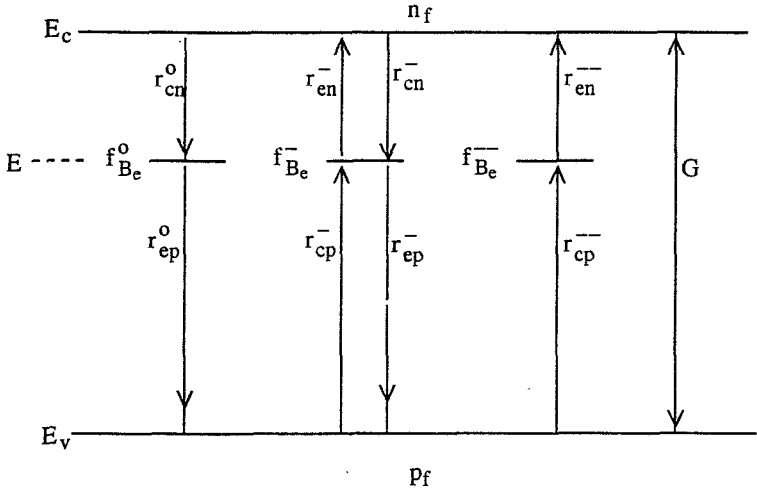


Figure B.6: transitions pour un état localisé au niveau E de la queue de bande de conduction (voir Tableau B.1 au paragraphe B.1.2).

f_{Be}^0 : probabilité d'être inoccupé

f_{Be}^- : probabilité d'être simplement occupé

f_{Be}^{--} : probabilité d'être doublement occupé

avec $f_{Be}^0 + f_{Be}^- + f_{Be}^{--} = 1$

Pour les états des queues de bande, on aura pour les sections efficaces de capture des porteurs libres (à voir que l'occupation de l'état ne modifie pas les valeurs des sections efficaces de capture):

$$(\sigma_n^0 = \sigma_n^-) \equiv \sigma_n^{Be} \quad \text{et} \quad (\sigma_p^- = \sigma_p^{--}) \equiv \sigma_p^{Be} \quad (\text{B.13})$$

Les taux de transitions sont donnés par:

$$\begin{aligned} r_{cn}^0 &= c_n^{Be} f_{Be}^0 N_S & r_{cn}^- &= c_n^{Be} f_{Be}^- N_S \\ r_{cp}^- &= c_p^{Be} f_{Be}^- N_S & r_{cp}^{--} &= c_p^{Be} f_{Be}^{--} N_S \\ r_{en}^- &= e_n^- f_{Be}^- N_S & r_{en}^{--} &= e_n^{--} f_{Be}^{--} N_S \\ r_{ep}^0 &= e_p^0 f_{Be}^0 N_S & r_{ep}^- &= e_p^- f_{Be}^- N_S \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

avec les probabilités de captures de porteurs libres:

$$c_r^{Be} = v_{it} \sigma_n^{Be} n_f \quad \text{et} \quad c_p^{Be} = v_{it} \sigma_p^{Be} p_f$$

et les probabilités d'émissions thermiques de porteurs libres: e_n^-, e_n^{--}, e_p^0 et e_p^-

Les statistiques à l'équilibre thermodynamique sont de Vaillant et Jousse (1986), en adaptant les 3 occupations données pour des états des queues de bande et en posant $U=0$):

$$\begin{aligned}
 f_{Beo}^0(E) &= \frac{1}{1 + 2 \exp\left(\frac{E_f - E}{kT}\right) + \exp\left(2 \frac{E_f - E}{kT}\right)} \\
 f_{Beo}^-(E) &= \frac{2 \exp\left(\frac{E_f - E}{kT}\right)}{1 + 2 \exp\left(\frac{E_f - E}{kT}\right) + \exp\left(2 \frac{E_f - E}{kT}\right)} \\
 f_{Beo}^{--}(E) &= \frac{\exp\left(2 \frac{E_f - E}{kT}\right)}{1 + 2 \exp\left(\frac{E_f - E}{kT}\right) + \exp\left(2 \frac{E_f - E}{kT}\right)}
 \end{aligned} \tag{B.15}$$

Le bilan des transitions à l'équilibre thermodynamique (bilan détaillé) est:

$$\begin{aligned}
 r_{cn}^0 &= r_{en}^- & r_{cn}^- &= r_{en}^{--} \\
 r_{ep}^0 &= r_{cp}^- & r_{ep}^- &= r_{cp}^0
 \end{aligned}$$

d'où avec Eqs.(B.3, B.14 et B.15), on obtient les relations suivantes, valables dans et hors équilibre thermodynamique:

$$\begin{aligned}
 \left. \begin{aligned}
 \frac{e_n^-}{c_n^{Be}} &= \frac{1}{2} \exp\left(\frac{E - E_{fn}}{kT}\right) \\
 \frac{e_n^{--}}{c_n^{Be}} &= 2 \exp\left(\frac{E - E_{fn}}{kT}\right)
 \end{aligned} \right\} = \exp\left(\frac{E - E_{fn}}{kT}\right) \\
 \\
 \left. \begin{aligned}
 \frac{e_p^0}{c_p^{Be}} &= 2 \exp\left(\frac{E_{fp} - E}{kT}\right) \\
 \frac{e_p^-}{c_p^{Be}} &= \frac{1}{2} \exp\left(\frac{E_{fp} - E}{kT}\right)
 \end{aligned} \right\} = \exp\left(\frac{E_{fp} - E}{kT}\right)
 \end{aligned} \tag{B.16}$$

Avec Eq.(B.16), on pourra admettre comme conséquence de Eq.(B.13):

$$\begin{aligned}(e_n^- \approx e_n^{--}) &\equiv e_n^{\text{Be}} \\ (e_p^o \approx e_p^-) &\equiv e_p^{\text{Be}}\end{aligned}\tag{B.17}$$

Equilibre stationnaire hors équilibre thermodynamique pour le niveau E

$$\begin{aligned}\frac{df_{\text{Be}}^o}{dt} = 0 &\Rightarrow r_{en}^- + r_{cp}^- = r_{cn}^o + r_{ep}^o \\ \frac{df_{\text{Be}}^-}{dt} = 0 &\Rightarrow r_{en}^- + r_{cp}^- = r_{cn}^- + r_{ep}^- \end{aligned}\tag{B.18a}$$

$$\text{et: } f_{\text{Be}}^o + f_{\text{Be}}^- + f_{\text{Be}}^{--} = 1$$

d'où:

$$\begin{aligned}f_{\text{Be}}^o &= \frac{(c_p^{\text{Be}} + e_n^{\text{Be}})^2}{(c_p^{\text{Be}} + e_n^{\text{Be}})^2 + (c_p^{\text{Be}} + e_n^{\text{Be}})(c_n^{\text{Be}} + e_p^{\text{Be}}) + (c_n^{\text{Be}} + e_p^{\text{Be}})^2} \\ f_{\text{Be}}^- &= \frac{(c_p^{\text{Be}} + e_n^{\text{Be}})(c_n^{\text{Be}} + e_p^{\text{Be}})}{(c_p^{\text{Be}} + e_n^{\text{Be}})^2 + (c_p^{\text{Be}} + e_n^{\text{Be}})(c_n^{\text{Be}} + e_p^{\text{Be}}) + (c_n^{\text{Be}} + e_p^{\text{Be}})^2} \\ f_{\text{Be}}^{--} &= \frac{(c_n^{\text{Be}} + e_p^{\text{Be}})^2}{(c_p^{\text{Be}} + e_n^{\text{Be}})^2 + (c_p^{\text{Be}} + e_n^{\text{Be}})(c_n^{\text{Be}} + e_p^{\text{Be}}) + (c_n^{\text{Be}} + e_p^{\text{Be}})^2}\end{aligned}\tag{B.18b}$$

Avec Eqs.(B.16 et B.17) on peut expliciter la dépendance avec le niveau d'énergie E des fonctions d'occupation Eq.(B.18b).

On a toujours la relation suivante sur les rapports des taux et des fonctions d'occupation (avec Eqs.(B.13, B.14, B.17 et B.18)):

$$\frac{r_{ep}^-}{r_{ep}^o} = \frac{r_{cn}^-}{r_{cn}^o} = \frac{f_{\text{Be}}^-}{f_{\text{Be}}^o} = \frac{c_n^{\text{Be}} + e_p^{\text{Be}}}{c_p^{\text{Be}} + e_n^{\text{Be}}} = \frac{f_{\text{Be}}^{--}}{f_{\text{Be}}^-} = \frac{r_{cp}^-}{r_{cp}^o} = \frac{r_{en}^-}{r_{en}^o}\tag{B.19}$$

Pièges d'électrons

(Voir figure B.6 et définition des pièges donné en début de ce paragraphe.)

La démarche est similaire à la précédente pour les états localisés ne possédant que deux conditions d'occupation. On pourra, par Eq.(B.13) et Eq.(B.17), définir les niveaux de Simmons et Taylor, et de Rose accordant Eq.(B.10 a,b) avec la hiérarchie Eq.(B.10c).

On a (avec Eq.(B.18a)):

$$\left. \begin{aligned} r_{cn}^0 - r_{en}^- = r_{cp}^- &\gg r_{ep}^0 \\ r_{cn}^- - r_{en}^- = r_{cp}^- &\gg r_{ep}^- \end{aligned} \right\} \Leftrightarrow \begin{cases} E - E_{Rp} \gg kT & (e_p^{Be} \ll c_n^{Be}) \\ E_{fn} - E_{fp} \gg kT \end{cases}$$

$r_{cp}^- \gg r_{ep}^0$ et $r_{cp}^- \gg r_{ep}^-$ sont deux conditions identiques par Eq.(B.19), E_{Rp} est le niveau de démarcation des trous définis par Rose (Eq.(B.10b)).

Je définis un piège d'électrons par l'équilibre stationnaire suivant:

$$\begin{aligned} r_{cn}^0 - r_{en}^- = r_{cp}^- &\rightarrow 0 \quad (\Leftrightarrow e_n^{Be} \gg c_n^{Be} + c_p^{Be} \Leftrightarrow E - E_{TSn} \gg kT) \\ r_{cn}^- - r_{en}^- = r_{cp}^- &\rightarrow 0 \end{aligned} \quad (\text{voir **Note})$$

**Note: (avec Eq.(.6), Eq.(B.10 a,b,c))

$$\left\{ \begin{array}{l} e_n^{Be} \gg c_p^{Be} \\ \text{ou} \\ e_n^{Be} \gg c_n^{Be} \end{array} \right\} \quad \text{n' est pas suffisant, il faut} \quad \left\{ \begin{array}{l} e_n^{Be} \gg c_p^{Be} \\ \text{et} \\ e_n^{Be} \gg c_n^{Be} \end{array} \right\}$$

$$e_n^{Be} \gg c_n^{Be} + c_p^{Be} \Rightarrow e_p^{Be} \ll c_n^{Be}, c_p^{Be}, e_n^{Be}$$

$$\text{Par Eq.(B.19): } (r_{cp}^- \rightarrow 0) \Rightarrow \begin{cases} r_{cp}^- \rightarrow 0 \\ f_{Be} \ll f_{Be} \end{cases}$$

E_{TSn} est le "quasi-niveau pour piège d'électron" définis par Simmons & Taylor (Eq.(B.10a))

Ainsi, il suffit et est nécessaire pour le sens physique de définir les **pièges d'électrons** par l'équilibre stationnaire suivant:

$$\begin{aligned} r_{cn}^0 - r_{en}^- = r_{cp}^- &\rightarrow 0 \Leftrightarrow E - E_{TSn} \gg kT \\ & (e_n^{Be} \gg c_n^{Be} + c_p^{Be}) \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

$$\text{Comme } e_n^{\text{Be}} \gg c_n^{\text{Be}} + c_p^{\text{Be}} \Rightarrow \begin{cases} e_n^{\text{Be}} \gg c_n^{\text{Be}} & (\text{car } E_{\text{TSn}} > E_{\text{fn}}) \\ e_n^{\text{Be}} \gg c_p^{\text{Be}} & (\text{car } E_{\text{TSn}} > E_{\text{Rn}}) \\ c_n^{\text{Be}} \gg e_p^{\text{Be}} & (\text{car } E_{\text{TSn}} > E_{\text{Rp}}) \end{cases}$$

on aura pour les fonctions d'occupation:

$$f_{\text{Be}}^0 = 1$$

$$f_{\text{Be}}^- \approx \frac{c_n^{\text{Be}}}{e_n^{\text{Be}}} = \exp\left(\frac{E_{\text{fn}} - E}{kT}\right) \quad (\text{B.21})$$

$$f_{\text{Be}}^- = 0 \quad (\ll f_{\text{Be}}^-)$$

Donc, le niveau de démarcation des pièges d'électrons est encore le niveau défini par Simmons et Taylor E_{TSn} et f_{Be}^- est une statistique de Boltzmann en E_{fn} (la même que celle pour les électrons libres), et la probabilité de double occupation f_{Be}^- est négligeable.

Pièges des trous

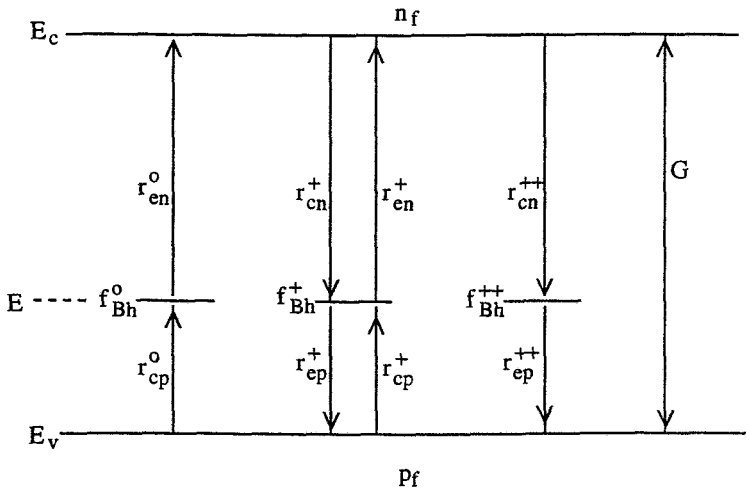


Figure B.7: transitions pour un état localisé au niveau E de la queue de bande de valence (voir Tableau B.1 au paragraphe B.1.2).

f_{Bh}^0 : probabilité d'être inoccupé

f_{Bh}^+ : probabilité d'être simplement occupé (par un trou)

f_{Bh}^{++} : probabilité d'être doublement occupé (par deux trous)

En exprimant les taux des transitions $r_{\text{cn}}^+, r_{\text{cn}}^{++}, r_{\text{en}}^o, r_{\text{en}}^+, r_{\text{cp}}^o, r_{\text{cp}}^+, r_{\text{ep}}^+, r_{\text{ep}}^{++}$ et reprenant formellement le même calcul que pour les pièges d'électrons (les résultats et calculs sont symétriques), on obtient qu'il suffit et est nécessaire pour le sens physique de définir les pièges de trous par l'équilibre stationnaire suivant:

$$r_{\text{cp}}^o - r_{\text{ep}}^+ = r_{\text{cn}}^+ \rightarrow 0 \Leftrightarrow E_{\text{TSp}} - E \gg kT$$

$$(e_{\text{p}}^{\text{Bh}} \gg c_{\text{n}}^{\text{Bh}} + c_{\text{p}}^{\text{Bh}}) \quad (\text{B.22})$$

E_{TSp} est le quasi-niveau pour les pièges de trous définis par Simmons & Taylor.

On aura pour les fonctions d'occupation:

$$f_{\text{Bh}}^o = 1$$

$$f_{\text{Bh}}^+ = \frac{c_{\text{p}}^{\text{Bh}}}{e_{\text{p}}^{\text{Bh}}} = \exp\left(\frac{E - E_{\text{fp}}}{kT}\right) \quad (\text{B.23})$$

$$f_{\text{Bh}}^{++} \approx 0 \quad (\ll f_{\text{Bh}}^+)$$

Ainsi, le niveau de démarcation des trous est encore le niveau définis par Simmons & Taylor E_{TSp} et f_{Bh}^+ est une statistique de Boltzmann en E_{fp} (la même que celle pour les trous libres), et la probabilité de double occupation f_{Bh}^{++} est négligeable.

Centre de recombinaison

On obtient, similairement au cas des états localisés ne possédant que deux conditions d'occupation, qu'il suffit et est nécessaire de prendre l'intervalle d'énergie $[E_{\text{TSn}}, E_{\text{TSp}}]$ pour situer les centres de recombinaison, selon la définition donnée en début de ce paragraphe B.2.2, et cela même si l'hypothèse que les valeurs des sections efficaces de capture ne varient pas selon l'occupation (Eq.(B.13)) n'est plus valable pour certains des centres de recombinaison. La condition pour que E_{TSn} et E_{TSp} soient les niveaux démarquant les centres de recombinaison (comme démarquant aussi les pièges) est que E_{TSn} et E_{TSp} soient situés dans les queues de bande.

Les expressions détaillées de l'équilibre stationnaire des centres de recombinaison sont différentes selon que l'on traite les états des liaisons pendantes, les états de la queue de bande de valence ou les états de la queue de bande de conduction. Les développements pour ces trois types de centres de recombinaison sont données dans le chapitre B.3

Tableau B.4: Classification des pièges et centres de recombinaison du a-Si:H

$E > E_{TSn}$:	pièges d'électrons de la queue de bande de conduction. Pas de contribution à la recombinaison. Ils agissent comme charge négative donnée par l'occupation $f_{Be}^- \gg f_{Be}^-$, f_{Be}^- est une statistique de Boltzmann en E_{fn}
$E_{TSn} > E > E_{cbr}$:	centres de recombinaison de la queue de bande de conduction. Leur charge est négative et donnée par les deux occupations f_{Be}^- et f_{Be}^- (voir Tableau B.1 et paragraphe B.3.3)
$E_{cbr} > E > E_{vbt}$:	centres de recombinaison des liaisons pendantes. Leur charge peut être négative ou positive . Elle est donnée par les deux occupations f_{db}^+ et f_{db}^- (voir Tableau B.1 et paragraphe B.3.1)
$E_{vbt} > E > E_{TSp}$:	centres de recombinaison de la queue de bande de valence. Leur charge est positive et donnée par les deux occupations f_{Bh}^+ et f_{Bh}^+ (voir Tableau B.1 et paragraphe B.3.3)
$E_{TSp} > E$:	pièges de trous de la queue de bande de valence. Pas de contribution à la recombinaison. Ils agissent comme charge positive donnée par l'occupation $f_{Bh}^+ \gg f_{Bh}^+$, f_{Bh}^+ est une statistique de Boltzmann en E_{fp}

Conditions sur la validité du tableau B.4

- L'intensité de la lumière doit être suffisante pour que E_{TSn} et E_{TSp} soient respectivement dans la queue de bande de conduction et dans la queue de bande de valence. Cette condition sur l'intensité de la lumière se juge avec les expressions de E_{TSn} et E_{TSp} donnée en Eq.(B.10a) (la distance $E_{TSn} - E_{TSp} > E_{fn} - E_{fp}$ est directement reliées aux densités volumiques des électrons libres et des trous libres par Eq.(B.3)).
- Les niveaux E_{TSn} et E_{TSp} n'ont de sens comme niveaux caractéristiques des états localisés que si l'on admet, pour E_{TSn} : $\frac{\sigma_n^{Be}}{\sigma_p^{Be}}$ indépendant de E , et de même pour les sections efficaces de capture de la queue de bande de valence.

pour E_{TSp} : $\frac{\sigma_n^{Bh}}{\sigma_p^{Bh}}$ indépendant de E. Sans cette hypothèse E_{TSn} et E_{TSp} serait

des fonctions du niveau d'énergie E et on aurait des niveaux de démarcation différents pour chaque niveau des états localisés.

- f_{Be}^- et f_{Bh}^+ sont des statistiques de Boltzmann pour les pièges, bien entendu pour autant que E_{TSn} et E_{TSp} soient suffisamment éloignés respectivement de E_c et E_v , en prenant l'énergie thermique à température ambiante $kT=26\text{ meV}$ comme critère de comparaison (je ne m'occupe pas des cas dégénérés).

Remarques:

- Les conditions sur la validité du tableau B.4 mettent en jeu deux conditions opposées sur l'intensité de la lumière:

condition de limite inférieure: E_{TSn} et E_{TSp} situés dans les queues de bande

condition de limite supérieure: E_{TSn} suffisamment inférieur à E_c

E_{TSp} suffisamment supérieur à E_v

On peut juger de la compatibilité de ces deux conditions avec la figure B.2 représentant la DOS (avec l'énergie thermique à température ambiante $kT=26\text{meV}$ comme critère de comparaison des distances).

- Si l'intensité de la lumière est assez faible pour que E_{TSn} et E_{TSp} soient situés dans les états des liaisons pendantes, où la valeur des sections efficaces de capture diffèrent selon l'occupation de l'état, alors E_{TSn} et E_{TSp} ne représentent plus les niveaux de démarcation séparant les pièges des centres de recombinaison. On peut "sentir" que, dans cette situation, on aura non plus deux niveaux de démarcation mais **quatre niveaux de démarcation**, allant deux par deux (deux pour les électrons et deux pour les trous).

- La condition sur les rapports des sections efficaces de capture: $\frac{\sigma_n^{Be}}{\sigma_p^{Be}}$ et $\frac{\sigma_n^{Bh}}{\sigma_p^{Bh}}$

indépendant de E, est nécessaire pour que les définitions de E_{TSn} et E_{TSp} aient un sens en tant que points caractéristiques de la DOS, pour une illumination donnée. En réalité ces rapports varient avec le niveau d'énergie. Je procède par zone: à l'intérieur de chacune des 5 zones de la DOS selon la classification du Tableau B.4 les rapports des sections efficaces de capture sont admis constants de E, mais j'admets des valeurs différentes de ces rapports selon la zone considérée.

B.3. Fonctions de recombinaison et expressions des charges électriques pour les états localisés

Les développements de ce chapitre reposent sur la classification du tableau B.4 donnée au paragraphe B.2.2

Les résultats concernant les liaisons pendantes ont été publiés dans Hubin, Shah, Sauvain (1992).

Les résultats principaux de ce chapitre sont résumés dans les Tableaux B.7 et B.8

B.3.1. Centres de recombinaison par les liaisons pendantes

Les états des liaisons pendantes ne sont considérés ici qu'en tant que centres de recombinaison selon la définition donnée au paragraphe B.2.2. Je calcule la recombinaison et la charge électrique de ces états sur la base de trois hypothèses.

Tableau B.5: Hypothèses de calcul des centres de recombinaison par les liaisons pendantes:

- a) l'équilibre stationnaire est réalisé pour chaque niveau d'énergie.
- b) les émissions thermiques sont négligées, c'est à dire que les niveaux de démarcation E_{TSn} et E_{TSp} sont situés en dehors des états des liaisons pendantes (condition d'illumination suffisante)
- c) les sections efficaces de capture des porteurs libres sont admises indépendantes du niveau d'énergie dans l'intervalle d'énergie des états des liaisons pendantes.

Deux chemins de recombinaison:

La cinétique de recombinaison par un état ayant trois conditions d'occupation s'effectue par deux chemins (e est un électron libre et h est un trou libre) (voir figure B.8):

1 ^{er} chemin:	$D^0 + h \rightarrow D^+$	taux de la transition:	r_c^0
	$D^+ + e \rightarrow D^0$	" " "	r_a^+
2 ^{iem} chemin:	$D^0 + e \rightarrow D^-$	" " "	r_a^0
	$D^- + h \rightarrow D^0$	" " "	r_c^-

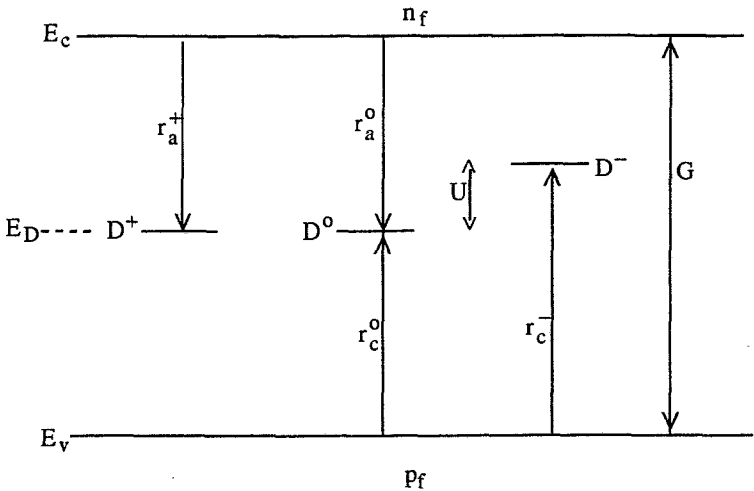


Figure B.8: captures des porteurs libres par un état des liaisons pendantes au niveau E_D , avec trois conditions d'occupation (D^+ , D^0 , D^-). Malgré le décalage de D^- sur l'échelle des niveaux d'énergie par l'énergie de corrélation U , les trois conditions (D^+ , D^0 , D^-) représentent un seul état. G est la photogénération interbande des porteurs libres. r_a^+ , r_a^0 , r_c^0 , r_c^- sont les taux de capture.

Taux de capture pour les états au niveau $E=E_D$ avec une densité d'état $N_D(E_D)$:

$$\begin{aligned}
 r_a^+ &= v_{th} \sigma_n^+ n_f f_{db}^+ N_D(E_D) \\
 r_a^0 &= v_{th} \sigma_n^0 n_f f_{db}^0 N_D(E_D) \\
 r_c^0 &= v_{th} \sigma_p^0 p_f f_{db}^0 N_D(E_D) \\
 r_c^- &= v_{th} \sigma_p^- p_f f_{db}^- N_D(E_D)
 \end{aligned}
 \tag{B.24}$$

σ_n^+ , σ_n^0 , σ_p^0 , σ_p^- sont les sections efficaces de capture. f_{db}^+ , f_{db}^0 et f_{db}^- sont les fonctions d'occupation associées aux D^+ , D^0 et D^- , avec:

$$f_{db}^+ + f_{db}^0 + f_{db}^- = 1$$

Les distributions en énergie des liaisons pendantes dans les conditions d'ionization positive, neutre et négative sont données par:

$$\begin{aligned}
 N_{D^+}(E_D) &= f_{db}^+(E_D) N_D(E_D) \\
 N_{D^0}(E_D) &= f_{db}^0(E_D) N_D(E_D) \\
 N_{D^-}(E_D + U) &= f_{db}^-(E_D + U) N_D(E_D)
 \end{aligned}
 \tag{B.25}$$

$$\text{avec: } N_D(E_D) = N_{D^+}(E_D) + N_{D^0}(E_D) + N_{D^-}(E_D + U)$$

Equilibre stationnaire pour un niveau E_D :

$$\begin{aligned}
 \frac{d N_{D^+}}{dt} = r_c^0 - r_c^+ = 0 &\Rightarrow r_c^0 = r_a^+ \\
 \frac{d N_{D^-}}{dt} = r_a^0 - r_c^- = 0 &\Rightarrow r_c^- = r_a^0 \\
 \text{(et } \frac{d N_{D^0}}{dt} = -\frac{d N_{D^+}}{dt} - \frac{d N_{D^-}}{dt} \text{)}
 \end{aligned}
 \tag{B.26}$$

Des équations (B.24) et (B.26) on obtient les fonctions d'occupation.

Fonctions d'occupation des liaisons pendantes:

$$f_{db}^+ = \frac{\frac{p_f \sigma_p^0}{n_f \sigma_n^+}}{\frac{p_f \sigma_p^0}{n_f \sigma_n^+} + 1 + \frac{n_f \sigma_n^0}{p_f \sigma_p^-}}, \quad f_{db}^- = \frac{\frac{n_f \sigma_n^0}{p_f \sigma_p^-}}{\frac{p_f \sigma_p^0}{n_f \sigma_n^+} + 1 + \frac{n_f \sigma_n^0}{p_f \sigma_p^-}} \quad (\text{B.27})$$

$$f_{db}^0 = \frac{1}{\frac{p_f \sigma_p^0}{n_f \sigma_n^+} + 1 + \frac{n_f \sigma_n^0}{p_f \sigma_p^-}}$$

Remarques:

- f_{db}^+, f_{db}^0 et f_{db}^- ne dépendent que des rapports de sections efficaces de capture neutre à chargé (σ_p^0/σ_n^+ et σ_n^0/σ_p^-) et des rapports des porteurs libres n_f/p_f .
- f_{db}^+, f_{db}^0 et f_{db}^- sont indépendantes du niveau d'énergie E_D et de U , si on admet que σ_p^0/σ_n^+ et σ_n^0/σ_p^- ne sont pas fonction de E_D

(ce résultat tient aux hypothèses a) et b) du tableau B.5)

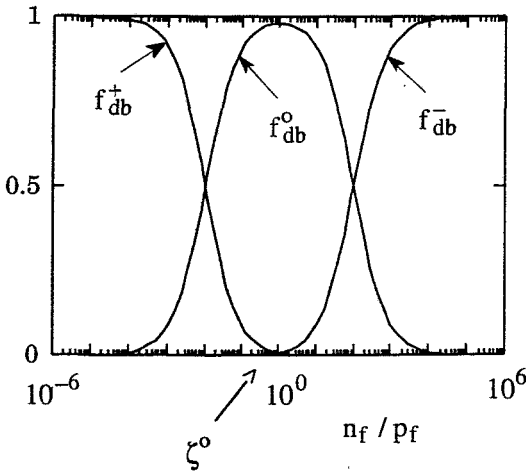


Figure B.9: fonctions d'occupation f_{db}^+ , f_{db}^0 et f_{db}^- des liaisons pendantes, représentées en fonction du rapport des porteurs libres n_f/p_f .

Pour $\sigma_n^0 = \sigma_p^0$ et $\sigma_n^+ = \sigma_p^-$, avec $\sigma_p^0/\sigma_n^+ = \sigma_n^0/\sigma_p^- = 10^{-2}$.

Le maximum de f_{db}^0 se trouve en $\zeta^0 = \sqrt{\sigma_p^0 \sigma_p^- / \sigma_n^0 \sigma_n^+}$

On distingue trois zones: $f_{db}^+ + f_{db}^0 = 1$ et $f_{db}^- = 0$ pour $n_f/p_f \ll \zeta^0$

$f_{db}^0 = 1 \gg f_{db}^+ = f_{db}^-$ pour $n_f/p_f = \zeta^0$

$f_{db}^- + f_{db}^0 = 1$ et $f_{db}^+ = 0$ pour $n_f/p_f \gg \zeta^0$

(voir hiérarchie des sections efficace de capture (Eq.(B.33)) et les 5 situations remarquables au paragraphe B.3.2)

Calcul de la fonction de recombinaison R_{DB}

La condition d'équilibre stationnaire (Eq.(B.26)) montre que le taux total d'électrons libres capturés est égal au taux total de trous libres capturés, ce taux est la recombinaison:

$$R_{DB} = \int_{E_D} (r_a^+ + r_a^0) dE_D = \int_{E_D} (r_c^0 + r_c^-) dE_D \quad (B.28)$$

L'intégrale porte sur tous les niveaux (E_D) des liaisons pendantes. Avec les trois hypothèses du tableau B.5 et leurs implications sur les fonctions d'occupation (voir remarques après Eq.(B.27), seule la densité d'état des liaisons pendantes $N_D(E_D)$ dépend de E_D .

Densité totale des liaisons pendantes:

$$N_{DB} = \int_{E_D} N_D dE_D \quad (\text{B.29a})$$

Définition des temps de capture:

$$\begin{aligned} \tau_n^+ &= (v_{th} \sigma_n^+ N_{DB})^{-1}, & \tau_n^0 &= (v_{th} \sigma_n^0 N_{DB})^{-1} \\ \tau_p^- &= (v_{th} \sigma_p^- N_{DB})^{-1}, & \tau_p^0 &= (v_{th} \sigma_p^0 N_{DB})^{-1} \end{aligned} \quad (\text{B.29b})$$

La fonction de recombinaison (Eq.(B.28)) devient avec Eq.(B.29 a,b):

$$\begin{aligned} R_{DB} &= \int_{E_D} r_a^+ + r_a^0 = n_f \left(\frac{f_{db}^+}{\tau_n^+} + \frac{f_{db}^0}{\tau_n^0} \right) = \int_{E_D} r_c^0 + r_c^- = p_f \left(\frac{f_{db}^0}{\tau_p^0} + \frac{f_{db}^-}{\tau_p^-} \right) \\ &= \frac{\frac{n_f}{\tau_n^0} + \frac{p_f}{\tau_p^0}}{\frac{p_f}{n_f} \frac{\tau_n^+}{\tau_n^0} + 1 + \frac{n_f}{p_f} \frac{\tau_p^-}{\tau_n^0}} \end{aligned} \quad (\text{B.30})$$

Densités volumiques des charges des liaisons pendantes (ρ_{DB}^+ et ρ_{DB}^-):

Avec Eq.(B.25) et les implications 3 hypothèses a), b), c) du tableau B.5 sur les fonctions d'occupations (voir remarques après Eq.(B.27), il vient:

$$\begin{aligned} \rho_{DB}^+ &= \int_{E_D} N_{D^+} dE = f_{db}^+ N_{DB} \\ \rho_{DB}^- &= \int_{E_D} N_{D^-} dE = f_{db}^- N_{DB} \end{aligned} \quad (\text{B.31})$$

Par Eq.(B.31), l'étude des fonctions d'occupation caractérise les densités volumiques des charges.

Remarques

- L'énergie de corrélation U et la forme particulière de la densité des états des liaisons pendantes $N_D(E_D)$ n'interviennent pas dans les résultats (ni dans la fonction de recombinaison ni dans les expressions des densités de charges).

Cela est dû aux trois hypothèses de calcul données dans le tableau B.5 (l'énergie de corrélation U intervient tout de même implicitement dans les rapports des sections efficaces de capture chargé à neutre $\frac{\sigma_p^-}{\sigma_n^0}$ et $\frac{\sigma_n^+}{\sigma_p^0}$, voir hiérarchie des

sections efficaces de capture Eq.(B.33) au paragraphe B.3.2)

- Les rapports de temps de capture sont donnés par les rapports de sections efficaces de capture $\sigma_p^0/\sigma_n^+ = \tau_n^+/\tau_p^0$ et $\sigma_n^0/\sigma_p^- = \tau_p^-/\tau_n^0$. On peut ainsi exprimer les fonctions d'occupation (Eq.B.27) avec les rapports des temps de capture.

B.3.2. Tableau (B.7) des situations "remarquables" des résultats pour les liaisons pendantes et comparaison avec la théorie de Shockley-Read-Hall (SRH)

La recombinaison de Shockley-Read-Hall s'effectue sur un état localisé avec seulement deux conditions d'occupation (et un seul chemin de recombinaison), comme le résume la Figure B.10.

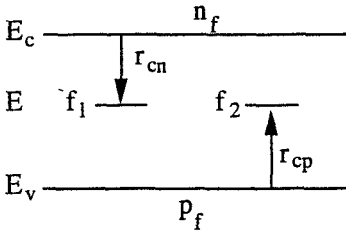


Figure B.10: Captures des porteurs libres par un état localisé au niveau E avec deux conditions d'occupation.

f_1 : probabilité de l'état d'être inoccupé

f_2 : probabilité de l'état d'être occupé par un électron

avec $f_1 + f_2 = 1$

Les deux temps de capture sont reliés aux deux sections efficaces de capture (l'une pour les électrons libres et l'autre pour les trous libres) par $\tau_n = (v_{th}\sigma_n N_s)^{-1}$ et $\tau_p = (v_{th}\sigma_p N_s)^{-1}$.

La condition d'équilibre stationnaire ($r_{cn} = r_{cp}$) fournit la fonction de recombinaison:

$$R_{SRH} \equiv \left[r_{cn} = \frac{n f_1}{\tau_n} = r_{cp} = \frac{p f_2}{\tau_p} \right] = \frac{n_f p_f}{n_f \tau_p + p_f \tau_n} \quad (B.32)$$

Selon les valeurs démarquées des fonctions d'occupation ($f_1 \approx 1$ ou $f_2 \approx 1$), R_{SRH} prend les deux formes simplifiées du tableau suivant:

Tableau B.6: recombinaison par un état localisé avec deux conditions d'occupation

$r_{cn} = r_{cp}$ $R_{SRH} = \frac{n_f f_1}{\tau_n} = \frac{p_f f_2}{\tau_p}$ avec $f_1 + f_2 = 1$			
$f_1 \approx 1 \gg f_2$	$R_{SRH} = \frac{n_f}{\tau_n}$	$f_2 \approx 1 \gg f_1$	$R_{SRH} = \frac{p_f}{\tau_p}$
électrons libres minoritaires $\frac{n_f}{p_f} \ll \frac{\tau_n}{\tau_p}$		trous libres minoritaires $\frac{n_f}{p_f} \gg \frac{\tau_n}{\tau_p}$	

La recombinaison par un état ayant trois conditions d'occupation s'effectue par deux chemins (voir paragraphe B.3.1), avec 4 temps de capture associés à 4 sections efficaces de capture (Eq.B.(29b)).

Hierarchie des sections efficaces et des temps de capture

En principe, par effet d'attraction coulombique, les valeurs des sections efficaces de capture diffèrent selon l'occupation du centre. Cet effet peut être masqué par la relaxation du réseau: c'est le cas pour les queues de bande (voir l'hypothèse faite en Eq.B.13, paragraphe B.2.2). J'admettrai pour les liaisons pendantes la hiérarchie suivante sur les valeurs des sections efficaces de capture:

$$\sigma_n^+ \gg \sigma_n^0 \quad \text{et} \quad \sigma_p^- \gg \sigma_p^0$$

Elle conduit à:

$$\frac{\sigma_p^0}{\sigma_n^+} \ll \frac{\sigma_p^0}{\sigma_n^0} \ll \frac{\sigma_p^-}{\sigma_n^0} \quad \text{et} \quad \frac{\tau_n^+}{\tau_p^0} \ll \frac{\tau_n^0}{\tau_p^0} \ll \frac{\tau_n^0}{\tau_p^-} \quad (\text{B.33})$$

Dans la littérature, cette hiérarchie est sujette à beaucoup de controverse. Street (1982), Street, Zesch et Thompson (1983) reportent $\sigma^\pm / \sigma^0 \approx 3$ à 5, Henry et Lang (1977) admettent que ce rapport peut être jusqu'à $\sigma^\pm / \sigma^0 \approx 10^3$, Spear, Steemers, Le Comber et Gibson (1984) donnent $\sigma_n^+ / \sigma_n^0 \geq 30$ (mais $\sigma_p^- / \sigma_p^0 < 1$!?!), Wyrsh et Shah (1991) obtiennent $\sigma_n^+ / \sigma_n^0 \approx 100$, Vaillant et Jousse (1986) prennent $\sigma^\pm / \sigma^0 \approx 5$ à 50. Pour mon travail, on verra au chapitre C.3 que les implications, sur la recombinaison par les états des liaisons pendantes (Tableau B.7), de cette hiérarchie (Eq.(B.33)) est essentielle

pour comprendre les mesures de photoconductivité et de transport ambipolaire: il s'agit donc d'une vérification expérimentale de Eq.(B.33). J'obtiendrai par comparaison entre théorie et mesure les valeurs suivantes: $\sigma_n^+ / \sigma_n^0 \approx 100$ et $\sigma_p^- / \sigma_p^0 \approx 13$ à 25.

Importance relative des deux chemins de recombinaison:

L'importance relative des deux chemins de recombinaison à l'équilibre stationnaire (Eq.B.26) s'obtient à partir des équations (B.24) et (B.27):

$$\frac{\text{taux du 1}^{\text{ier}} \text{ chemin}}{\text{taux du 2}^{\text{ième}} \text{ chemin}} = \frac{r_a^+}{r_a^0} = \frac{r_c^0}{r_c^-} = \frac{p_f \sigma_p^0}{n_f \sigma_n^0} = \frac{p_f \tau_n^0}{n_f \tau_p^0} \quad (\text{B.34})$$

L'équilibre stationnaire (Eq.B.26) montre aussi que (par Eq.B.24):

$$\frac{r_a^+}{r_a^0} = \frac{r_c^0}{r_c^-} \rightarrow \frac{f_{db}^+ \tau_n^0}{f_{db}^0 \tau_n^+} = \frac{f_{db}^0 \tau_p^-}{f_{db}^- \tau_p^0} \rightarrow \frac{f_{db}^+ f_{db}^-}{(f_{db}^0)^2} = \frac{\tau_n^+ \tau_p^-}{\tau_n^0 \tau_p^0} \quad (\text{B.35})$$

Selon la hiérarchie des temps de capture (Eq.B.33), on a donc:

$$\frac{f_{db}^+ f_{db}^-}{(f_{db}^0)^2} \ll 1 \quad (\text{B.36})$$

5 situations remarquables:

La condition Eq.(B.36) et Eq.(B.34) permet de démarquer les 5 situations "remarquables" suivantes (comparer avec la Figure B.9):

$$\left. \begin{array}{l} 1) f_{db}^+ \gg f_{db}^0 \gg f_{db}^- \\ 2) f_{db}^0 \gg f_{db}^+ \gg f_{db}^- \\ 3) f_{db}^0 \gg f_{db}^+ = f_{db}^- \\ 4) f_{db}^0 \gg f_{db}^- \gg f_{db}^+ \\ 5) f_{db}^- \gg f_{db}^0 \gg f_{db}^+ \end{array} \right\} \begin{array}{l} \frac{r_a^+}{r_a^0} = \frac{r_c^0}{r_c^-} \gg 1 \quad \left(\frac{n_f}{p_f} \ll \frac{\tau_n^0}{\tau_p^0} \right) \\ \frac{r_a^+}{r_a^0} = \frac{r_c^0}{r_c^-} \approx 1 \quad \left(\frac{n_f}{p_f} \approx \frac{\tau_n^0}{\tau_p^0} \right) \\ \frac{r_a^+}{r_a^0} = \frac{r_c^0}{r_c^-} \ll 1 \quad \left(\frac{n_f}{p_f} \gg \frac{\tau_n^0}{\tau_p^0} \right) \end{array} \quad (\text{B.37})$$

La hiérarchie des temps de capture Eq.(B.33) donnant la condition Eq.(B.36) exclut la situation $\{f_{db}^+ \text{ et } f_{db}^-\} > f_{db}^0$ et donc exclut les deux situations "remarquables"

$$\left\{ \begin{array}{l} f_{db}^+ \gg f_{db}^- \gg f_{db}^0 \\ f_{db}^- \gg f_{db}^+ \gg f_{db}^0 \end{array} \right\}.$$

Dominance d'un des deux chemins de recombinaison sur l'autre et importance de la hiérarchie des sections efficaces de capture Eq.(B.33):

Le Tableau B.7 montre la complication de la recombinaison de SRH (avec un seul chemin de recombinaison: Tableau B.6), lorsque l'on tient compte des 3 conditions d'occupation avec 2 chemins de recombinaison. Lorsque l'un des deux chemins domine sur l'autre, la situation est ramenée à une recombinaison de SRH mais décentrée:

- 1^{ier} chemin domine --> recombinaison de SRH centrée en $\frac{n_f}{p_f} = \frac{\tau_n^+}{\tau_p^0}$

$$f_{db}^+ = f_{db}^0 (>> f_{db}^-): \text{ pour } \frac{n_f}{p_f} = \frac{\tau_n^+}{\tau_p^0}$$

- 2^{ième} chemin domine --> recombinaison de SRH centrée en $\frac{n_f}{p_f} = \frac{\tau_n^0}{\tau_p^-}$

$$f_{db}^- = f_{db}^0 (>> f_{db}^+): \text{ pour } \frac{n_f}{p_f} = \frac{\tau_n^0}{\tau_p^-}$$

- 1^{ier} chemin \approx 2^{ième} chemin: le système ne se ramène plus à une théorie SRH.

On voit l'importance de la hiérarchie des temps de capture Eq.(B.33), et donc la séparation nette des centres de dominance des deux chemins de recombinaison, ainsi que la séparation nette des "5 situations remarquables" (Eq.(B.37)) données au tableau B.7.

Le tableau B.7 donne les expressions simplifiées, correspondantes aux 5 situations remarquables Eq.(B.37), de la fonction de recombinaison R_{DB} et des densités volumiques de charges ρ_{DB}^+ et ρ_{DB}^- . Les équations B.27 et B.30 montrent que ces simplifications reposent sur la comparaison du rapport n_f/p_f avec les rapports des temps de capture

$$\frac{\tau_n^+}{\tau_p^0}, \frac{\tau_n^0}{\tau_p^-} \text{ et } \frac{\tau_n^-}{\tau_p^+}.$$

Remarques:

- Dans le but de ne pas alourdir la lecture du tableau B.7, j'ai adopté la notation f^+ , f^- et f^0 pour les fonctions d'occupation des états des liaisons pendantes.
- Dans le chapitre C.3, j'associerai les 5 situations remarquables du tableau B.7 à des conditions de dopages et de dégradation du matériau. Le **micro-dopage** de type n et p permet effectivement de varier le rapport des porteurs libres

$\frac{n_f}{P_f}$, pour une couche uniforme et malgré la condition d'illumination, sur la plage des 5 situations remarquables (voir Sauvain (1992) et chapitre C.3, paragraphe C.3.3).

Tableau B.7: Situations "remarquables" pour les liaisons pendantes et expressions simplifiées de R_{DB} , ρ_{DB}^+ et $\bar{\rho}_{DB}$.

1 ^{er} chemin dominant	1 ^{er} chemin de l'ordre du 2 ^{em} chemin	2 ^{em} chemin dominant
$R_{DB} \approx r_a^+ = r_c^0 \gg r_a^0 = r_c^-$ $R_{DB} \approx \frac{n_f f^+}{\tau_n^+} = \frac{p_f f^0}{\tau_p^0}$ $f^+ + f^0 \approx 1 \quad (> f^- \approx 0)$	$r_a^+ = r_c^0 \approx r_a^0 = r_c^-$ $R_{DB} = r_a^0 + r_c^0 = -\frac{n_f f^0}{\tau_n^0} + \frac{p_f f^0}{\tau_p^0}$ $f^0 \approx 1 \gg f^+ \approx f^-$	$R_{DB} \approx r_a^0 = r_c^0 \gg r_a^+ = r_c^-$ $R_{DB} \approx \frac{n_f f^0}{\tau_n^0} = \frac{p_f f^-}{\tau_p^-}$ $f^- + f^0 \approx 1 \quad (> f^+ \approx 0)$
$f^+ \approx 1 \gg f^0$ $R_{DB} \approx \frac{n_f}{\tau_n^+}$ $\rho_{DB}^+ \gg \bar{\rho}_{DB}$ $\rho_{DB}^+ \approx N_{DB}$ $\bar{\rho}_{DB} = 0$	$f^0 \approx 1 \gg f^+$ $R_{DB} \approx \frac{p_f}{\tau_p^0} + \frac{p_f}{\tau_p^0}$ $\rho_{DB}^+ \approx \bar{\rho}_{DB}$ $\rho_{DB}^+ \approx \frac{\tau_n^+ p_f}{\tau_p^0 n_f} N_{DB}$ $\bar{\rho}_{DB} \approx \frac{\tau_p^- n_f}{\tau_n^0 p_f} N_{DB}$	$f^- \approx 1 \gg f^0$ $R_{DB} \approx \frac{n_f}{\tau_n^0}$ $\bar{\rho}_{DB} \gg \rho_{DB}^+$ $\bar{\rho}_{DB} \approx 0$ $\bar{\rho}_{DB} \approx N_{DB}$
$\frac{n_f}{p_f} \ll \frac{\tau_n^+}{\tau_p^0}$ cas 1)	$\frac{n_f}{p_f} \ll \frac{n_f}{p_f} \ll \frac{\tau_n^0}{\tau_p^0}$ cas 2)	$\frac{n_f}{p_f} \gg \frac{\tau_n^0}{\tau_p^-}$ cas 5)
$\frac{n_f}{p_f} \ll \frac{\tau_n^+}{\tau_p^0}$ cas 3)	$\frac{\tau_n^0}{\tau_p^0} \ll \frac{n_f}{p_f} \ll \frac{\tau_n^0}{\tau_p^0}$ cas 4)	$\frac{n_f}{p_f} \ll \frac{\tau_n^0}{\tau_p^-}$ cas 4)

B.3.3. Centres de recombinaison des queues de bande

Avertissement:

Le développement de ce présent paragraphe n'interviendra pas dans la deuxième partie de ma thèse (partie C). Les mesures de Sauvain (1992) s'interprètent en ne considérant que les liaisons pendantes pour la recombinaison, c'est à dire que les conditions de mesures sont telles que l'effet de la recombinaison dans les queues de bande est négligeable devant l'effet de la recombinaison par les liaisons pendantes (voir Tableau C.2 au début du chapitre C.3, et discussion au début du paragraphes C.3.4) Je donne néanmoins cette analyse dans un souci de complétude sur la division en zones de la DOS du a-Si:H présentée au paragraphe B.2.2. Le lecteur non-intéressé pourra sauter ce paragraphe.

Le calcul et les hypothèses sont formellement les mêmes que pour les centres de recombinaison des états des liaisons pendantes (paragraphe B.3.1). Je me réfère donc au tableau B.5: les sections efficaces de capture seront admises constantes dans les intervalles d'énergie $[E_{cbt}, E_{TSn}]$ pour la queue de bande de conduction et $[E_{TSp}, E_{vbt}]$ pour la queue de bande de valence (classification Tableau B.4). Mais des valeurs différentes sont à prendre selon qu'il s'agisse de la queue de bande de conduction ou de la queue de bande de valence (ou des états des liaisons pendantes).

Centres de recombinaison de la queue de bande de conduction

La figure B.6 du paragraphe B.2.2 donnent les transitions pour un état de la queue de bande de conduction. Je me base sur cette figure, mais en y supprimant les émissions thermiques, c'est à dire que je ne conserve que les captures de porteur libre, selon la définition des centres de recombinaison du paragraphe B.2.2.

Pour le calcul de la fonction de recombinaison, on peut reprendre les résultats obtenus pour les liaisons pendantes en faisant les substitutions suivantes:

$$\left\{ \begin{array}{l} \sigma_n^0, \sigma_n^+ \rightarrow \sigma_n^{Be} \\ \sigma_p^0, \sigma_p^- \rightarrow \sigma_p^{Be} \end{array} \right\} \quad \left\{ \begin{array}{l} f_{db}^+ \rightarrow f_{Be}^0 \\ f_{db}^0 \rightarrow f_{Be}^- \\ f_{db}^- \rightarrow f_{Be}^- \end{array} \right\}$$

$$\text{et } N_{\text{DB}} \rightarrow N_{\text{Rcbt}} = \int_{E_{\text{cbt}}}^{E_{\text{Tsn}}} N_{\text{CBT}}(E) dE \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{densité volumique} \\ \text{des centres} \\ \text{de recombinaison} \\ \text{de la queue de conduction} \end{array} \right. \quad (\text{B.38})$$

On obtient:

Fonctions d'occupation (de Eq.(B.27)):

$$f_{\text{Be}}^{\text{p}} = \frac{\frac{p_f \sigma_p^{\text{Be}}}{n_f \sigma_n^{\text{Be}}}}{\frac{p_f \sigma_p^{\text{Be}}}{n_f \sigma_n^{\text{Be}}} + 1 + \frac{n_f \sigma_n^{\text{Be}}}{p_f \sigma_p^{\text{Be}}}} \quad f_{\text{Be}}^{\text{n}} = \frac{1}{\frac{p_f \sigma_p^{\text{Be}}}{n_f \sigma_n^{\text{Be}}} + 1 + \frac{n_f \sigma_n^{\text{Be}}}{p_f \sigma_p^{\text{Be}}}} \quad (\text{B.39})$$

$$f_{\text{Be}}^{\text{p}} = \frac{\frac{n_f \sigma_n^{\text{Be}}}{p_f \sigma_p^{\text{Be}}}}{\frac{p_f \sigma_p^{\text{Be}}}{n_f \sigma_n^{\text{Be}}} + 1 + \frac{n_f \sigma_n^{\text{Be}}}{p_f \sigma_p^{\text{Be}}}}$$

Fonction de recombinaison (de Eq.(B.30)):

$$R_{\text{DB}} \rightarrow R_{\text{cbt}} = \frac{\frac{n_f}{\tau_n^{\text{Be}}} + \frac{p_f}{\tau_p^{\text{Be}}}}{\frac{p_f \tau_n^{\text{Be}}}{n_f \tau_p^{\text{Be}}} + 1 + \frac{n_f \tau_p^{\text{Be}}}{p_f \tau_n^{\text{Be}}}} \quad (\text{B.40})$$

avec les temps de capture analogiquement à Eq.(B.29b):

$$\tau_n^{\text{Be}} = (v_{\text{th}} \sigma_n^{\text{Be}} N_{\text{Rcbt}})^{-1} \quad \text{et} \quad \tau_p^{\text{Be}} = (v_{\text{th}} \sigma_p^{\text{Be}} N_{\text{Rcbt}})^{-1}$$

et par Eq.(B.38) et Eq.(B.2)

$$N_{\text{Rcbt}}(n_f, p_f) = N_{\text{cvt}} E_c^0 \left[\left(\frac{\sigma_n^{\text{Be}} n_f + \sigma_p^{\text{Be}} p_f}{\sigma_n^{\text{Be}} n_f} \right)^{\frac{kT}{E_c^0}} \left(\frac{n_f}{N_c} \right)^{\frac{kT}{E_c^0}} - \left(\exp\left(\frac{E_{\text{cvt}} - E_c}{kT}\right) \right)^{\frac{kT}{E_c^0}} \right] \quad (\text{B.41})$$

Densité volumique de charge:

$$\begin{aligned}
 \bar{\rho}_{Rcvt} &= (f_{Be}^- + 2f_{Be}^-) N_{Rcvt} \\
 &= \frac{1 + 2 \frac{n_f \tau_p^{Be}}{p_f \tau_n^{Be}}}{\frac{p_f \tau_n^{Be}}{n_f \tau_p^{Be}} + 1 + \frac{n_f \tau_p^{Be}}{p_f \tau_n^{Be}}} N_{Rcvt}
 \end{aligned} \tag{B.42}$$

Centres de recombinaison de la queue de bande de valence

La figure B.7 donne les transitions pour les états de la queue de bande de valence, on y supprimera les transitions correspondant aux émissions thermiques. Le calcul et les résultats sont symétriques à ceux pour la queue de bande de conduction. Il suffit de reprendre les résultats pour la queue de bande de conduction en y substituant les sections efficaces de la queue de bande de valence, en substituant $\{p_f \rightarrow n_f, n_f \rightarrow p_f\}$, et en prenant pour les limites de l'intégrale des centres de recombinaison les paramètres propres aux centres de recombinaison de la queue de bande de valence (limite inférieure: niveau de démarcation E_{TSp} , et limite supérieure: fin de la queue de bande E_{vbt}).

On obtient:

fonctions d'occupation:

$$\begin{aligned}
 f_{Bh}^0 &= \frac{\frac{n_f \sigma_n^{Bh}}{p_f \sigma_p^{Bh}}}{\frac{p_f \sigma_p^{Bh}}{n_f \sigma_n^{Bh}} + 1 + \frac{n_f \sigma_n^{Bh}}{p_f \sigma_p^{Bh}}} & f_{Bh}^+ &= \frac{1}{\frac{p_f \sigma_p^{Bh}}{n_f \sigma_n^{Bh}} + 1 + \frac{n_f \sigma_n^{Bh}}{p_f \sigma_p^{Bh}}} \\
 f_{Bh}^{++} &= \frac{\frac{p_f \sigma_p^{Bh}}{n_f \sigma_n^{Bh}}}{\frac{p_f \sigma_p^{Bh}}{n_f \sigma_n^{Bh}} + 1 + \frac{n_f \sigma_n^{Bh}}{p_f \sigma_p^{Bh}}}
 \end{aligned} \tag{B.43}$$

Fonction de recombinaison

$$R_{vbt} = \frac{\frac{n_f}{\tau_n^{Bh}} + \frac{p_f}{\tau_p^{Bh}}}{\frac{p_f \tau_n^{Bh}}{n_f \tau_p^{Bh}} + 1 + \frac{n_f \tau_p^{Bh}}{p_f \tau_n^{Bh}}} \tag{B.44}$$

$$n_f \tau_n^{Bh} = (\nu_{th} \sigma_p^{Bh} N_{Rvbt})^{-1} \quad \text{et} \quad \tau_p^{Bh} = (\nu_{th} \sigma_n^{Bh} N_{Rvbt})^{-1}$$

et la densité volumique des centres de recombinaison:

$$N_{Rvbt}(n_f, p_f) = N_{vbt} E_v^0 \left[\left(\frac{\sigma_n^{Bh} n_f + \sigma_p^{Bh} p_f}{\sigma_p^{Bh} p_f} \right)^{\frac{kT}{E_v^0}} \left(\frac{p_f}{N_v} \right)^{\frac{kT}{E_v^0}} - \left(\exp\left(\frac{E_v - E_{vbt}}{kT}\right) \right)^{\frac{kT}{E_v^0}} \right] \quad (B.45)$$

Densité volumique de charge:

$$\begin{aligned} \rho_{Rvbt}^+ &= (f_{Bh}^+ + 2f_{Bh}^{++}) N_{Rvbt} \\ &= \frac{1 + 2 \frac{p_f \tau_n^{Bh}}{n_f \tau_p^{Bh}}}{\frac{p_f \tau_n^{Bh}}{n_f \tau_p^{Bh}} + 1 + \frac{n_f \tau_p^{Bh}}{p_f \tau_n^{Bh}}} N_{Rvbt} \end{aligned} \quad (B.46)$$

Remarques:

- Lorsque l'intensité de la lumière augmente les niveaux de démarcation se rapprochent des seuils de mobilité E_c et E_v (voir remarques après Tableau B.3 paragraphe B.2.2): les densités volumiques des centres de recombinaison des queues de bande N_{Rcvt} et N_{Rvbt} augmentent, alors que la densité volumique des liaisons pendantes N_{DB} reste constante. Ainsi les temps de capture des centres de recombinaison des queues de bande diminuent avec l'augmentation de l'intensité de la lumière, alors que les temps de capture des liaisons pendantes restent constants.
- Suite à ce que la relaxation du réseau annule l'effet d'attraction coulombique des centres occupés (donc ionisés) pour les états des queues de bandes, il n'y a plus que deux temps de capture par queue de bande (τ_n^{Be} et τ_p^{Be} pour la queue de bande de conduction et τ_n^{Bh} et τ_p^{Bh} pour la queue de bande de valence), alors que, pour les états des liaisons pendantes, il y a quatre temps de capture.
- Le tableau B.7 des 5 situations remarquables pour les liaisons pendantes n'est pas simplement transcritible pour les résultats des centres de recombinaison des queues de bandes. En effet, la hiérarchie des temps de capture (Eq.(B.33)) pour les liaisons pendantes n'est plus applicable aux temps de capture des centres de recombinaison des queues de bandes. On peut certainement aussi faire un tableau particulier et une comparaison avec la recombinaison de Shockley-Read-Hall, toutefois, les résultats de ce présent paragraphe n'intervenant pas dans la suite de mon travail, je ne m'en occupe pas.

B.3.4. Pièges des queues de bande et Tableau résumé B.8

Je me réfère à la classification du tableau B.4 donnée au paragraphe B.2.2. La charge électrique totale des pièges d'électrons, n_t , et des pièges des trous, p_t , dans les queues de bandes sont obtenues par:

charge des pièges d'électrons

$$n_t = \int_{E_{TSn}}^{E_c} N_{CBT}(E) f_{Be}^-(E) dE \quad (B.47)$$

charge des pièges des trous

$$p_t = \int_{E_v}^{E_{TSp}} N_{VBT}(E) f_{Bh}^+(E) dE \quad (B.48)$$

$N_{CBT}(E)$ et $N_{VBT}(E)$ sont les densités d'états des queues de bande données en Eqs.(B.1 et B.2). f_{Be}^- et f_{Bh}^+ sont les fonctions d'occupation Boltzmanniennes obtenues au paragraphe B.2.2 (Eqs.(B.21 et B.23)) pour décrire les pièges. E_{TSn} et E_{TSp} sont les niveaux de démarcation de Simmons & Taylor présentés également au paragraphe B.2.2 (Eqs.(B.10a)).

On obtient en intégrant Eqs.(B.47 et B.48):

$$n_t(n_f, p_f) = \frac{kT N_{cbt}}{1 - \alpha_n} \left[\left(\frac{\sigma_n^{Be} n_f}{\sigma_n^{Be} n_f + \sigma_p^{Be} p_f} \right)^{1 - \alpha_n} \left(\frac{n_f}{N_c} \right)^{\alpha_n} - \frac{n_f}{N_c} \right] \quad (B.49)$$

$$p_t(n_f, p_f) = \frac{kT N_{vbt}}{1 - \alpha_p} \left[\left(\frac{\sigma_p^{Bh} p_f}{\sigma_n^{Bh} n_f + \sigma_p^{Bh} p_f} \right)^{1 - \alpha_p} \left(\frac{p_f}{N_v} \right)^{\alpha_p} - \frac{p_f}{N_v} \right]$$

Paramètres des queues de bandes

$$\alpha_n = \frac{kT}{E_c^0} \quad \text{et} \quad \alpha_p = \frac{kT}{E_v^0} \quad (B.50)$$

Avec les énergies caractéristiques des queues de bande E_c^0 et E_v^0 .

Remarques:

- J'ai adopté, dans un souci de ne pas créer une inflation des différents symboles (le nombre de symboles différents est déjà très grand), une même notation pour les sections efficaces de capture des pièges des queues de bandes que la notation adoptée pour les centres de recombinaison des queues de bandes, c'est à dire $\sigma_n^{Be}, \sigma_p^{Be}, \sigma_n^{Bh}$ et σ_p^{Bh} . Il est bien entendu que les valeurs de ces sections efficaces de capture sont différentes selon qu'il s'agit de pièges ou qu'il s'agit de centres de recombinaison, et cela au sens de la division de la DOS par zones (voir remarques suivant après le tableau B.4).
- Les charges des pièges dépendent des deux types de porteurs libres, malgré que l'équilibre stationnaire n'implique, pour un piège, qu'un seul type de porteur libre (voir définition des pièges au début du paragraphe B.2.2). Cela provient de ce que les niveaux de démarcation E_{TSn} et E_{TSp} dépendent des deux types de porteurs libres (Eqs.(B.10a)).
- Pour procéder, par exemple, au calcul des pièges de la queue de bande de conduction, j'ai intégré la statistique de Boltzmann avec pour limite inférieur d'intégration E_{TSn} . Or un piège se définit par $E - E_{TSn} \gg kT$ (c'est à dire $e_n^{Be} \gg c_n^{Be} + c_p^{Be}$ Eq.B.(10a)). Ce procédé est d'autant plus valide que e_n^{Be} augmente exponentiellement avec E en comparaison avec c_n^{Be} et c_p^{Be} (voir Eqs.(B.16 et B.17) du paragraphe B.2.2). Une justification analogue tient pour le calcul des pièges de la queue de bande de valence.

A température ambiante, $kT=26$ meV, et $E_c^0 = 30$ meV et $E_v^0 = 50$ meV (voir valeurs numériques typiques au paragraphe B.1.2), on a:

$$\alpha_n=0,8 \quad \text{et} \quad \alpha_p=0.5$$

Hypothèse sur la hiérarchie des sections efficaces de capture pour les pièges:

Le niveau de démarcation E_{TSn} dans la queue de bande de conduction est bien plus proche de la bande de conduction, E_c , que de la bande de valence, E_v . Donc, j'admettrai que la section efficace de capture d'électrons libres sera beaucoup plus grande que la section efficace de capture de trous libres au niveau E_{TSn} .

De même, pour le niveau de démarcation E_{TSp} dans la queue de bande de valence, j'admettrai que la section efficace de capture de trous libres sera beaucoup plus grande que la section efficace de capture d'électrons libres.

$$\sigma_n^{Be} \gg \sigma_p^{Be} \quad \text{et} \quad \sigma_n^{Bh} \ll \sigma_p^{Bh} \quad (\text{B.51})$$

Le Tableau B.8 donne des expressions simplifiées des charges des pièges, p_t et n_t (Eq.(B.49)), se basant sur des comparaisons du rapport n_f/p_f avec les rapports des sections efficaces de capture Eq.(B.51). Ces expressions simplifiées seront utilisées dans l'analyse du chapitre C.3. On remarquera les cas du Tableau B.8 où n_t et p_t ne dépendent plus que d'un seul type de porteur libre: $n_t(n_f)$ et $p_t(p_f)$.

Ces cas correspondent aux cas où les niveaux de démarcation E_{TSn} et E_{TSp} se confondent avec les quasi-niveaux de Fermi des porteurs libres (Eq.(B.10a)).

La page suivante donne le Tableau B.8.

Tableau B.8: Expressions simplifiées des charges des pièges

$P_f \gg n_f$	$P_f > n_f$	$P_f \approx n_f$	$P_f < n_f$	$P_f \ll n_f$
$\sigma_p^{Be} p_f \gg \sigma_n^{Be} n_f$ $\sigma_p^{Bh} p_f \gg \sigma_n^{Bh} n_f$	$\sigma_p^{Be} p_f < \sigma_n^{Be} n_f$ $\sigma_p^{Bh} p_f \gg \sigma_n^{Bh} n_f$	$\sigma_p^{Be} p_f \ll \sigma_n^{Be} n_f$ $\sigma_p^{Bh} p_f \gg \sigma_n^{Bh} n_f$	$\sigma_p^{Be} p_f \ll \sigma_n^{Be} n_f$ $\sigma_p^{Bh} p_f > \sigma_n^{Bh} n_f$	$\sigma_p^{Be} p_f \ll \sigma_n^{Be} n_f$ $\sigma_p^{Bh} p_f \ll \sigma_n^{Bh} n_f$
$p_t(p_f) = \frac{N_{vbt} kT}{1 - \alpha_p} \left(\frac{p_f}{N_v} \right)^{\alpha_p}$	$p_t(p_f) \approx \frac{N_{vbt} kT}{1 - \alpha_p} \left(\frac{p_f}{N_v} \right)^{\alpha_p}$	$p_t(p_f) \approx \frac{N_{vbt} kT}{1 - \alpha_p} \left(\frac{p_f}{N_v} \right)^{\alpha_p}$	$p_t \approx \frac{N_{vbt} kT}{1 - \alpha_p} \left(\frac{p_f}{N_v} \right)^{\alpha_p}$	$p_t \approx \frac{N_{vbt} kT}{1 - \alpha_p} \left(\frac{p_f}{N_v} \right)^{\alpha_p}$
$n_t \approx \frac{N_{cvt} kT}{1 - \alpha_n} \left(\frac{n_f}{N_c} \right)^{\alpha_n}$	$n_t(n_f) \approx \frac{N_{cvt} kT}{1 - \alpha_n} \left(\frac{n_f}{N_c} \right)^{\alpha_n}$	$n_t(n_f) \approx \frac{N_{cvt} kT}{1 - \alpha_n} \left(\frac{n_f}{N_c} \right)^{\alpha_n}$	$n_t(n_f) \approx \frac{N_{cvt} kT}{1 - \alpha_n} \left(\frac{n_f}{N_c} \right)^{\alpha_n}$	$n_t(n_f) \approx \frac{N_{cvt} kT}{1 - \alpha_n} \left(\frac{n_f}{N_c} \right)^{\alpha_n}$

C. Application au transport électronique à température ambiante, en condition stationnaire et sous illumination

C.1. Equations de base admises pour le transport

Les cinq équations indépendantes suivantes pour les cinq fonctions inconnues n_f , p_f , j_n , j_p et E constituent la base pour mon modèle du transport:

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{e} \vec{j}_n &= \mu_n^0 n_f \vec{E} + D_n^0 \vec{\text{grad}}_x(n_f) \\ \frac{1}{e} \vec{j}_p &= \mu_p^0 p_f \vec{E} - D_p^0 \vec{\text{grad}}_x(p_f) \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} 2 \text{ équations des courants} \\ \end{array} \quad (\text{C.1})$$

$$\left. \text{div}_x(\vec{E}) = \frac{e}{\epsilon} \rho_{\text{total}}(n_f, p_f) \right\} \begin{array}{l} 1 \text{ équation du champ} \\ \end{array} \quad (\text{C.2})$$

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial n_f}{\partial t} &= 0 = G(x) - R(n_f, p_f) + \frac{1}{e} \text{div}_x(\vec{j}_n) \\ \frac{\partial p_f}{\partial t} &= 0 = G(x) - R(n_f, p_f) - \frac{1}{e} \text{div}_x(\vec{j}_p) \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} 2 \text{ équations de continuité} \\ \end{array} \quad (\text{C.3})$$

j_n et j_p sont les densités volumiques des courants des électrons libres et des trous libres. E est le champ électrique. ρ_{total} est la densité volumique totale des charges électriques. ϵ est la constante de permisivité diélectrique. D_n^0 et D_p^0 sont les constantes microscopiques

de diffusion des électrons et trous libres. Ces dernières sont reliées aux mobilités de bandes par la relation d'Einstein:

$$D_n^o = \frac{kT}{e} \mu_n^o \quad \text{et} \quad D_p^o = \frac{kT}{e} \mu_p^o \quad (\text{C.4})$$

Les deux équations de courants (C.1) admettent la distinction entre états localisés et états délocalisés introduite au paragraphe B.1.2: seulement les porteurs libres peuvent se déplacer et former le courant.

Admettant un modèle unidimensionnel (x est la variable spatiale) et la condition stationnaire (invariance avec le temps), les opérateurs différentiels gradients ($\vec{\text{grad}}_x$) et divergences (div_x) se résument à la simple dérivée totale selon x :

$$\vec{\text{grad}}_x = \frac{d}{dx} \quad \text{et} \quad \text{div}_x = \frac{d}{dx}$$

Condition stationnaire ($\frac{\partial n_f}{\partial t} = 0$ et $\frac{\partial p_f}{\partial t} = 0$):

Les disparitions et les générations d'électrons et de trous libres se font toujours par paires à l'équilibre stationnaire (voir paragraphe B.2.2). Ainsi, le terme "puit" (R_n) de l'équation de continuité des électrons libres devient égale au terme "puit" (R_p) de l'équation de continuité des trous libres: ces termes s'appellent dès lors fonction de recombinaison R ($=R_n=R_p$). De même les termes "sources" (G_n et G_p) des équations de continuité des électrons et trous libres deviennent égaux entre eux et donnent la fonction de génération G ($=G_n=G_p$).

Le système représenté par les Eqs.(C.1, C.2 et C.3) est excité par: 1) la lumière (G =fonction de photogénération, on néglige la génération thermique), 2) une tension externe appliquée V_{ext} . L'équilibre stationnaire est garanti par $G=G(x)$ = constante du temps et V_{ext} = constante du temps.

A l'équilibre stationnaire, les fonctions de recombinaison et les expressions des charges électriques des états localisés ne sont fonction que des deux types de porteurs libres: $R=R(n_f, p_f)$ et $\rho_{\text{total}}=\rho_{\text{total}}(n_f, p_f)$ (voir chapitre B.3). Ainsi les 5 équations du système (C.1, C.2 et C.3) (plus les conditions aux limites) suffisent pour déterminer les 5 fonctions inconnues du système $n_f(x)$, $p_f(x)$, $j_n(x)$, $j_p(x)$ et $E(x)$.

En principe, la fonction de recombinaison et les expressions des charges électriques des états localisés doivent être données par la somme de toutes les contributions (voir chapitre B.3):

$$R(n_f, p_f) = R_{\text{DB}}(n_f, p_f) + R_{\text{cbt}}(n_f, p_f) + R_{\text{vbt}}(n_f, p_f) \quad (\text{C.5})$$

$$\begin{aligned}
 \rho_{\text{total}}^+(n_f, p_f) &= \rho_{\text{DB}}^+(n_f, p_f) + \rho_{\text{vbt}}^+(n_f, p_f) + p_t(p_f) + p_f \\
 \rho_{\text{total}}^-(n_f, p_f) &= \rho_{\text{DB}}^-(n_f, p_f) + \rho_{\text{cbl}}^-(n_f, p_f) + n_t(p_f) + n_f \\
 \rho_{\text{total}} &= \rho_{\text{total}}^+ - \rho_{\text{total}}^-
 \end{aligned}
 \tag{C.6}$$

Par les deux équations de continuité (C.3) on aura la relation suivante valable à l'équilibre stationnaire:

$$\text{div}_x(\vec{j}_n) + \text{div}_x(\vec{j}_p) = 0, \forall x \quad \Rightarrow \quad \vec{j}_{\text{total}} = \vec{j}_n + \vec{j}_p = \text{constante de } x, \forall x \tag{C.7}$$

C.2. Théorie du transport petit-signal non-uniforme avec grand-signal uniforme

Le système d'équations de base (C.1, C.2 et C.3) devient un système linéaire dans les conditions d'emploi d'un petit signal autour d'un point de travail fixé par un grand signal. La résolution du système est ainsi facilitée. La théorie petit-signal débouchera sur les différents modes du transport, sur les conditions d'excitation de ces modes, et sera appliquée aux mesures petit-signal pour la caractérisation du matériau (chapitre C.3).

Je considère un matériau absolument uniforme: un simple photoconducteur sans contact bloquant.

Je n'utiliserai pas d'expressions explicites pour la recombinaison (R) et pour la charge totale (ρ_{total}) dans ce chapitre. Je n'admettrai qu'une dépendance non-explicitée de R et ρ_{total} avec les deux types de porteurs libres: $R=R(n_f, p_f)$ et $\rho_{\text{total}}=\rho_{\text{total}}(n_f, p_f)$. Les expressions explicites pour la recombinaison et les charges électriques du chapitre B.3 seront appliquées aux résultats du présent chapitre dans le chapitre de la caractérisation du matériau (chapitre C.3) et ont été appliqué dans Sauvain (1992).

C.2.1. Equations du transport petit signal:linéarisation

Changement d'inconnues:

La densité de porteurs totaux négatifs (n^*) et la densité de porteurs totaux positifs (p^*) sont définies comme:

$$\begin{aligned} n^* &\equiv \rho_{\text{total}}^-(n_f, p_f) \\ p^* &\equiv \rho_{\text{total}}^+(n_f, p_f) \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

n^* et p^* sont des fonctions des deux types de porteurs libres. Ces deux fonctions admettent en général la bijection suivante:

$$\left\{ \begin{array}{l} n^*(n_f, p_f) \\ p^*(n_f, p_f) \end{array} \right\} \xleftrightarrow{\text{bijection}} \left\{ \begin{array}{l} n_f(n^*, p^*) \\ p_f(n^*, p^*) \end{array} \right\} \quad (\text{C.9})$$

Ainsi, en général, on peut exprimer les porteurs libres comme fonctions des porteurs totaux et réécrire le système d'équation de base du transport (Eqs. C.1, C.2 et C.3) en choisissant n^* et p^* comme inconnues plutôt que n_f et p_f .

Remarque:

Ce changement d'inconnues peut sembler être une complication inutile: son intérêt est de montrer directement l'interprétation physique du mode ambipolaire et du mode de relaxation diélectrique (paragraphe C.2.2). On verra que le mode ambipolaire est le mode de la neutralité locale et que le mode de relaxation diélectrique est le mode de relaxation d'une charge d'espace locale. La neutralité locale et une charge d'espace locale impliquant la totalité locale des charges, il est judicieux d'utiliser les porteurs totaux comme variables. L'interprétation physique générale (parce qu'informelle: pas d'expression explicite pour R et ρ_{total}), en tant que mode, du transport ambipolaire et de sa longueur caractéristique (longueur ambipolaire = longueur de transport effectif des porteurs totaux dans la neutralité locale) se comprend bien en termes de porteurs totaux (malgré la complication des équations de base exprimées avec les porteurs totaux), alors que cette interprétation devient très compliquée en terme de porteurs libres (voir paragraphe B.3.1). L'explication du terme "transport effectif" des porteurs totaux suit dans la remarque après Eq.(C.13). L'étude de la caractérisation du matériau, par les mesures de transport ambipolaire, demande l'emploi d'expressions explicites pour R et ρ_{total} (données dans le chapitre B.3). Pour cette étude j'exprimerai le transport ambipolaire en terme de porteurs libres (chapitre C.3) car le modèle de la recombinaison et des charges électriques dans les états localisés se comprend mieux en termes de porteurs libres (puisque la recombinaison et les charges dans les états localisés proviennent des transitions entre états localisés et états délocalisés)

P^* et n^* seront des fonctions de l'unique variable spatiale x :

$$n^*(n_f(x), p_f(x)) = n^*(x) \quad \text{et} \quad p^*(n_f(x), p_f(x)) = p^*(x)$$

Par la bijection Eq(C.9), on aura:

$$\frac{dn_f}{dx} = \frac{\partial n_f}{\partial n^*} \frac{dn^*}{dx} + \frac{\partial n_f}{\partial p^*} \frac{dp^*}{dx} \quad \text{et} \quad \frac{dp_f}{dx} = \frac{\partial p_f}{\partial n^*} \frac{dn^*}{dx} + \frac{\partial p_f}{\partial p^*} \frac{dp^*}{dx}$$

Les parties diffusion des courants (Eq.C.1) seront:

$$D_n^0 \frac{dn_f}{dx} = D_n^0 \left(\frac{\partial n_f}{\partial n^*} \frac{dn^*}{dx} + \frac{\partial n_f}{\partial p^*} \frac{dp^*}{dx} \right) \quad \text{et} \quad D_p^0 \frac{dp_f}{dx} = D_p^0 \left(\frac{\partial p_f}{\partial n^*} \frac{dn^*}{dx} + \frac{\partial p_f}{\partial p^*} \frac{dp^*}{dx} \right)$$

Les parties dérives des courants (Eq.C.1) seront:

$$\mu_n^0 n_f E = \mu_n^0 \frac{n_f}{n^*} n^* E \quad \text{et} \quad \mu_p^0 p_f E = \mu_p^0 \frac{p_f}{p^*} p^* E$$

Le système d'équations (C.1, C.2 et C.3) s'écrit alors comme:

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{e} j_n &= \mu_n^* n^* E + D_{nn}^* \frac{dn^*}{dx} + D_{np}^* \frac{dp^*}{dx} \\ \frac{1}{e} j_p &= \mu_p^* p^* E - D_{pn}^* \frac{dn^*}{dx} - D_{pp}^* \frac{dp^*}{dx} \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \text{deux équations} \\ \text{des courants} \end{array} \quad (\text{C.10})$$

$$\left. \frac{dE}{dx} = \frac{e}{\varepsilon} (p^* - n^*) \right\} \begin{array}{l} \text{une équation} \\ \text{du champ} \end{array} \quad (\text{C.11})$$

$$\left. \begin{aligned} 0 &= G(x) - R(n^*, p^*) + \frac{1}{e} \frac{dj_n}{dx} \\ 0 &= G(x) - R(n^*, p^*) - \frac{1}{e} \frac{dj_p}{dx} \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \text{deux équations} \\ \text{de continuité} \end{array} \quad (\text{C.12})$$

avec deux mobilités effectives et quatre coefficients de diffusion effectives:

$$\begin{aligned} \mu_n^* &= \mu_n^o \frac{n_f}{n^*} , & \mu_p^* &= \mu_p^o \frac{p_f}{p^*} \\ D_{nn}^* &= D_n^o \frac{\partial n_f}{\partial n^*} , & D_{np}^* &= D_n^o \frac{\partial n_f}{\partial p^*} \\ D_{pn}^* &= D_p^o \frac{\partial p_f}{\partial n^*} , & D_{pp}^* &= D_p^o \frac{\partial p_f}{\partial p^*} \end{aligned} \quad (\text{C.13})$$

Ces coefficients sont des fonctions de p^* et n^* :

$$\begin{aligned} \mu_n^* &= \mu_n^*(n^*, p^*), & \mu_p^* &= \mu_p^*(n^*, p^*) \\ D_{nn}^* &= D_{nn}^*(n^*, p^*), & D_{np}^* &= D_{np}^*(n^*, p^*), & D_{pn}^* &= D_{pn}^*(n^*, p^*), & D_{pp}^* &= D_{pp}^*(n^*, p^*) \end{aligned}$$

Remarque:

Les deux équations (C.10) restent celles des courants de porteurs libres (j_n et j_p). Les coefficients effectifs $\mu_p^*, \mu_n^*, D_{nn}^*, D_{np}^*, D_{pn}^*, D_{pp}^*$ ne rendent compte que d'un déplacement "effectif" des porteurs capturés dans les états localisés: seuls les porteurs libres peuvent être en mouvement et ce déplacement "effectif" des porteurs capturés n'est rendu possible que par les transitions de porteurs entre les états localisés et les états délocalisés. De même les deux équations (C.12) restent celles de continuité pour les porteurs libres, mais on y a exprimé la recombinaison comme fonction des porteurs totaux par l'usage de la bijection Eq.(C.9).

Linéarisation (autour d'un point de travail):

La condition de linéarisation sera réalisée en superposant sur le matériau une illumination uniforme (grand-signal fixant le point de travail) à une petite illumination non-uniforme (petit-signal).

G_0 (indépendant de x) : photogénération du grand-signal

$\Delta G(x)$: photogénération du petit-signal

On aura:

$$G(x) = G_0 + \Delta G(x)$$

$$n^*(x) = N^* + \Delta n^*(x)$$

$$p^*(x) = P^* + \Delta p^*(x)$$

$$j_n(x) = j_N + \Delta j_n(x)$$

$$j_p(x) = j_P + \Delta j_p(x)$$

Avec la condition $\Delta G \ll G_0$ on aura $\Delta n^* \ll N^*$, $\Delta p^* \ll P^*$, $\Delta j_n \ll j_N$ et $\Delta j_p \ll j_P$. $\Delta n^*(x)$, $\Delta p^*(x)$, Δj_n et Δj_p sont les solutions petit-signal. P^* , N^* , j_N et j_P sont les solutions grand-signal.

Hypothèse d'uniformité des solutions grand-signal:

(E , j_N , j_P , N^* et P^*) = constante de x car le matériau est absolument uniforme et l'excitation est uniforme. Même en appliquant une tension externe, les solutions grand-signal restent uniformes car les contacts aux bornes du matériau sont admis non-bloquant.

On obtient sous cette hypothèse les équations grand-signal pour les porteurs totaux.

Equations grand-signal pour les porteurs totaux:

$$\frac{dE}{dx} = 0 = \frac{e}{\epsilon}(P^* - N^*) \Rightarrow P^* = N^* \quad \begin{array}{l} \text{neutralité locale} \\ \text{grand-signal} \end{array}$$

$$\left. \begin{array}{l} \frac{dj_N}{dx} = 0 \\ \frac{dj_P}{dx} = 0 \end{array} \right\} \Rightarrow R(N^*, P^*) = G_0 \quad \begin{array}{l} \text{continuité} \\ \text{grand-signal} \end{array}$$

(C.14)

Avec la neutralité locale pour le grand-signal, l'équation du champ sera:

Equation du champ:

$$\frac{dE}{dx} = \frac{e}{\epsilon} (\Delta p^* - \Delta n^*) \Rightarrow E(x) = E_{\text{ext}} + \underbrace{\frac{e}{\epsilon_0} \int_0^x (\Delta p^* - \Delta n^*) dx}_{\Delta E(x)} \quad (\text{C.15})$$

E_{ext} : champ d'origine externe

$\Delta E(x)$: champ d'origine interne petit-signal

$\Delta E(x)$ est le champ provenant de la charge d'espace locale petit-signal ($\Delta p^* - \Delta n^*$) tirant son origine de la non-uniformité du petit-signal. Même en appliquant une tension externe, il n'y a pas de charge d'espace lorsque seul le grand-signal est appliqué (voir hypothèse d'uniformité des solutions grand-signal). La constante d'intégration E_{ext} ne provient que de l'application d'une tension externe

On a :

$$\int_0^L \Delta E dx = 0 \Rightarrow V_{\text{ext}} = \int_0^L E dx = E_{\text{ext}} L \quad (\text{C.16})$$

V_{ext} est la tension externe appliquée et L est la longueur totale du matériau.

Pour linéariser les courants j_n et j_p , nous allons considérer formellement les expressions

des courants (Eq.C.10) comme: $j_n = j_n(E, n^*, p^*, \frac{dn^*}{dx}, \frac{dp^*}{dx})$ et

$j_p = j_p(E, n^*, p^*, \frac{dn^*}{dx}, \frac{dp^*}{dx})$.

Il vient en ne conservant que les termes de premiers ordres:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{e} \Delta j_n &= \left(\frac{\partial j_n}{\partial E} \right)_o \Delta E + \left(\frac{\partial j_n}{\partial n^*} \right)_o \Delta n^* + \left(\frac{\partial j_n}{\partial p^*} \right)_o \Delta p^* && \text{(partie de dérive)} \\
&+ \left(\frac{\partial j_n}{\partial \left(\frac{dn^*}{dx} \right)} \right)_o \Delta \left(\frac{dn^*}{dx} \right) + \left(\frac{\partial j_n}{\partial \left(\frac{dp^*}{dx} \right)} \right)_o \Delta \left(\frac{dp^*}{dx} \right) && \text{(partie de diffusion)} \\
&= \left(\mu_n^* n^* \right)_o \Delta E + \left((\mu_n^* + n^* \frac{\partial \mu_n^*}{\partial n^*}) E \right)_o \Delta n^* + \left(n^* \frac{\partial \mu_n^*}{\partial p^*} E \right)_o \Delta p^* && \text{dérive} \\
&+ \left(D_{nn}^* \right)_o \frac{d\Delta n^*}{dx} + \left(D_{np}^* \right)_o \frac{d\Delta p^*}{dx} && \text{diffusion} \\
\frac{1}{e} \Delta j_p &= \left(\frac{\partial j_p}{\partial E} \right)_o \Delta E + \left(\frac{\partial j_p}{\partial n^*} \right)_o \Delta n^* + \left(\frac{\partial j_p}{\partial p^*} \right)_o \Delta p^* && \text{(partie de dérive)} \\
&+ \left(\frac{\partial j_p}{\partial \left(\frac{dn^*}{dx} \right)} \right)_o \Delta \left(\frac{dn^*}{dx} \right) + \left(\frac{\partial j_p}{\partial \left(\frac{dp^*}{dx} \right)} \right)_o \Delta \left(\frac{dp^*}{dx} \right) && \text{(partie de diffusion)} \\
&= \left(\mu_p^* p^* \right)_o \Delta E + \left(p^* \frac{\partial \mu_p^*}{\partial n^*} E \right)_o \Delta n^* + \left((\mu_p^* + p^* \frac{\partial \mu_p^*}{\partial p^*}) E \right)_o \Delta p^* && \text{dérive} \\
&- \left(D_{pn}^* \right)_o \frac{d\Delta n^*}{dx} - \left(D_{pp}^* \right)_o \frac{d\Delta p^*}{dx} && \text{diffusion}
\end{aligned}$$

L'indice (...)₀ indique une constante fixée par le point de travail (grand-signal).

Avec les notations suivantes:

$$\mu_N^* = \left(\mu_n^* \right)_o \quad \text{et} \quad \mu_P^* = \left(\mu_p^* \right)_o \quad \left. \begin{array}{l} 2 \text{ mobilités} \\ \text{grand-signal} \end{array} \right\}$$

$$\left. \begin{aligned} \mu_{NN}^* &= \left(\mu_n^* + n^* \frac{\partial \mu_n^*}{\partial n^*} \right)_0, & \mu_{NP}^* &= \left(n^* \frac{\partial \mu_n^*}{\partial p^*} \right)_0 \\ \mu_{PP}^* &= \left(\mu_p^* + p^* \frac{\partial \mu_p^*}{\partial p^*} \right)_0, & \mu_{PN}^* &= \left(p^* \frac{\partial \mu_p^*}{\partial n^*} \right)_0 \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} 4 \text{ mobilités} \\ \text{petit-signal} \end{array} \quad (\text{C.17})$$

$$\left. \begin{aligned} D_{NN}^* &= (D_{nn}^*)_0, & D_{PP}^* &= (D_{pp}^*)_0 \\ D_{NP}^* &= (D_{np}^*)_0 \text{ et } D_{PN}^* &= (D_{pn}^*)_0 \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} 4 \text{ constantes} \\ \text{de diffusion} \end{array}$$

Avec l'usage de Eq.(C.15) et des notations Eq.(C.17), on obtient les expressions des courants petit-signal (+ éliminer les termes de second ordre).

Expressions des courants petit-signal:

$$\begin{aligned} \frac{1}{e} \Delta j_n &= \mu_{NN}^* N^* \Delta E && : \text{dérive interne} \\ &+ \mu_{NN}^* E_{ext} \Delta n^* + \mu_{NP}^* E_{ext} \Delta p^* && : \text{dérive externe} \\ &+ D_{NN}^* \frac{d\Delta n^*}{dx} + D_{NP}^* \frac{d\Delta p^*}{dx} && : \text{diffusion} \end{aligned} \quad (\text{C.18})$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{e} \Delta j_p &= \mu_{PN}^* P^* \Delta E && : \text{dérive interne} \\ &+ \mu_{PN}^* E_{ext} \Delta n^* + \mu_{PP}^* E_{ext} \Delta p^* && : \text{dérive externe} \\ &- D_{PN}^* \frac{d\Delta n^*}{dx} - D_{PP}^* \frac{d\Delta p^*}{dx} && : \text{diffusion} \end{aligned} \quad (\text{C.19})$$

La recombinaison petit-signal, avec $R=R(n^*, p^*)$, est:

$$\Delta R = \left(\frac{\partial R}{\partial n^*} \right)_0 \Delta n^* + \left(\frac{\partial R}{\partial p^*} \right)_0 \Delta p^* = \frac{\Delta n^*}{\tau_n^*} + \frac{\Delta p^*}{\tau_p^*} \quad (\text{C.20})$$

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{\tau_n^*} &= \left(\frac{\partial R}{\partial n^*} \right)_0 \text{ et } \frac{1}{\tau_p^*} = \left(\frac{\partial R}{\partial p^*} \right)_0 \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \text{temps de vie} \\ \text{petit-signal} \\ \text{des porteurs totaux} \end{array}$$

On aura besoin des temps de relaxation diélectrique grand-signal des électrons et trous:

$$\frac{1}{T_{dn}} = \frac{\sigma_n}{\varepsilon} = \mu_n^o N_f \frac{e}{\varepsilon} = \mu_N^* N^* \frac{e}{\varepsilon} \quad (C.21)$$

$$\frac{1}{T_{dp}} = \frac{\sigma_p}{\varepsilon} = \mu_p^o P_f \frac{e}{\varepsilon} = \mu_P^* P^* \frac{e}{\varepsilon}$$

où σ_n et σ_p sont les photoconductivités grand-signal des électrons et des trous.

Maintenant, on peut exprimer les deux équations de continuité petit-signal dérivées de Eq.(C.12) en y introduisant Eq.(C.14), les courants petit-signal (C.18 et C.19) et l'équation du champ Eq.(C.15).

Equations de continuité petit-signal:

Pour les électrons:

$$0 = \Delta G(x) - \frac{\Delta n^*}{\tau_n^*} - \frac{\Delta p^*}{\tau_p^*} \quad : \text{ recombinaison}$$

$$+ \frac{\Delta p^* - \Delta n^*}{T_{dn}} \quad : \text{ dérive interne}$$

$$+ \mu_{NN}^* E_{ext} \frac{d\Delta n^*}{dx} + \mu_{NP}^* E_{ext} \frac{d\Delta p^*}{dx} \quad : \text{ dérive externe} \quad (C.22)$$

$$+ D_{NN}^* \frac{d^2 \Delta n^*}{dx^2} + D_{NP}^* \frac{d^2 \Delta p^*}{dx^2} \quad : \text{ diffusion}$$

Pour les trous:

$$0 = \Delta G(x) - \frac{\Delta n^*}{\tau_n^*} - \frac{\Delta p^*}{\tau_p^*} \quad : \text{ recombinaison}$$

$$- \frac{\Delta p^* - \Delta n^*}{T_{dp}} \quad : \text{ dérive interne}$$

$$- \mu_{PN}^* E_{ext} \frac{d\Delta n^*}{dx} - \mu_{PP}^* E_{ext} \frac{d\Delta p^*}{dx} \quad : \text{ dérive externe} \quad (C.23)$$

$$+ D_{PN}^* \frac{d^2 \Delta n^*}{dx^2} + D_{PP}^* \frac{d^2 \Delta p^*}{dx^2} \quad : \text{ diffusion}$$

Remarque:

Les termes $\frac{\Delta p^* - \Delta n^*}{T_{dn}} = \mu_N^* N^* \frac{d\Delta E}{dx}$ et $\frac{\Delta p^* - \Delta n^*}{T_{dp}} = \mu_P^* P^* \frac{d\Delta E}{dx}$ représentent la dérive interne par Eq.(C.15) et Eq.(C.18 et C.19). Par Eq.(C.15) le champ interne ΔE est le champ de couplage entre Δp^* et Δn^* . Eq.(C.18 et C.19) montrent les courants de

dérive interne. Ces courants sont activés par le champ interne de couplage ΔE . Ils sont les courants de relaxation de la charge d'espace donnant naissance à ΔE , c'est à dire qu'ils vont dans le sens de diminuer la charge d'espace ($\Delta p^* - \Delta n^*$). Les termes $\frac{\Delta p^* - \Delta n^*}{T_{dn}}$ et $\frac{\Delta p^* - \Delta n^*}{T_{dp}}$ s'appellent aussi termes de relaxation diélectrique.

Forme matricielle des équations de continuité petit-signal:

$$\underbrace{\left[T^{-1} \right] \begin{pmatrix} \Delta n^* \\ \Delta p^* \end{pmatrix}}_{\text{recombinaison et relaxation diélectrique}} - \underbrace{E_{\text{ext}} [\mu^*] \frac{d}{dx} \begin{pmatrix} \Delta n^* \\ \Delta p^* \end{pmatrix}}_{\text{dérive externe}} - \underbrace{\left[D^* \right] \frac{d^2}{dx^2} \begin{pmatrix} \Delta n^* \\ \Delta p^* \end{pmatrix}}_{\text{diffusion}} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \Delta G(x)}_{\text{excitation}} \quad (\text{C.24})$$

Avec:

$$\left[T^{-1} \right] = \begin{bmatrix} \frac{1}{\tau_n^*} + \frac{1}{T_{dn}} & \frac{1}{\tau_p^*} - \frac{1}{T_{dn}} \\ \frac{1}{\tau_n^*} - \frac{1}{T_{dp}} & \frac{1}{\tau_p^*} + \frac{1}{T_{dp}} \end{bmatrix} \quad \text{matrice des constantes de temps}$$

$$\left[\mu^* \right] = \begin{bmatrix} \mu_{NN}^* & \mu_{NP}^* \\ -\mu_{PN}^* & -\mu_{PP}^* \end{bmatrix} \quad \text{matrice des mobilités effectives}$$

$$\left[D^* \right] = \begin{bmatrix} D_{NN}^* & D_{NP}^* \\ D_{PN}^* & D_{PP}^* \end{bmatrix} \quad \text{matrice des constantes de diffusion effective}$$

Le système Eq.(C.24) est de deux équations indépendantes, mais couplées, pour les deux inconnues Δn^* et Δp^* .

C.2.2. Solution homogène et modes (vecteurs propres): les modes ambipolaire et de relaxation diélectrique en cas de diffusion et en cas de dérive: condition d'existence de ces deux modes

Les vecteurs propres solutions du système d'équations linéarisées (Eq.C.24), pour la partie homogène (excitation petit signal nulle: $\Delta G(x)=0, \forall x$), donnent les différents modes du transport en condition linéaire. Les valeurs propres associées aux vecteurs propres donnent les longueurs caractéristiques associées aux modes. Je traite ici le système Eq.(C.24) pour sa partie homogène: les modes sont la décomposition de la solution homogène générale du système dans la base des vecteurs propres. Ainsi, les modes permettent d'exprimer la réponse $\forall x$ du matériau à une petite perturbation de la solution uniforme du grand-signal., imposée localement (en un x particulier, par des conditions aux limites par exemple).

Le cas général du système Eq.(C.24) admet 4 modes indépendants (le système est d'ordre 4: 2 équations indépendantes de second ordre chacune). La résolution et l'étude du cas général ne conduit pas nécessairement à un intérêt pratique pour la caractérisation du matériau. Je vais m'intéresser d'emblée à 2 modes particuliers et à leur condition d'existence.

Définitions du mode ambipolaire, du mode de relaxation diélectrique et de la condition life-time:

- Le mode ambipolaire est associé au vecteur propre de la neutralité locale

$$\begin{pmatrix} \Delta n^* \\ \Delta p^* \end{pmatrix}_{\text{amb}} \propto \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{c. à. d.} \quad (\Delta n^*)_{\text{amb}} = (\Delta p^*)_{\text{amb}}, \forall x$$

Le mode ambipolaire donne la réponse du matériau à une petite déviation, imposée localement, de la solution uniforme du grand signal, mais respectant la neutralité locale.

$$\text{c. à. d.: } (\Delta n^* = \Delta p^* \neq 0 \text{ en un } x \text{ particulier}) \rightarrow \Delta p^*(x) = \Delta n^*(x), \forall x$$

réponse du matériau dans le mode
ambipolaire

La longueur caractéristique associée à ce mode donne la longueur d'existence de la déviation: longueur ambipolaire

- Le mode de relaxation diélectrique donne la réponse du matériau à une petite déviation, imposée localement, de la neutralité locale du grand signal.

c. à d.: $(\Delta n^* \neq \Delta p^* \text{ en un } x \text{ particulier}) \rightarrow \Delta p^*(x) - \Delta n^*(x) = \Delta \rho_{\text{total}}(x)$

La longueur caractéristique associée à ce mode donne la longueur d'existence d'une petite charge d'espace $\Delta \rho_{\text{total}}(x)$: longueur de relaxation diélectrique

- la condition life-time est la condition d'existence du mode ambipolaire en tant que vecteur propre-solution de la partie homogène de Eq.(C.24). Elle implique comme corollaire l'existence du mode de relaxation diélectrique en tant que vecteur propre solution de la partie homogène de Eq.(C.24). Cette condition life-time implique que la réponse $\forall x$ du matériau à une petite perturbation quelconque imposée localement, de la solution uniforme du grand signal est une combinaison linéaire des deux modes ambipolaire et relaxation diélectrique.

Je traite ces deux modes pour deux cas asymptotiques:

- cas diffusion: $E_{\text{ext}}=0$
la dérive externe est donc nulle (pas de tension externe appliquée). Le transport se fait donc par diffusion et par dérive interne (relaxation diélectrique).
- cas dérive: E_{ext} est suffisamment grand pour que la partie diffusion soit négligeable. Le transport se fait par dérive externe et par dérive interne (relaxation diélectrique).

Cas diffusion:

La démarche est d'abord d'identifier la longueur caractéristique du mode de diffusion ambipolaire (longueur de diffusion ambipolaire) en posant la neutralité locale pour le petit-signal, ensuite de trouver la condition pour qu'une des valeurs propres générale de Eq.(C.24) (avec $E_{\text{ext}}=0$ et $\Delta G(x)=0, \forall x$) devienne la longueur ambipolaire et que son vecteur propre associé devienne le vecteur de la neutralité locale. Appliquant la condition trouvée, on obtiendra aussi un deuxième mode que l'on identifiera comme étant le mode de relaxation diélectrique.

Signification du mode de diffusion ambipolaire et identification de la longueur de diffusion ambipolaire:

Le mode de diffusion ambipolaire est le transport par diffusion d'une perturbation ambipolaire ($\Delta n^* = \Delta p^* \neq 0$ en un x particulier), en conservant la neutralité locale en toute position dans le matériau ($\Delta n^* = \Delta p^*, \forall x$). On peut prendre l'image que les deux types de porteurs totaux diffusent ensembles, malgré que les deux types de porteurs ont des constantes de diffusion différentes entre elles. La neutralité locale sera conservée par les

courants de relaxation diélectrique (dérive interne). Autrement dit une petite déviation de la neutralité locale, entraînant un champ interne, doit être très facilement comblée par la mise en mouvement, par le champ interne (ΔE), de la masse des porteurs grand-signal (voir remarque après Eq.(C.23)). Il faut donc une grande photoconductivité grand-signal ou, ce qui revient au même, un court temps de relaxation diélectrique Eq.(C.21) pour que le mode en diffusion ambipolaire existe.

La longueur de diffusion ambipolaire est donc la longueur de diffusion d'une perturbation ambipolaire, $\Delta n^* = \Delta p^* \neq 0$. Elle est:

$$L_{amb}^2 = D_{amb}^* \tau_{amb}^* \quad : \text{ longueur de diffusion ambipolaire}$$

$$\frac{1}{\tau_{amb}^*} = \frac{1}{\tau_p^*} + \frac{1}{\tau_n^*} \quad : \text{ temps de recombinaison de la perturbation ambipolaire}$$

$$D_{amb}^* = \frac{\mu_N^* D_p^* + \mu_p^* D_N^*}{\mu_N^* + \mu_p^*} \left\{ \begin{array}{l} \text{constante de diffusion de la} \\ \text{perturbation ambipolaire, avec} \end{array} \right. \quad (C.25)$$

$$D_p^* = D_{pp}^* + D_{pn}^*$$

$$D_n^* = D_{nn}^* + D_{np}^*$$

La signification de τ_{amb}^* apparait dans le cas simplifié suivant:

$\Delta R = \Delta G$ et indépendant de x (petit-signal uniforme)

avec l'expression de la recombinaison petit signal (Eq.(C.20), il vient

$$\Delta n^* = \Delta p^* = \tau_{amb}^* \Delta G$$

L'expression de D_{amb}^* suggère une moyenne pondérée. Cette moyenne est typique du transport ambipolaire. En effet, en multipliant Eq.(C.22) (avec $E_{ext}=0$ et $\Delta G(x)=0$) par T_{dn} et Eq.(C.23) par T_{dp} , et ensuite en additionnant les deux résultats, on obtient:

$$0 = -(T_{dn} + T_{dp}) \left(\frac{\Delta n^*}{\tau_n^*} + \frac{\Delta p^*}{\tau_p^*} \right) + (T_{dn} D_{NN}^* + T_{dp} D_{PN}^*) \frac{d^2 \Delta n^*}{dx^2} + (T_{dn} D_{NP}^* + T_{dp} D_{PP}^*) \frac{d^2 \Delta p^*}{dx^2}$$

Cette opération a fait disparaître le terme de couplage par le champ interne, $\frac{e}{\epsilon} (\Delta p^* - \Delta n^*)$. Ce couplage est toujours présent mais sous forme implicite.

Cherchons maintenant la solution en posant la neutralité locale pour le petit-signal $\Delta n^* = \Delta p^*$, $\forall x$. Il vient avec les définitions de Eq.(C.25):

$$0 = -\frac{\Delta n^*}{\tau_{amb}^*} + \frac{(T_{dn}D_N^* + T_{dp}D_P^*)}{T_{dn} + T_{dp}} \frac{d^2\Delta n^*}{dx^2}$$

Avec les définitions Eq.(C.21) et la neutralité locale du grand-signal $N^* = P^*$, on obtient l'équation de la diffusion ambipolaire.

Equation de la diffusion ambipolaire:

$$0 = -\frac{\Delta n^*}{\tau_{amb}^*} + \underbrace{\frac{(\mu_P^*D_N^* + \mu_N^*D_P^*)}{\mu_N^* + \mu_P^*}}_{D_{amb}^*} \frac{d^2\Delta n^*}{dx^2} \quad (C.26)$$

(avec $\Delta p^* = \Delta n^*$, $\forall x$)

De Eq.(C.26) on obtient sans peine le résultat donné en Eq.(C.25).

Il est à remarquer que les temps de relaxation diélectrique T_{dn} et T_{dp} ont disparu dans Eq.(C.26). La relaxation diélectrique et le couplage par le champ interne sont toujours présents sous forme implicite. L'équation de la diffusion ambipolaire (Eq.(C.26)) est valable sous la condition que l'on ait $\Delta n^* = \Delta p^* \forall x$. Cette condition de validité met en jeu explicitement T_{dn} et T_{dp} . Nous allons maintenant trouver cette condition et son corollaire: l'existence de la relaxation diélectrique en tant que mode.

Condition d'existence du mode ambipolaire et son corollaire, l'existence de la relaxation diélectrique en tant que mode:

L'équation des modes en diffusion est déduite de la forme matricielle des équations de continuité (Eq.(C.24)) (avec $E_{ext}=0$ et $\Delta G(x)=0$) :

$$\frac{d^2}{dx^2} \begin{pmatrix} \Delta n^* \\ \Delta p^* \end{pmatrix}_q = [D^*]^{-1} [T^{-1}] \begin{pmatrix} \Delta n^* \\ \Delta p^* \end{pmatrix}_q = q^2 \begin{pmatrix} \Delta n^* \\ \Delta p^* \end{pmatrix}_q \quad (C.27)$$

q est la valeur propre et $\begin{pmatrix} \Delta n^* \\ \Delta p^* \end{pmatrix}_q$ est le vecteur propre associé.

De l'équation des modes on déduit l'équation aux valeurs propres:

$$\text{DET} \left(\left[D^* \right]^{-1} \left[T^{-1} \right] - q^2 [1] \right) = 0$$

↓

$$T_d (D_{NN}^* D_{PP}^* - D_{NP}^* D_{PN}^*) q^4 - (D_{amb}^* + D_{la}^*) q^2 + \frac{1}{\tau_{amb}^*} = 0$$

Avec:

$$D_{la}^* = (D_{NN}^* - D_{PN}^*) \frac{T_d}{\tau_p^*} + (D_{PP}^* - D_{NP}^*) \frac{T_d}{\tau_n^*}$$

$$\frac{1}{T_d} = \frac{1}{T_{dn}} + \frac{1}{T_{dp}} = \frac{e}{\varepsilon} (\mu_N^* + \mu_P^*) N^* = \frac{\sigma_n + \sigma_p}{\varepsilon} = \frac{\sigma_{phot}}{\varepsilon} \quad (\text{C.28})$$

T_d est le temps de relaxation diélectrique total. T_d est donné par la photoconductivité totale ($\sigma_{phot} = \sigma_n + \sigma_p$). L'équation aux valeurs propres obtenue est du 4^{ième} degré en forme quadratique. Il y a donc 4 valeurs propres allant deux par deux ($\pm q_+$ et $\pm q_-$). En résolvant cette équation, on obtient l'expression générale des deux longueurs caractéristiques du cas diffusion (la longueur caractéristique étant l'inverse de la valeur propre $L=1/q$):

$$L_{\pm}^2 = 2 \frac{T_d (D_{NN}^* D_{PP}^* - D_{NP}^* D_{PN}^*)}{D_{amb}^* + D_{la}^* \pm \sqrt{(D_{amb}^* + D_{la}^*)^2 - 4(D_{NN}^* D_{PP}^* - D_{NP}^* D_{PN}^*) \frac{T_d}{\tau_{amb}^*}}} \quad (\text{C.29})$$

Suite aux considérations précédentes sur la signification de la diffusion ambipolaire, on cherche une condition mettant en jeu le rapport $\frac{T_d}{\tau_{amb}^*}$.

La condition suivante,

$$\frac{D_{NN}^* D_{PP}^* - D_{NP}^* D_{PN}^*}{(D_{amb}^*)^2} \ll \frac{\tau_{amb}^*}{T_d} \quad (\Rightarrow D_{la}^* \ll D_{amb}^*) \quad (\text{C.30})$$

est nécessaire et suffisante pour que: $L_-^2 \rightarrow L_{amb}^2$.

Cette condition (C.30) donne pour les deux longueurs:

$$\begin{aligned} L_-^2 &\rightarrow L_{\text{amb}}^2 = D_{\text{amb}}^* \tau_{\text{amb}}^* \\ L_+^2 &\rightarrow L_{\text{diel}}^2 = \frac{D_{\text{NN}}^* D_{\text{PP}}^* - D_{\text{NP}}^* D_{\text{PN}}^*}{D_{\text{amb}}^*} T_d \end{aligned} \quad (\text{C.31})$$

On voit maintenant que la condition Eq.(C.30) s'écrit comme:

$$L_{\text{amb}}^2 \gg L_{\text{diel}}^2$$

Il reste à montrer que la condition Eq.(C.30) implique que le vecteur propre associé à L_-^2 ($\rightarrow L_{\text{amb}}^2$) devient celui de la neutralité locale et que, en conséquence, on pourra identifier le vecteur propre associé à L_{diel}^2 comme celui du mode de la relaxation diélectrique.

On déduit de l'équation des modes Eq.(C.27) le rapport $\frac{\Delta n^*}{\Delta p^*}$ associé à la valeur propre

q:

$$\left(\frac{\Delta n^*}{\Delta p^*} \right)_q = \frac{-[D_{\text{PP}}^* (\frac{1}{\tau_p^*} - \frac{1}{T_{\text{dn}}}) - D_{\text{NP}}^* (\frac{1}{\tau_p^*} + \frac{1}{T_{\text{dp}}})]}{D_{\text{PP}}^* (\frac{1}{\tau_n^*} + \frac{1}{T_{\text{dn}}}) - D_{\text{NP}}^* (\frac{1}{\tau_n^*} - \frac{1}{T_{\text{dp}}}) - q^2 (D_{\text{NN}}^* D_{\text{PP}}^* - D_{\text{NP}}^* D_{\text{PN}}^*)}$$

Excluant des valeurs très particulières pour les paramètres de base du matériau (D_n^0, D_p^0, ϵ , paramètres des états localisés), si particulières qu'elles n'auraient plus de significations physiques, je peux dire que la condition Eq.(C.30) implique que:

$$\left(\frac{\Delta n^*}{\Delta p^*} \right)_{q=L_-} \rightarrow 1, \text{ c'est à dire: } (\Delta n^*)_{L_-} \rightarrow (\Delta p^*)_{L_-}, \forall x.$$

L'application de la condition Eq.(C.30) conduit à:

$$\left(\frac{\Delta n^*}{\Delta p^*} \right)_{L_-} \rightarrow \left(\frac{\Delta n^*}{\Delta p^*} \right)_{L_{\text{amb}}} = 1 \quad (\Delta n^*)_{\text{amb}} = (\Delta p^*)_{\text{amb}}, \forall x$$

$$\left(\frac{\Delta n^*}{\Delta p^*} \right)_{L_+} \rightarrow \left(\frac{\Delta n^*}{\Delta p^*} \right)_{L_{\text{diel}}} = - \frac{D_{\text{PP}}^* \mu_N^* + D_{\text{NP}}^* \mu_P^*}{D_{\text{PN}}^* \mu_N^* + D_{\text{NN}}^* \mu_P^*}, \forall x \quad (\text{C.32})$$

La résolution de l'équation des modes Eq.(C.27) sous la condition Eq.(C.30) donne:

$$\frac{d^2}{dx^2} \begin{pmatrix} \Delta n^* \\ \Delta p^* \end{pmatrix}_{\text{amb}} = \frac{1}{L_{\text{amb}}^2} \begin{pmatrix} \Delta n^* \\ \Delta p^* \end{pmatrix}_{\text{amb}}$$

$$\frac{d^2}{dx^2} \begin{pmatrix} \Delta n^* \\ \Delta p^* \end{pmatrix}_{\text{diel}} = \frac{1}{L_{\text{diel}}^2} \begin{pmatrix} \Delta n^* \\ \Delta p^* \end{pmatrix}_{\text{diel}}$$

$$\begin{pmatrix} \Delta n^* \\ \Delta p^* \end{pmatrix}_{\text{amb}} = A_{\text{amb}}^{\pm} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \exp\left(\pm \frac{x}{L_{\text{amb}}}\right)$$
(C.33)

$$\begin{pmatrix} \Delta n^* \\ \Delta p^* \end{pmatrix}_{\text{diel}} = \begin{pmatrix} B_{\text{diel}}^{\pm} \\ C_{\text{diel}}^{\pm} \end{pmatrix} \exp\left(\pm \frac{x}{L_{\text{diel}}}\right)$$

avec $\frac{B_{\text{diel}}^{\pm}}{C_{\text{diel}}^{\pm}} = \left(\frac{\Delta n^*}{\Delta p^*}\right)_{\text{diel}} \neq 1$ (Eq.(C.32))

A_{amb}^{\pm} , C_{diel}^{\pm} et B_{diel}^{\pm} sont des constantes déterminées par les conditions aux limites.

La superposition linéaire des deux modes donne:

$$\begin{pmatrix} \Delta n^* \\ \Delta p^* \end{pmatrix} = A_{\text{amb}}^{\pm} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \exp\left(\pm \frac{x}{L_{\text{amb}}}\right) + \begin{pmatrix} B_{\text{diel}}^{\pm} \\ C_{\text{diel}}^{\pm} \end{pmatrix} \exp\left(\pm \frac{x}{L_{\text{diel}}}\right)$$
(C.34)

Avec Eq.(C.34) on met clairement en évidence la signification du mode associé à la valeur propre L_{diel} , en exprimant la différence $\Delta p^* - \Delta n^*$.

Signification de la longueur et du mode de relaxation diélectrique en diffusion:

$$\Delta p_{\text{total}}^*(x) = \Delta p^*(x) - \Delta n^*(x) = (C_{\text{diel}}^{\pm} - B_{\text{diel}}^{\pm}) \exp\left(\pm \frac{x}{L_{\text{diel}}}\right)$$
(C.35)

Ainsi L_{diel} est la longueur d'existence d'une déviation de la neutralité locale et il est légitime d'appeler son mode associé "mode de relaxation diélectrique". Son existence, en tant que mode, est un corollaire de l'existence du mode ambipolaire. La condition d'existence du mode ambipolaire (appelée "condition life time") peut s'écrire comme:

Condition life time pour la diffusion ambipolaire:

$$L_{amb} \gg L_{diel} \quad (C.36)$$

Cette condition exprime que la relaxation diélectrique peut assurer la neutralité locale. Expérimentalement, la condition life time s'obtient en jouant sur l'intensité du grand-signal: plus la photoconductivité grand-signal est grande plus le temps de relaxation diélectrique est court (Eq.(C.28), plus L_{diel} est petit devant L_{amb} , et plus la neutralité locale est assurée.

La figure C.1 montre dans le plan des porteurs totaux la combinaison des deux modes obtenus avec la condition life time.

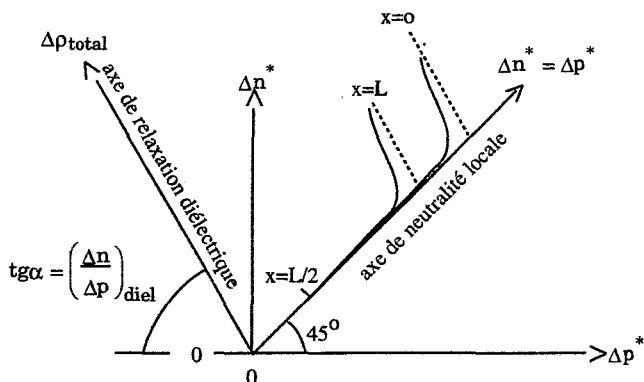


Figure C.1: réponse à une déviation de la neutralité locale imposée par des conditions aux limites ($x=0$ et $x=L$) en condition de diffusion ambipolaire (condition life time). On voit que la neutralité locale est rapidement rétablie lorsque l'on s'éloigne des limites: $0 < x < L$

Cas dérive:

La démarche est calquée sur celle du cas diffusion. On trouve également:

- un mode de dérive ambipolaire (mode de neutralité locale)
- un mode de relaxation diélectrique (mode de relaxation d'une charge d'espace locale)
- une condition life time pour l'existence du mode de dérive ambipolaire, avec comme corollaire l'existence de la relaxation diélectrique en tant que mode.

Cette similitude s'explique en comparant l'équation des modes en dérive Eq.(C.37) à l'équation des modes en diffusion Eq.(C.27). L'équation des modes en dérive, obtenue à partir de l'équation générale du système Eq.(C.24) en y supprimant la partie diffusion, est:

Equation des modes en dérive:

$$\frac{d}{dx} \begin{pmatrix} \Delta n^* \\ \Delta p^* \end{pmatrix}_q = \frac{1}{E_{\text{ext}}} [\mu^*]^{-1} [T^{-1}] \begin{pmatrix} \Delta n^* \\ \Delta p^* \end{pmatrix}_q = q \begin{pmatrix} \Delta n^* \\ \Delta p^* \end{pmatrix}_q \quad (\text{C.37})$$

L'équation des modes en dérive est formellement la même que l'équation des modes en diffusion. La différence entre les deux équations est la dérivée de 1^{er} ordre à la place de la dérivée de 2^{ème} ordre et la matrice des mobilités à la place de la matrice des constantes de diffusion. On peut reprendre les résultats obtenus pour la diffusion, en abaissant le degré des valeurs propres (l'équation aux valeurs propres sera du 2^{ème} degré au lieu du 4^{ème} degré) et en substituant aux constantes de diffusion les constantes de mobilité. Il faudra prendre garde, pour cette substitution, au signe négatif des termes inférieurs de la matrice des mobilités $[\mu^*]$. Je ne donne ici que les résultats principaux et l'interprétation du mode de dérive ambipolaire.

Equation de la dérive ambipolaire (avec $\Delta n^* = \Delta p^*$, $\forall x$):

$$0 = -\frac{\Delta n^*}{\tau_{\text{amb}}^*} + \underbrace{\frac{\mu_P^* \mu_N^{\Delta} - \mu_N^* \mu_P^{\Delta}}{\mu_P^* + \mu_N^*}}_{\mu_{\text{amb}}^*} E_{\text{ext}} \frac{d\Delta n^*}{dx} \quad (\text{C.38})$$

$$L_{\text{amb}}^{\text{dér}} = \mu_{\text{amb}}^* \tau_{\text{amb}}^* E_{\text{ext}} \quad : \text{ longueur de dérive ambipolaire}$$

$$\frac{1}{\tau_{\text{amb}}^*} = \frac{1}{\tau_n^*} + \frac{1}{\tau_p^*} \quad : \text{ temps de recombinaison de la perturbation ambipolaire}$$

$$\mu_{\text{amb}}^* = \frac{\mu_P^* \mu_N^{\Delta} - \mu_N^* \mu_P^{\Delta}}{\mu_P^* + \mu_N^*} \quad : \text{ mobilité de la perturbation ambipolaire}$$

$$\mu_N^{\Delta} = \mu_{NN}^* + \mu_{NP}^*$$

$$\mu_P^{\Delta} = \mu_{PN}^* + \mu_{PP}^*$$

Remarquons que la mobilité ambipolaire peut être positive, négative ou nulle (cas purement spéculatif!), son explication vient dans la suite.

On obtient pour la longueur de relaxation diélectrique en dérive:

$$L_{\text{diel}}^{\text{dér}} = \frac{\mu_{\text{NN}}^* \mu_{\text{PP}}^* + \mu_{\text{NP}}^* \mu_{\text{PN}}^*}{\mu_{\text{amb}}^*} T_d E_{\text{ext}} \quad (\text{C.40})$$

Condition life time pour la dérive ambipolaire:

$$L_{\text{amb}}^{\text{dér}} \gg L_{\text{diel}}^{\text{dér}} \quad (\text{C.41})$$

Tout comme la condition life time en diffusion, cette condition est expérimentalement obtenue par l'intensité du grand signal: σ_{phot} grand $\rightarrow T_d$ petit (Eq.C.28). Comme pour le cas diffusion, cette condition exprime que la relaxation diélectrique peut maintenir la neutralité locale. Le cas $L_{\text{amb}}^{\text{dér}} = 0$ ($\mu_{\text{amb}}^* = 0$) est un cas limite, la condition life time est maintenue si le temps de relaxation diélectrique est infiniment court (d'un ordre tel que $\frac{L_{\text{diel}}^{\text{dér}}}{L_{\text{amb}}^{\text{dér}}} \rightarrow 0$, malgré $\mu_{\text{amb}}^* \rightarrow 0$).

Signification du transport en dérive ambipolaire et de la mobilité ambipolaire pouvant être positive, négative voir nulle.

La dérive ambipolaire est le transport par dérive (sous l'action de E_{ext}) d'une perturbation ambipolaire, $\Delta n^* = \Delta p^* \neq 0$, en conservant la neutralité locale en toute position dans le matériau ($\Delta n^* = \Delta p^*, \forall x$). C'est la très rapide relaxation diélectrique qui permet la conservation de la neutralité locale (condition life time). La mobilité ambipolaire est la mobilité de la perturbation ambipolaire. Le signe de la mobilité ambipolaire donne le sens du déplacement de la perturbation sous l'action du champ E_{ext} . La condition life time impliquant que la neutralité locale est conservée en toutes positions dans le matériau, on pourra prendre, pour le déplacement de la perturbation, l'image suivante:

- les charges positives entraînent, dans leur mouvement, les charges négatives lorsque μ_{amb}^* est positive.
- les charges négatives entraînent, dans leur mouvement, les charges positives lorsque μ_{amb}^* est négative

Je veux mettre en évidence la signification du signe de μ_{amb}^* .

Par l'équation des courants petit-sinaux Eq.(C.18 et C.19), les courants petit-sinaux dû au champ externe sont (avec la condition ambipolaire $\Delta n^* = \Delta p^*$):

$$\begin{aligned} \frac{1}{e} \Delta j_n^{\text{ext}} &= (\mu_{NN}^* + \mu_{NP}^*) \Delta n^* E_{\text{ext}} = \mu_N^{\Delta} \Delta n^* E_{\text{ext}} \\ \frac{1}{e} \Delta j_p^{\text{ext}} &= (\mu_{PN}^* + \mu_{PP}^*) \Delta n^* E_{\text{ext}} = \mu_P^{\Delta} \Delta n^* E_{\text{ext}} \end{aligned} \quad (\text{C.42})$$

Ainsi les mobilités μ_N^{Δ} et μ_P^{Δ} sont les mobilités associées à Δn^* et Δp^* pour les courants petit-sinaux du à E_{ext} , Δj_n^{ext} et Δj_p^{ext} .

Par l'équation des courants petit-sinaux Eq.(C.18 et C.19), les courants petit-sinaux de la dérive interne (relaxation diélectrique) (Δj_n^{int} et Δj_p^{int}) sont:

$$\mu_N^* N^* \Delta E = \Delta j_n^{\text{int}} \quad \text{et} \quad \mu_P^* P^* \Delta E = \Delta j_p^{\text{int}} \quad (\text{C.43})$$

Ainsi les mobilités μ_N^* et μ_P^* sont les mobilités pour les courants de relaxation diélectrique. La mobilité ambipolaire Eq.(C.39) peut s'écrire comme:

$$\mu_{\text{amb}}^* = \frac{\mu_N^{\Delta} \mu_P^{\Delta}}{\mu_N^* + \mu_P^*} \left(\frac{\mu_P^*}{\mu_P^{\Delta}} - \frac{\mu_N^*}{\mu_N^{\Delta}} \right) \quad (\text{C.44})$$

$$\mu_{\text{amb}}^* > 0 \Leftrightarrow \frac{\mu_P^*}{\mu_P^{\Delta}} > \frac{\mu_N^*}{\mu_N^{\Delta}} \quad \text{---> le rapport des mobilités } \frac{\text{relaxation diélectrique}}{\text{dérive externe}} \text{ des}$$

trous est plus grand que le même rapport pour les électrons.

Il s'en suit que la neutralité locale sera assurée si la perturbation ambipolaire se déplace dans le sens donné par E_{ext} .

$$\mu_{\text{amb}}^* < 0 \Leftrightarrow \frac{\mu_P^*}{\mu_P^{\Delta}} < \frac{\mu_N^*}{\mu_N^{\Delta}} \quad \text{---> le rapport des mobilités } \frac{\text{relaxation diélectrique}}{\text{dérive externe}} \text{ des}$$

électrons est plus grand que le même rapport pour les trous.

Il s'en suit que la neutralité locale sera assurée si la perturbation ambipolaire se déplace dans un sens opposé à E_{ext} .

C.2.3. Solution à une excitation particulière: conditions de mesure du mode ambipolaire

Considérons le système Eq.(C.24) excité par une onde de Fourier:

$$\Delta G(x) = \Delta G_0 \exp\left(i \frac{2\pi}{\Lambda} x\right)$$

Λ est la longueur d'onde de l'excitation. L'exponentielle complexe ($\exp\left(i \frac{2\pi}{\Lambda} x\right)$) est une fonction isomorphe des systèmes linéaires et invariants. Le système Eq.(C.24), étant linéaire et invariant, on peut exprimer les solutions particulières de régime (sans tenir compte de conditions aux limites) comme:

$$\begin{aligned} \Delta n_{\text{part}}^*(x) &= Z_n \left(\frac{2\pi}{\Lambda}\right) \exp\left(i \frac{2\pi}{\Lambda} x\right) \\ \Delta p_{\text{part}}^*(x) &= Z_p \left(\frac{2\pi}{\Lambda}\right) \exp\left(i \frac{2\pi}{\Lambda} x\right) \end{aligned} \quad (\text{C.45})$$

Z_n et Z_p sont les fonctions de transferts pour Δn^* et Δp^* . Z_n et Z_p sont aussi les transformées de Fourier des réponses impulsionnelles: elles permettent d'obtenir les transformées de Fourier des solutions particulières de n'importe quelle excitation dont la transformée de Fourier existe. Je vais donc étudier Z_n et Z_p .

Calcul des fonctions de transfert en diffusion Z_n et Z_p :

En introduisant les solutions Eq.(C.45) dans le système Eq.(C.24) pour la diffusion (avec $E_{\text{ext}}=0$), on obtient l'équation des fonctions de transfert:

$$\begin{pmatrix} Z_n \\ Z_p \end{pmatrix} = \left[[T^{-1}] - \left(i \frac{2\pi}{\Lambda}\right)^2 [D^*] \right]^{-1} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \Delta G_0 \quad (\text{C.46})$$

En remarquant que (similitude avec l'équation aux valeurs propres des modes):

$$\text{DET} \left[[T^{-1}] - \left(i \frac{2\pi}{\Lambda}\right)^2 [D^*] \right] = \frac{1}{T_d \tau_{\text{amb}}^*} \left(L_-^2 \left(\frac{2\pi}{\Lambda} \right)^2 + 1 \right) \left(L_+^2 \left(\frac{2\pi}{\Lambda} \right)^2 + 1 \right)$$

On obtient pour Z_n et Z_p :

$$Z_n \left(\frac{2\pi}{\Lambda} \right) = \frac{\tau_{amb}^* \Delta G_o}{(L_-^2 \left(\frac{2\pi}{\Lambda} \right)^2 + 1) (L_+^2 \left(\frac{2\pi}{\Lambda} \right)^2 + 1)} \left(1 + \left(\frac{2\pi}{\Lambda} \right)^2 T_d (D_{PP}^* - D_{NP}^*) \right) \quad (C.47)$$

$$Z_p \left(\frac{2\pi}{\Lambda} \right) = \frac{\tau_{amb}^* \Delta G_o}{(L_-^2 \left(\frac{2\pi}{\Lambda} \right)^2 + 1) (L_+^2 \left(\frac{2\pi}{\Lambda} \right)^2 + 1)} \left(1 + \left(\frac{2\pi}{\Lambda} \right)^2 T_d (D_{NN}^* - D_{PN}^*) \right)$$

L_+ et L_- sont les deux longueurs caractéristiques générales des modes en diffusion (Eq.(C29)).

Lorsque la condition life time (Eq.(C.36)) pour la mode de diffusion ambipolaire est satisfaite, on a:

$$Z_n \left(\frac{2\pi}{\Lambda} \right) = \frac{\tau_{amb}^* \Delta G_o}{(L_{amb}^2 \left(\frac{2\pi}{\Lambda} \right)^2 + 1) (L_{diel}^2 \left(\frac{2\pi}{\Lambda} \right)^2 + 1)} \left(1 + \left(\frac{2\pi}{\Lambda} \right)^2 T_d (D_{PP}^* - D_{NP}^*) \right) \quad (C.48)$$

$$Z_p \left(\frac{2\pi}{\Lambda} \right) = \frac{\tau_{amb}^* \Delta G_o}{(L_{amb}^2 \left(\frac{2\pi}{\Lambda} \right)^2 + 1) (L_{diel}^2 \left(\frac{2\pi}{\Lambda} \right)^2 + 1)} \left(1 + \left(\frac{2\pi}{\Lambda} \right)^2 T_d (D_{NN}^* - D_{PN}^*) \right)$$

Remarque:

Remarquons que la condition life time Eq.(C.36) n'est pas suffisante ni nécessaire pour avoir la neutralité locale pour les solutions particulières. La condition life time n'implique que l'apparition des deux longueurs L_{amb} et L_{diel} dans Z_n et Z_p .

De Eq.(C.48) on tire deux conditions de la neutralité locale pour les solutions particulières:

$$\left. \begin{array}{l} \Lambda^2 \gg T_d (D_{PP}^* - D_{NP}^*) \\ \Lambda^2 \gg T_d (D_{NN}^* - D_{PN}^*) \end{array} \right\} \Leftrightarrow Z_n \left(\frac{2\pi}{\Lambda} \right) = Z_p \left(\frac{2\pi}{\Lambda} \right) \quad (C.49)$$

Remarque:

l'exclut les situations très particulières et probablement purement spéculatives des cas $D_{PP}^* - D_{NP}^* = D_{NN}^* - D_{PN}^*$, $D_{PP}^* = D_{NP}^*$ et $D_{NN}^* = D_{PN}^*$ donnant $Z_n = Z_p, \forall \Lambda$. La condition Eq.(C.49) se joue avec le choix du temps de relaxation diélectrique T_d (lequel

est donné par la photoconductivité grand signal Eq.(C.28) (intensité du grand-signal) et le choix de la longueur d'onde de l'excitation Λ .

La condition Eq.(C.49) peut s'exprimer avec la longueur de relaxation diélectrique:

condition ambipolaire pour la diffusion:

$$\Lambda \gg L_{\text{diel}} \Rightarrow Z_n \left(\frac{2\pi}{\Lambda} \right) = Z_p \left(\frac{2\pi}{\Lambda} \right) \quad (\text{C.50})$$

La condition ambipolaire Eq.(C.50) ne surprend pas: elle exprime que c'est la relaxation diélectrique qui assure la neutralité locale (comparez avec la condition life time Eq.(C.36))
La figure C.2 représentent Z_n et Z_p dans un diagramme de Bode.

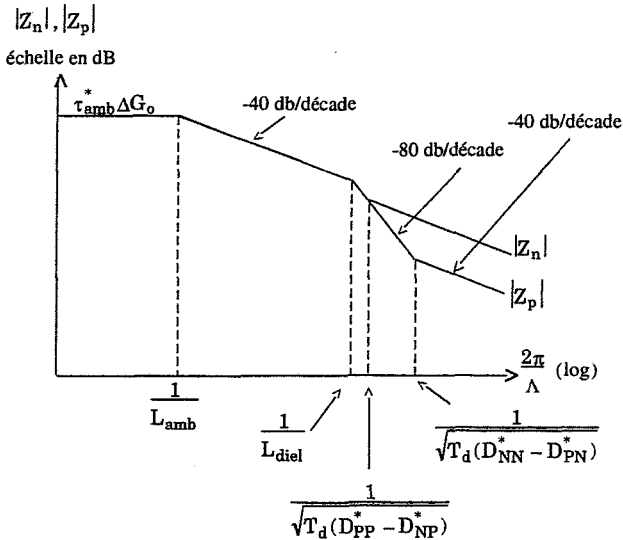


Figure C.2: diagramme de Bode des fonctions de transfert en diffusion, Z_n et Z_p (Eq.C.48), lorsque la condition life time ($L_{\text{amb}} \gg L_{\text{diel}}$) s'applique. La neutralité locale pour les solutions particulières ($Z_n=Z_p$) est réalisée si la longueur d'onde Λ est très supérieure à L_{diel} .

En condition life time et en condition ambipolaire, Z_n et Z_p seront:

Fonctions de transfert en conditions life time et ambipolaire: .

$$Z_n\left(\frac{2\pi}{\Lambda}\right) = Z_p\left(\frac{2\pi}{\Lambda}\right) = \frac{\tau_{amb}^* \Delta G_0}{(L_{amb}^2 \left(\frac{2\pi}{\Lambda}\right)^2 + 1)} \quad (C.51)$$

Mesure de L_{amb} :

Les conditions de validité de Eq.(C.51) donnent les conditions de mesure de L_{amb} . Eq.(C.51) montre que L_{amb} se déduira d'une représentation de la grandeur mesurée en fonction de Λ . Si $\Lambda \ll L_{amb}$, les expressions des fonctions de transfert (Eq.(C.48)) montrent que la grandeur mesurée sera une combinaison de L_{amb} et de L_{diel} . Si Λ est trop grand ($\Lambda \gg L_{amb}$), Eq.(C.50) montre que la grandeur mesurée ne dépendra plus de L_{amb} et donc on ne peut plus mesurer L_{amb} ; cette situation correspond à une mesure avec un petit signal pratiquement uniforme. Pour mesurer L_{amb} il faudra varier Λ dans l'ordre de grandeur de L_{amb} .

La page suivante donne les conditions de mesure de L_{amb} .

Tableau C.1: conditions de mesure de la longueur de diffusion ambipolaire

<p>condition de linéarisation (c'est une condition sur le rapport des intensités lumineuses grand-signal / petit-signal)</p>	$\Delta G_0 \ll G_0$
<p>condition life time Elle donne l'existence du mode ambipolaire (la relaxation diélectrique assure la neutralité locale pour la réponse à une perturbation imposée aux conditions aux limites)</p>	$L_{amb} \gg L_{diel}$
<p>Condition ambipolaire Elle assure que la réponse particulière à une excitation particulière (petit-signal) satisfait la neutralité locale. (ici également, la relaxation diélectrique assure la neutralité locale)</p>	$\Lambda \gg L_{diel}$
<p>condition de diffusion (le transport ne se fait que par diffusion et dérive interne (relaxation diélectrique)) (en pratique on applique une petite tension externe ($E_{ext} > 0$) pour faire la mesure)</p>	$E_{ext} \ll \Delta E \leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} E_{ext} \ll \frac{kT/e}{L_{amb}} \\ \text{et} \\ E_{ext} \ll \frac{kT/e}{\Lambda} \end{array} \right\}$

Calcul des fonctions de transfert en dérive:

En introduisant les solutions Eq.(C.45) dans le système Eq.(C.24) pour la dérive (en supprimant les termes de diffusion), on obtient l'équation des fonctions de transfert en dérive:

$$\begin{pmatrix} Z_n \\ Z_p \end{pmatrix} = \left[[T^{-1}] - E_{ext} \left(i \frac{2\pi}{\Lambda} \right) [\mu^*] \right]^{-1} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \Delta G_0 \quad (C.52)$$

Cette équation est formellement semblable à celle pour le cas diffusion Eq.(C.46). On notera l'abaissement du degré du terme $i \frac{2\pi}{\Lambda}$ et la matrice des mobilités $[\mu^*]$ à la place de la matrice des constantes de diffusion $[D^*]$.

On obtient, lorsque la condition life time pour la dérive (Eq.(C.41)) est satisfaite:

$$Z_n\left(\frac{2\pi}{\Lambda}\right) = \frac{\tau_{amb}^* \Delta G_o}{(L_{amb}^{dér}\left(i \frac{2\pi}{\Lambda}\right) - 1) (L_{diel}^{dér}\left(i \frac{2\pi}{\Lambda}\right) - 1)} \left(1 - \left(i \frac{2\pi}{\Lambda}\right) T_d(\mu_{PP}^* + \mu_{NP}^*) E_{ext}\right) \quad (C.53)$$

$$Z_p\left(\frac{2\pi}{\Lambda}\right) = \frac{\tau_{amb}^* \Delta G_o}{(L_{amb}^{dér}\left(i \frac{2\pi}{\Lambda}\right) - 1) (L_{diel}^{dér}\left(i \frac{2\pi}{\Lambda}\right) - 1)} \left(1 + \left(i \frac{2\pi}{\Lambda}\right) T_d(\mu_{NN}^* + \mu_{PN}^*) E_{ext}\right)$$

De Eq.(C.53), on tire deux conditions de la neutralité locale pour les solutions particulières:

$$\left. \begin{array}{l} \Lambda \gg T_d(\mu_{PP}^* + \mu_{NP}^*) E_{ext} \\ \Lambda \gg T_d(\mu_{NN}^* + \mu_{PN}^*) E_{ext} \end{array} \right\} \Leftrightarrow Z_n\left(\frac{2\pi}{\Lambda}\right) = Z_p\left(\frac{2\pi}{\Lambda}\right) \quad (C.54)$$

La condition Eq.(C.54) peut s'exprimer avec la longueur de relaxation diélectrique.

Condition ambipolaire pour la dérive:

$$\Lambda \gg L_{diel}^{dér} \Rightarrow Z_n\left(\frac{2\pi}{\Lambda}\right) = Z_p\left(\frac{2\pi}{\Lambda}\right) \quad (C.55)$$

Eq.(C.55) exprime que la relaxation diélectrique peut assurer la neutralité locale.

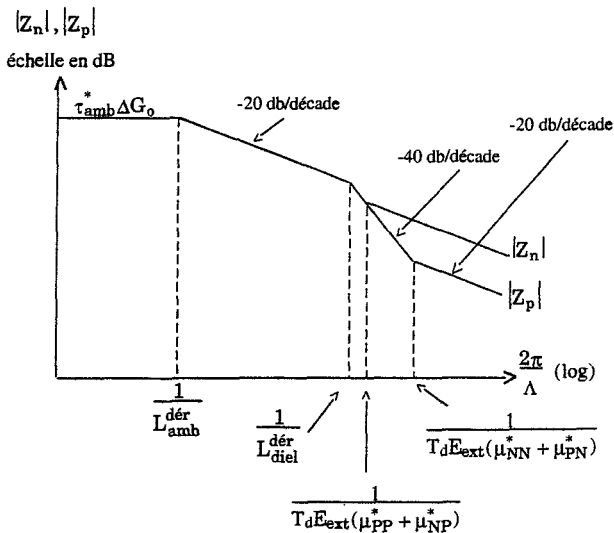


Figure C.3: diagramme de bode des fonctions de transfert en dérive lorsque la condition life time s'applique ($L_{amb}^{dér} \gg L_{diel}^{dér}$).

Fonction de transfert pour la dérive en conditions life time et ambipolaire:

$$Z_n\left(\frac{2\pi}{\Lambda}\right) = Z_p\left(\frac{2\pi}{\Lambda}\right) = \frac{\tau_{amb}^* \Delta G_0}{\left(1 - L_{amb}^{dér} \left(\frac{2\pi}{\Lambda}\right)\right)} \quad (C.56)$$

On tirera des conclusions tout à fait similaire au cas diffusion pour la mesure de $L_{amb}^{dér}$. Je me réfère au tableau C.1 où l'on remplacra $L_{diel}^{dér}$ par $L_{diel}^{dér}$ et L_{amb} par $L_{amb}^{dér}$.

Remarque:

Dans cette analyse je ne considère pas le cas purement spéculatif de $L_{amb}^{dér} = 0$ ($\mu_{amb}^* = 0$).

C.3. Caractérisation du a-Si:H par les mesures petit signal et grand signal (produits $\mu\tau$) et vérification du modèle

Je me base, pour ce chapitre, sur les mesures systématiques de photoconductivité et de transport ambipolaire pour des couches en a-Si:H micro-dopées, nondopées, dégradées et non dégradées qui on fait l'objet de la thèse de doctorat de Sauvain (1992).

La variation en microdopage p et n, faite dans Sauvain (1992), a permis de varier le rapport des porteurs libres n/p_f , sous condition d'illumination, à fin de pouvoir parcourir par les mesures les 5 situations remarquables des liaisons pendantes du tableau B.7 (paragraphe B.3.2).

Ici, la stratégie n'est pas d'obtenir des expressions des grandeurs mesurées valables pour toutes intensités de la lumière (ce qui serait impossible ou illisible, vu la complexité des expressions obtenues des fonctions de recombinaison et des charges électriques au chapitre B.3, et seule une simulation numérique pourrait tenir compte à la fois de toutes les contributions des états localisés).

Je prends d'emblée des conditions particulières de travail, permettant:

Premièrement:

- de vérifier particulièrement le modèle de la recombinaison par les états des liaisons pendantes: la nécessité d'un modèle tenant compte des 3 conditions d'occupation avec une hiérarchie des sections efficaces de capture telle que donnée en Eq.(B.33), hiérarchie permettant la séparation distincte des 5 situations remarquables du Tableau B.7.

Cela dans le but de proposer la fonction de recombinaison et les expressions pour les charges électriques obtenues pour les liaisons pendantes comme outil d'analyse à d'autres expériences en conditions similaires (par exemple des mesures avec petit-signal non stationnaire et grand-signal stationnaire) et surtout à l'analyse de dispositifs tels que la cellule solaire p-i-n en a-Si:H. Je considérerai que la recombinaison par les états des liaisons pendantes est un des facteurs principaux de la limitation des performances des cellules solaires en a-Si:H (voir chapitre C.4). Lorsque je parlerai de dégradation du matériau, il

s'agira de l'augmentation de la densité volumique des liaisons pendantes N_{DB} (voir dégradation du matériau à la fin du paragraphe B.1.2).

Deuxièmement:

- de pouvoir mesurer les paramètres du matériau concernant les états des liaisons pendantes, étant donné l'importance de ces états pour les cellules solaires comme mentionné sous "premièrement". L'espoir est que l'on puisse déduire, des mesures de photoconductivité et de transport ambipolaire en régime stationnaire, les paramètres intéressants. C'est à dire de travailler dans des conditions particulières pour lesquelles les paramètres déduits sont:
 - ceux des états des liaisons pendantes
 - que ces paramètres mesurés ne soient pas trop relatifs aux conditions de mesure, c'est à dire qu'ils donnent des valeurs exprimant la qualité du matériau.

Tableau C.2: Condition de mesure des centres de recombinaison des états des liaisons pendantes:

- Les niveaux de démarcation E_{TSn} et E_{TSp} doivent être situés respectivement dans la queue de bande de conduction et dans la queue de bande de valence. C'est une condition d'illumination suffisamment intense.
- les mêmes niveaux E_{TSn} et E_{TSp} doivent être situés respectivement au début de la queue de bande de conduction et au début de la queue de bande de valence. Et cela pour pouvoir négliger la recombinaison dans les queues de bandes. C'est une condition d'illumination pas trop intense.

Remarque:

- Ces deux conditions dictent un choix de l'intensité de lumière de travail pour l'expérimentateur. Les mesures de Sauvain (1992) s'expliquent avec les seuls centres de recombinaison des liaisons pendantes (paragraphe C.3.4 et C.3.5). J'en déduis que, pour l'intensité de la lumière du grand signal choisie pour les mesures de Sauvain, les centres de recombinaison des queues de bande ont un effet négligeables: voir estimation numérique des positions des niveaux de

démarcation déduites des mesures de σ_{phot} et de L_{amb} au début du paragraphe C.3.4 et la discussion qui suit après dans ce même paragraphe .

On trouvera dans ce chapitre des simplifications de premier ordre. Ces simplifications ont l'avantage de dégager, par voie purement **analytique** et non numérique, des **informations de première base** (le squelette en quelque sorte) sur le comportement du matériau lors de la mesure, selon les différents cas de dopage et de dégradation, sans s'embarrasser des informations de seconde importance, lesquelles, d'ailleurs, ne pourraient être obtenues que par résolution numérique.

C.3.1. Photoconductivité (σ_{phot}) et longueur de diffusion ambipolaire (L_{amb}) en termes de porteurs libres.

Equations de base pour déduire, de σ_{phot} et de L_{amb} , les paramètres du matériau.

La description de la mesure de la photoconductivité (σ_{phot}) et de la longueur de diffusion ambipolaire (L_{amb}), pour le cadre de mon modèle, a été faite dans Sauvain (1992) (pour L_{amb} mesure SSPG: Steady-State Photocarrier Grating). La mesure de L_{amb} est une mesure petit-signal pour laquelle la théorie du chapitre C.2 s'applique (voir tableau C.1, paragraphe C.2.3, pour les conditions de mesure du mode ambipolaire, et voir la discussion au début du paragraphe C.3.4). La mesure de σ_{phot} est une mesure grand signal uniforme (illumination uniforme).

Pour exprimer σ_{phot} et L_{amb} en fonction des paramètres du matériau, il faut introduire, dans la théorie du chapitre C.2, les expressions explicites pour la fonction de recombinaison R_{DB} et pour les différentes contributions à la charge électrique totale ρ_{total} , obtenues au chapitre B.3. Les expressions pour R_{DB} et les différentes charges sont connues comme des fonctions des porteurs libres n_f et p_f . Je vais, donc d'abord, de l'expression pour L_{amb} (Eq.(C.25) obtenue au paragraphe C.2.2, dériver une expression en termes de porteurs libres.

Longueur de diffusion ambipolaire en terme de porteurs libres

De Eq.(C.25):

$$L_{\text{amb}}^2 = D_{\text{amb}}^* \tau_{\text{amb}}^* = D_{\text{amb}}^* \Delta n^* \frac{\tau_{\text{amb}}^*}{\Delta n^*}$$

Avec la définition de D_{amb}^* (Eq.(C.25)) et que $\left\{ \begin{array}{l} \mu_N^* N^* = \mu_n^0 N_f \\ \mu_p^* P^* = \mu_p^0 P_f \end{array} \right\}$ (par Eq.(C.13)), on obtient:

$$D_{\text{amb}}^* = \frac{\mu_n^0 N_f D_p^* + \mu_p^0 P_f D_N^*}{\mu_n^0 N_f + \mu_p^0 P_f}$$

Avec les définitions de D_p^* et D_N^* (Eqs.(C.25 et C.13)), et utilisant la neutralité locale du mode ambipolaire $\Delta n^* = \Delta p^*$, on obtient:

$$D_p^* \Delta n^* = D_p^0 \left(\frac{\partial p_f}{\partial p^*} + \frac{\partial p_f}{\partial n^*} \right)_0 \Delta n^* = D_p^0 \Delta p_f$$

$$D_N^* \Delta n^* = D_n^0 \left(\frac{\partial n_f}{\partial p^*} + \frac{\partial n_f}{\partial n^*} \right)_0 \Delta n^* = D_n^0 \Delta n_f$$

Ainsi (et utilisant la relation d'Einstein):

$$D_{\text{amb}}^* \Delta n^* = \frac{kT}{e} \frac{\mu_n^0 \mu_p^0}{\mu_n^0 N_f + \mu_p^0 P_f} (N_f \Delta p_f + P_f \Delta n_f)$$

Avec les définitions de τ_{amb}^* , τ_n^* et τ_p^* (Eq.(C.20 et C.25)):

$$\frac{\Delta n^*}{\tau_{\text{amb}}^*} = \left(\frac{1}{\tau_n^*} + \frac{1}{\tau_p^*} \right) \Delta n^* = \left(\frac{\partial R}{\partial n^*} + \frac{\partial R}{\partial p^*} \right)_0 \Delta n^* = \Delta R$$

Ainsi:

$$L_{\text{amb}}^2 = D_{\text{amb}}^* \tau_{\text{amb}}^* = \frac{kT}{e} \frac{\mu_n^0 \mu_p^0}{\mu_n^0 N_f + \mu_p^0 P_f} \left(N_f \frac{\Delta p_f}{\Delta R} + P_f \frac{\Delta n_f}{\Delta R} \right)$$

Remarquez que les termes $\frac{\Delta n_f}{\Delta R}$ et $\frac{\Delta p_f}{\Delta R}$ sont des dérivées totales fixées par le grand-signal. L'équation de continuité du grand-signal étant $R=G_0$, on aura $\frac{\Delta n_f}{\Delta R} = \frac{dn_f}{dG_0}$ et

$$\frac{\Delta p_f}{\Delta R} = \frac{dp_f}{dG_0}$$

Expressions de la photoconductivité, σ_{phot} , et de la longueur de diffusion ambipolaire, L_{amb}^2 , en termes de porteurs libres:

$$\begin{aligned}\sigma_{\text{phot}} &= \mu_n^0 N_f + \mu_p^0 P_f \\ L_{\text{amb}}^2 &= \frac{kT}{e} \frac{\mu_n^0 \mu_p^0}{\mu_n^0 N_f + \mu_p^0 P_f} \left(N_f \frac{dP_f}{dG_0} + P_f \frac{dN_f}{dG_0} \right) \\ \text{ou bien} & \\ L_{\text{amb}}^2 &= \frac{kT}{e} \frac{\mu_n^0 \tau_N^R \mu_p^0 \tau_P^R}{\mu_n^0 \tau_N^R + \mu_p^0 \tau_P^R} \xi\end{aligned}\tag{C.57}$$

Définition des temps de recombinaison des porteurs libres:

$$\tau_N^R = \frac{N_f}{G_0} \quad \text{et} \quad \tau_P^R = \frac{P_f}{G_0}\tag{C.58}$$

Le coefficient ξ dans Eq.(C.57) vaut:

$$\xi = \frac{G_0}{P_f} \frac{dP_f}{dG_0} + \frac{G_0}{N_f} \frac{dN_f}{dG_0}$$

Remarques:

- L'expression de la longueur de diffusion L_{amb}^2 (Eq.(C.57)), exprimée avec les temps de recombinaison des porteurs libres, suggère une **longueur de diffusion réduite**, analogiquement à la masse réduite utilisée en mécanique pour décrire le mouvement relatif de deux masses, les deux masses étant liées par leur force d'attraction mutuelle.

Interprétation de L_{amb}^2 en terme de porteurs libres:

La longueur de diffusion L_{amb}^2 est une longueur réduite (sur les deux longueurs de diffusion des porteurs libres, $\frac{kT}{e} \mu_n^0 \tau_N^R$ et $\frac{kT}{e} \mu_p^0 \tau_P^R$) et elle exprime que la diffusion des trous libres et celle des électrons libres sont liées par le champ interne de relaxation diélectrique, lequel maintient la neutralité locale (voir analyse du mode ambipolaire au paragraphe C.2.2).

- ξ est un facteur correctif qui vaut la somme des exposants des lois de puissance de N_f et P_f avec G_0 , si N_f et P_f sont des lois de puissance de G_0 . Les mesures de Sauvain (1992) montrent que l'on a toujours observé, pour les lois de puissance de σ_{phot} et de L_{amb}^2 avec G_0 , des exposants de l'ordre de l'unité (voir paragraphe C.3.4, figure C.5), ξ est donc de l'ordre de l'unité (voir au paragraphe C.3.2 la signification de σ_{phot} et de L_{amb}^2 lorsqu'une distinction entre porteurs majoritaires et entre porteurs minoritaires a lieu). Je ne tiendrai plus compte de ce facteur correctif pour la suite de ce chapitre.

Equations de base pour N_f et P_f permettant d'obtenir les dépendances de σ_{phot} et de L_{amb}^2 (Eq.57) avec les paramètres du matériau et avec G_0 :

Ce sont les équations grand-signal donnée au chapitre C.2 (Eq.C.14), mais exprimées en porteurs libres.

$$\begin{array}{l} \text{continuité: } R_{\text{total}}(N_f, P_f) = G_0 \\ \text{neutralité} \\ \text{locale } \rho_{\text{total}}^+(N_f, P_f) = \rho_{\text{total}}^-(N_f, P_f) \end{array} \quad (\text{C.59})$$

De Eq.(C.59), on obtient les dépendances de N_f et P_f avec G_0 et avec les paramètres du matériau, R_{total} et ρ_{total} contenant ces paramètres, et par là également on obtient la dépendance de σ_{phot} et L_{amb}^2 avec les mêmes paramètres.

Pour être général R_{total} et ρ_{total} doivent comprendre toutes les contributions de la densité des états localisés. Selon les réflexions et objectifs présentés au début du chapitre, je me limite à ne prendre en considération que la recombinaison par les états des liaisons pendantes:

Hypothèse de condition d'illumination de travail:

$$R_{\text{total}} \approx R_{\text{DB}}$$

(voir Tableau C.2, condition de mesure des centres de recombinaison des états des liaisons pendantes et l'estimation de la position des niveaux de démarcation et la discussion suivant au début du paragraphe C.3.4)

On verra dans l'étude détaillée des cas particulier (selon les différents dopages), qu'il n'est pas nécessaire de prendre en considération toutes les contributions à la charge totale ρ_{totale} , c'est à dire que, selon les cas, je prendrai des formes certes très simplifiées de ρ_{total} , mais conservant les informations essentielles, de la neutralité locale.

C.3.2. Produits $\mu\tau$ caractérisant la qualité du matériau et produits "mobilité \times temps de recombinaison"

Cas des électrons libres majoritaires $N_f \gg P_f$ (de Eq.(C.57)):

$$\begin{aligned}\sigma_{\text{phot}} &= \mu_n^o N_f = \mu_n^o \tau_n^R G_o \\ I_{\text{amb}}^2 &= \frac{kT}{e} \mu_p^o \frac{P_f}{G_o} = \frac{kT}{e} \mu_p^o \tau_p^R\end{aligned}\quad (\text{C.60})$$

Cas des trous libres majoritaires $P_f \gg N_f$ (de Eq.(C.57)):

$$\begin{aligned}\sigma_{\text{phot}} &= \mu_p^o P_f = \mu_p^o \tau_p^R G_o \\ I_{\text{amb}}^2 &= \frac{kT}{e} \mu_n^o \frac{N_f}{G_o} = \frac{kT}{e} \mu_n^o \tau_n^R\end{aligned}\quad (\text{C.61})$$

$\rightarrow L_{\text{amb}}^2 =$ longueur de diffusion des porteurs libres minoritaires

Produits $\mu\tau$ de σ_{phot} et de I_{amb}^2 :

$(\mu\tau)_{\text{phot}} = (\text{mobilité de bande} \times \text{temps de recombinaison})_{\text{majoritaire}}$
 $(\mu\tau)_{\text{amb}} = (\text{mobilité de bande} \times \text{temps de recombinaison})_{\text{minoritaire}}$

Par l'équation de continuité grand-signal (Eq.(C.59)) et par l'hypothèse de condition d'illumination, $R_{\text{total}} \approx R_{\text{DB}}$ (et Eq.(B.30) pour R_{DB}), les temps de recombinaison des porteurs libres (Eq.(C.58)) sont:

$$\begin{aligned}\tau_N^R &= \frac{N_f}{R_{\text{DB}}} = \left[\frac{f_{\text{db}}^+}{\tau_n^+} + \frac{f_{\text{db}}^o}{\tau_n^o} \right]^{-1} \\ \tau_P^R &= \frac{P_f}{R_{\text{DB}}} = \left[\frac{f_{\text{db}}^o}{\tau_p^o} + \frac{f_{\text{db}}^-}{\tau_p^-} \right]^{-1}\end{aligned}\quad (\text{C.62})$$

Remarques:

- Les temps de capture τ_n^+ , τ_n^o , τ_p^o et τ_p^- , intervenant dans les temps de recombinaison τ_N^R et τ_P^R , sont des paramètres caractérisant les liaisons

pendantes. Ils dépendent par leurs définitions Eq.(B.29) de la densité totale N_{DB} et des sections efficaces de capture des liaisons pendantes. Les temps de recombinaison τ_N^R et τ_P^R dépendent aussi des fonctions d'occupations f_{db}^+ , f_{db}^0 et f_{db}^- , lesquelles sont très relatives aux conditions particulières de mesure et certes très différentes des conditions de travail d'une cellule solaire.

Donc, de façon générale, les produits "mobilité \times temps de recombinaison" que l'on déduit des mesures σ_{phot} et L_{amb}^2 , sont très relatifs à des conditions particulières et ne peuvent pas être, sans précautions, utilisés pour l'analyse des cellules solaires.

Il est à distinguer (A) et (B):

- (A) **Produits $\mu\tau$ caractérisant la qualité du matériau et donc pouvant être utiliser pour l'analyse des cellules solaires**

Ce sont les produits "mobilité \times temps de capture":

$$\begin{aligned} \mu_n^0 \tau_n^0 & \quad \mu_n^0 \tau_n^+ \\ \mu_p^0 \tau_p^0 & \quad \mu_p^0 \tau_p^- \end{aligned} \quad (C.63)$$

Les mobilités de bandes caractérisent la vitesse d'extraction des porteurs photogénérés, alors les temps de capture caractérisent la recombinaison des porteurs photogénérés; Ils sont dépendants de l'état de dégradation du matériau (N_{DB}).

- (B) **paramètres constants du matériau**

$$\frac{\mu_n^0}{\sigma_n^0}, \frac{\mu_n^0}{\sigma_n^+}, \frac{\mu_p^0}{\sigma_p^0} \text{ et } \frac{\mu_p^0}{\sigma_p^-}$$

Ils sont des constantes absolues des liaisons pendantes: ils ne dépendent pas de l'état de dégradation N_{DB}

- On verra au paragraphe C.3.4, une déduction des valeurs numériques des 4 produits "mobilité \times temps de capture" (Eq.(C.63)) en faisant correspondre les expressions théoriques générale de σ_{phot} et L_{amb}^2 (Eqs.(C.57)) aux mesures de σ_{phot} et L_{amb}^2 considérant l'ensemble des variations sur toutes la gamme de 5 situations remarquables (variation continue du cas1) au cas 5))

Par Eq.(C.62), pour des conditions particulières donnant aux fonctions d'occupation f_{db}^+ , f_{db}^0 et f_{db}^- des valeurs tranchées (1 et 0) , alors τ_N^R et τ_P^R peuvent se réduire à des produits "mobilité \times temps de capture".

En reprenant les 5 situations remarquables du tableau B.7 du paragraphe B.3.2, on obtient le tableau de la page suivante:

temps de recombinaison et produits s "mobilité \times temps de recombinaison"
pour les 5 situations "remarquables" des états des liaisons pendantes

Tableau C.3

$f^+ \approx 1 \gg f^0 \gg f^-$	$f^0 \approx 1 \gg f^+ \gg f^-$	$f^0 \approx 1 \gg f^+ \approx f^-$	$f^0 \approx 1 \gg f^- \gg f^+$	$f^- \approx 1 \gg f^0 \gg f^+$
$\tau_N^R = \tau_n^+$ $\tau_p^R = \tau_n^+ \frac{P_f}{N_f}$	$\tau_N^R = \tau_p^0 \frac{N_f}{P_f}$ $\tau_p^R = \tau_p^0$	$\tau_N^R = \left(\frac{1}{\tau_n^0} + \frac{1}{\tau_p^0} \frac{P_f}{N_f} \right)^{-1}$ $\tau_p^R = \left(\frac{1}{\tau_n^0} \frac{N_f}{P_f} + \frac{1}{\tau_p^0} \right)^{-1}$	$\tau_N^R = \tau_n^0$ $\tau_p^R = \tau_n^0 \frac{P_f}{N_f}$	$\tau_N^R = \tau_p^- \frac{N_f}{P_f}$ $\tau_p^R = \tau_p^-$
$(\mu\tau)_{\text{phot}} = \mu_p^0 \tau_n^+ \frac{P_f}{N_f}$ $(\mu\tau)_{\text{amb}} = \mu_n^0 \tau_n^+$	$(\mu\tau)_{\text{phot}} = \mu_p^0 \tau_p^0$ $(\mu\tau)_{\text{amb}} = \mu_n^0 \tau_p^0 \frac{N_f}{P_f}$	$(\mu\tau)_{\text{phot}} = \mu_n^0 \tau_N^R + \mu_p^0 \tau_p^R$ $(\mu\tau)_{\text{amb}} = \frac{\mu_n^0 \tau_N^R}{\mu_n^0 \tau_N^R + \mu_p^0 \tau_p^R} \frac{R}{\tau_p^R}$	$(\mu\tau)_{\text{phot}} = \mu_n^0 \tau_n^0$ $(\mu\tau)_{\text{amb}} = \mu_p^0 \tau_n^0 \frac{P_f}{N_f}$	$(\mu\tau)_{\text{phot}} = \mu_n^0 \tau_p^- \frac{N_f}{P_f}$ $(\mu\tau)_{\text{amb}} = \mu_p^0 \tau_p^-$
$\frac{n_f}{P_f} \ll \frac{\tau_n^+}{\tau_p^0}$ cas 1)	$\frac{\tau_n^+}{\tau_p^0} \ll \frac{n_f}{P_f} \ll \frac{\tau_n^0}{\tau_p^0}$ cas 2)	$\frac{n_f}{P_f} \approx \frac{\tau_n^0}{\tau_p^0}$ cas 3)	$\frac{\tau_n^0}{\tau_p^0} \ll \frac{n_f}{P_f} \ll \frac{\tau_n^+}{\tau_p^0}$ cas 4)	$\frac{n_f}{P_f} \gg \frac{\tau_n^0}{\tau_p^0}$ cas 5)

C.3.3. Prédiction théorique des lois de puissances de L_{amb}^2 , de σ_{phot} et de N_f/P_f avec G_0 , ainsi que des dépendances avec la dégradation, selon les différents cas (microdopé P, compensé, intrinsèque, microdopé N).

Stratégie:

- Les mesures de Sauvain (1992) montrent que la dépendance des grandeurs mesurées, σ_{phot} , L_{amb}^2 , ainsi que du rapport N_f/P_f , avec la photogénération G_0 peuvent s'approximer comme des lois de puissance.
 - Je vais prédire les lois de puissance des dépendances de σ_{phot} , de L_{amb}^2 et du rapport N_f/P_f avec la photogénération G_0 , ainsi que la dépendance de ces grandeurs avec la dégradation N_{DB} , en utilisant le **modèle de la recombinaison des états des liaisons pendantes** avec leurs trois conditions de charge et le modèle des pièges, tel que construit au chapitre B.3. Je ferais ces prédictions pour les 5 situations remarquables des tableaux B.7 et C.3.
 - Le lecteur, ne voulant pas étudier le détail des calculs dans une 1^{ière} étape, pourra passer directement à la fin du paragraphe et lire le **tableau C.4 et la figure C.4**, lesquels résument les résultats théoriques de ce paragraphe.
- définition des exposants des lois de puissance de G_0 :
- pour L_{amb}^2 : exposant = λ
 - pour σ_{phot} : exposant = γ
 - pour N_f/P_f : exposant = β

Rapport des charges des pièges n_t et p_t :

Je vais montrer que la situation $n_t=p_t$ se produit lorsque les électrons libres sont majoritaires, plus exactement au environ de la frontière entre les situations remarquables des cas 4) et cas 5), pour l'intensité de lumière du grand signal choisie pour les mesures (voir intensité de la lumière des mesures au début duparagraphe C.3.4)

Pour les situations remarquables cas 2), 3) et 4), je prendrai les expressions pour n_t et p_t suivantes (voir Tableau B.8, paragraphe B.3.4):

$$n_t = \frac{N_{cbl} kT}{1 - \alpha_n} \left(\frac{N_f}{N_c} \right)^{\alpha_n} \quad \text{et} \quad p_t = \frac{N_{vbl} kT}{1 - \alpha_p} \left(\frac{P_f}{N_v} \right)^{\alpha_p}$$

Admettant les valeurs numériques suivantes à température ambiante (voir valeurs numériques typiques au paragraphe B.1.2 et paragraphe B.3.4)

:

$$N_{cbl} kT \approx N_{vbl} kT \approx 10^{19} \text{ cm}^{-3}, \quad N_c \approx N_v \approx 10^{19} \text{ cm}^{-3}$$

$$\alpha_n = \frac{kT}{E_c^0} \approx 0.8 \quad \text{et} \quad \alpha_p = \frac{kT}{E_v^0} \approx 0.5$$

$$\mu_n^0 = 10 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}} \quad \text{et} \quad \frac{\mu_n^0}{\mu_p^0} = 3$$

De la mesure de σ_{phot} à la figure C.7 (paragraphe C.3.4):

- exemple numérique a)

$$b = \frac{\mu_n^0 N_f}{\mu_p^0 P_f} = 2 \times 10^4 \rightarrow \sigma_{\text{phot}} = 10^{-4} \Omega^{-1} \text{cm}^{-1} \rightarrow \begin{cases} N_f \approx 10^{14} \text{ cm}^{-3} \\ P_f \approx 10^{10} \text{ cm}^{-3} \end{cases}$$

$$\rightarrow n_t \approx 5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3} \gg p_t \approx 6 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$$

- exemple numérique b)

$$b = \frac{\mu_n^0 N_f}{\mu_p^0 P_f} = 10^2 \rightarrow \sigma_{\text{phot}} \approx 10^{-6} \Omega^{-1} \text{cm}^{-1} \rightarrow \begin{cases} N_f \approx 10^{12} \text{ cm}^{-3} \\ P_f \approx 3 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3} \end{cases}$$

$$\rightarrow n_t \approx 10^{14} \text{ cm}^{-3} \ll p_t \approx 10^{15} \text{ cm}^{-3}$$

L'exemple numérique a): $b = 2 \times 10^4$ sera identifié comme valeur se trouvant largement

dans la situation remarquable cas 5): $\frac{N_f}{P_f} \gg \frac{\tau_n^0}{\tau_p^0}$

L'exemple numérique b): $b = 10^2$ sera identifié comme valeur en fin de la situation

remarquable cas 4): $\frac{N_f}{P_f} < \frac{\tau_n^0}{\tau_p^0}$

La limite entre les situations remarquables cas 4) et le cas 5) sera située en

$$b = \frac{\mu_n^0 N_f}{\mu_p^0 P_f} = \frac{\mu_n^0 \tau_n^0}{\mu_p^0 \tau_p^0} \approx 3 \times 10^2 \quad (\text{figure C.5, paragraphe C.3.4})$$

Donc la situation où la charge des pièges d'électrons est égale à la charge des pièges de trous $n_t = p_t$ se produit lorsque les électrons libres sont fortement majoritaires : $N_f \gg P_f$ et au environ de la frontière entre les situations remarquables cas 4) et cas 5)

J'admettrai pour la charge des pièges :

$$n_t \ll p_t \text{ pour les situations remarquables } \left\{ \begin{array}{l} \text{cas1)} \\ \text{cas2)} \\ \text{cas3)} \\ \text{cas4)} \end{array} \right\} \frac{N_f}{P_f} \ll \frac{\tau_n^0}{\tau_p^0}$$

$$n_t \gg p_t \text{ pour la situation remarquable cas 5) } \left(\frac{N_f}{P_f} \gg \frac{\tau_n^0}{\tau_p^0} \right)$$

La dissymétrie du rapport des charges des pièges n_t/p_t par rapport aux situations remarquables provient de la dissymétrie des queues de bande $E_c^0 < E_v^0$. Que $n_t=p_t$ soit au environ de la frontière entre le cas 4) et le cas 5) provient également de l'intensité de la lumière choisie pour les mesures (voir paragraphe C.3.4).

Les charges des porteurs libres sont négligeables:

Avec la mesure de σ_{phot} , figure C.7 et les valeurs numérique:

$$N_{cbt}kT \approx N_{vbt}kT \approx 10^{19} \text{ cm}^{-3}, N_c \approx N_v \approx 10^{19} \text{ cm}^{-3}$$

$$\alpha_n = \frac{kT}{E_c^0} \approx 0.8 \text{ et } \alpha_p = \frac{kT}{E_v^0} \approx 0.5$$

$$\mu_n^0 = 10 \frac{\text{cm}^2}{V_s} \text{ et } \mu_p^0 = 3 \frac{\text{cm}^2}{V_s}$$

cas microdopé n:

$$b = \frac{\mu_n^0 N_f}{\mu_p^0 P_f} = 2 \cdot 10^4 \rightarrow \sigma_{\text{phot}} = 10^{-4} \Omega^{-1} \text{cm}^{-1} \rightarrow \left\{ \begin{array}{l} N_f \approx 10^{14} \text{ cm}^{-3} \\ P_f \approx 10^{10} \text{ cm}^{-3} \end{array} \right\} \text{ par Eq.(C.60)}$$

$$\left. \begin{array}{l} \text{----} \rightarrow n_t = 5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3} (\gg p_t) \\ \rho_{DB}^- = N_{DB} = 10^{15} \text{ à } 10^{18} \text{ cm}^{-3} (\gg \rho_{DB}^+) \end{array} \right\} \gg N_f$$

cas microdopé p:

$$b = \frac{\mu_n^0 N_f}{\mu_p^0 P_f} = 10^{-3} \rightarrow \sigma_{\text{phot}} = 6 \times 10^{-6} \Omega^{-1} \text{cm}^{-1} \rightarrow \left\{ \begin{array}{l} N_f \approx 10^{10} \text{ cm}^{-3} \\ P_f \approx 2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3} \end{array} \right\} \text{ par Eq.(C.61)}$$

$$\left. \begin{array}{l} \text{----} \rightarrow p_t = 3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3} (\gg n_t) \\ \rho_{DB}^+ = N_{DB} = 10^{15} \text{ à } 10^{18} \text{ cm}^{-3} (\gg \rho_{DB}^-) \end{array} \right\} \gg P_f$$

cas compensé:

$$b = \frac{\mu_n^0 N_f}{\mu_p^0 P_f} = 10^0 \rightarrow \sigma_{\text{phot}} = 2 \times 10^{-7} \Omega^{-1} \text{cm}^{-1} \rightarrow N_f \approx P_f \approx 0.3 \times 10^{12} \text{cm}^{-3}$$

$$p_t \approx 5 \times 10^{15} \text{cm}^{-3} (\gg n_t)$$

$$\rho_{\text{DB}}^- \approx \rho_{\text{DB}}^+ \approx \frac{\sigma_{n,p}^0}{\sigma_{\pm}^0} N_{\text{DB}} \approx \begin{cases} \frac{\sigma_{n,p}^0}{\sigma_{\pm}^0} 10^{15} \text{cm}^{-3} & (\text{non dégradé}) \\ \frac{\sigma_{n,p}^0}{\sigma_{\pm}^0} 10^{18} \text{cm}^{-3} & (\text{très dégradé}) \end{cases}$$

Que les charges des porteurs libres soient négligeables devant les charges des états localisés, provient du choix de l'intensité de la lumière grand signal pour les mesures (avec une intensité plus grande les porteurs libres ne seraient plus négligeables)

Sur ces considérations je vais pouvoir exprimer la neutralité locale pour les 5 situations remarquables.

situation remarquable cas 1)

$$\frac{N_f}{P_f} \ll \frac{\tau_n^+}{\tau_p^0} \ll 1 \leftarrow \text{microdopé p + hiérarchie Eq.(B.33)} \quad (\text{C.64})$$

$$\begin{aligned} R_{\text{DB}} &= \frac{N_f}{\tau_n^+} = G_0 && \text{continuité} \\ \rho_{\text{DB}}^+ + p_t &= \rho_{\text{doping}}^- && \left\{ \begin{array}{l} \text{neutralité locale} \\ \left\{ \begin{array}{l} p_t \gg n_t \\ \rho_{\text{DB}}^+ \gg \rho_{\text{DB}}^- \end{array} \right\} \leftarrow \text{Eq.(C.64)} \end{array} \right. \end{aligned} \quad (\text{C.65})$$

La charge due au dopage ρ_{doping}^- sera considérée comme constante.

Par Eq.(C.64) et par le Tableau B.8 des charges des pièges, la charge des pièges p_t est donnée par:

$$p_t(P_f) = \frac{N_{\text{vb}} kT}{1 - \alpha_p} \left(\frac{P_f}{N_v} \right)^{\alpha_p} \quad (\text{C.66})$$

Remarquez que p_t ne dépendant plus que d'un seul porteur libre P_f .

Les électrons libres étant minoritaires, la dépendance de L_{amb}^2 est immédiate (Eq.(C.61) + équation de continuité Eq.(C.65), et tableau C.3):

$$L_{amb}^2 = \frac{k\Gamma}{e} \mu_n^o \tau_n^+ \rightarrow \begin{cases} \lambda = 0 \text{ (constante de } G_o) \\ \propto \frac{1}{N_{DB}} \end{cases} \quad (C.67)$$

Les trous libres étant majoritaire, la photoconductivité est donnée par Eq.(C.61): $\sigma_{phot} \propto P_f$.

Pour la situation remarquable cas 1), de Eq.(C.64) les liaisons pendantes sont presque toutes ionisées positives: $\rho_{DB}^+ \approx N_{DB}$ (Tableau B.7). Si l'ionisation était totale, alors par la neutralité locale Eq.(C.65) et l'expression de $p_t(P_f)$ (Eq.66), la densité de porteur majoritaire P_f , et donc σ_{phot} , ne dépendrait pas de G_o . Une dépendance de σ_{phot} (ou P_f) avec G_o s'explique par une ionisation incomplète des liaisons pendantes. Une variation de ρ_{DB}^+ avec G_o est compensée par une variation de la charge des pièges p_t , et donc une variation de P_f avec G_o , ainsi que le montre le calcul suivant:

Avec Eq.(C.64) et l'expression de f_{DB}^+ (Eq.(B.27)), une ionisation incomplète s'écrit:

$$\rho_{DB}^+ = f_{DB}^+ N_{DB} \approx \frac{\frac{P_f \tau_n^+}{N_f \tau_p^o}}{\frac{P_f \tau_n^+}{N_f \tau_p^o} + 1} N_{DB} \approx \left(1 - \frac{N_f \tau_p^o}{P_f \tau_n^+}\right) N_{DB}$$

L'équation de neutralité s'écrit:

$$\begin{array}{lcl} N_{DB} + p_t(P_f) & = & \rho_{doping}^- = \text{const} \quad \leftarrow \text{ionisation totale} \\ \downarrow & & \downarrow \\ \rho_{DB}^+(G_o) + p_t(P_f(G_o)) & = & \rho_{doping}^- = \text{const} \quad \leftarrow \text{ionisation incomplète} \end{array}$$

Le calcul qui suit est valable pour une petite variation de l'ionisation des N_{DB}

$$\begin{aligned} \Delta \rho_{DB}^+ + \Delta p_t &= 0 \\ -\Delta \rho_{DB}^+ &= -\frac{d\rho_{DB}^+}{dG_o} \Delta G = \Delta p_t = \frac{dp_t}{dG_o} \Delta G \Rightarrow -\frac{d\rho_{DB}^+}{dG_o} = \frac{dp_t}{dG_o} \end{aligned}$$

D'où (+ l'équation de continuité Eq.(C.65) pour N_f):

$$-\frac{d\rho_{DB}^+}{dG_o} = -\left(\frac{\partial \rho_{DB}^+}{\partial N_f} \frac{dN_f}{dG_o} + \frac{\partial \rho_{DB}^+}{\partial P_f} \frac{dP_f}{dG_o}\right) = \frac{\tau_p^o}{P_f} \left(1 - \frac{G_o}{P_f} \frac{dP_f}{dG_o}\right) N_{DB}$$

$$\frac{dP_t}{dG_o} = \frac{dP_t}{dP_f} \frac{dP_f}{dG_o} = N_{vbt} kT \frac{\alpha_p}{1 - \alpha_p} \left(\frac{P_f}{N_v} \right)^{\alpha_p} \frac{G_o}{P_f} \frac{dP_f}{dG_o} \frac{1}{G_o}$$

En posant la loi de puissance de $\sigma_{\text{phot}}(P_f)$: $\gamma = \frac{G_o}{P_f} \frac{dP_f}{dG_o}$,

$$-\frac{dP_{DB}^+}{dG_o} = \frac{\tau_p^o}{P_f} N_{DB} (1 - \gamma) = \frac{dP_t}{dG_o} = N_{vbt} kT \frac{\alpha_p}{1 - \alpha_p} \left(\frac{P_f}{N_v} \right)^{\alpha_p} \gamma \frac{1}{G_o}$$

D'où, pour une petite variation de l'ionisation des N_{DB} , on aura la loi de puissance:

:

$$\frac{P_f}{N_v} = \left(\frac{1 - \gamma}{\gamma} \frac{1 - \alpha_p}{\alpha_p} \right)^{\frac{1}{\alpha_p + 1}} \left(\frac{N_{DB}}{N_v N_{vbt} kT} \tau_p^o G_o \right)^{\frac{1}{\alpha_p + 1}}$$

Donc:

$$\sigma_{\text{phot}} \propto P_f \propto \begin{cases} (G_o)^\gamma & \gamma = \frac{1}{\alpha_p + 1} > 0 \\ = \text{constante de } N_{DB} \end{cases} \quad (\text{C.68})$$

De l'équation de continuité pour N_f (Eq.C.65) et de Eq.(C.68):

$$\frac{N_f}{P_f} \propto \begin{cases} \beta = \frac{\alpha_p}{\alpha_p + 1} > 0 \\ \propto \frac{1}{N_{DB}} \end{cases} \quad (\text{C.69})$$

Remarque:

- Voir remarque après le tableau C.4 et la figure C.4 sur la difficulté voir l'impossibilité de faire des mesures de dépendance avec la dégradation N_{DB} tout en conservant la situation remarquable cas 1), donc de la difficulté de vérifier les dépendances en N_{DB} prédites pour ce cas. Par contre, on pourra sans problème vérifier les lois de puissance prédites avec G_o pour ce cas.

Situation remarquable cas 2)

Je n'obtiens pas de lois de puissance, au sujet des dépendances avec G_0 pour L_{amb}^2 , ni pour le rapport N_f/P_f : des lois de puissance pour ces deux grandeurs étant une approximation trop grossière (voir Eq.(C.74 et C.75).

Le microdopage p, pour que le matériau se trouve dans ce cas 2), est moins fort que le microdopage pour le cas 1) étudié précédemment.

$$\frac{\tau_n^+}{\tau_p^0} \ll \frac{N_f}{P_f} \ll \frac{\tau_n^0}{\tau_p^0} = 1 \quad \leftarrow \text{microdopé p + hiérarchie Eq.(B.33)} \quad (C.70)$$

$$R_{DB} = \frac{P_f}{\tau_p^0} = G_0 \quad \leftarrow \text{continuité} \quad (C.71)$$

$$\rho_{DB}^+ + p_t = \rho_{doping}^- \quad \leftarrow \left\{ \begin{array}{l} \text{neutralité locale} \\ \left\{ \begin{array}{l} p_t \gg n_t \\ \rho_{DB}^+ \gg \rho_{DB}^- \end{array} \right\} \leftarrow \text{Eq.(C.70)} \end{array} \right.$$

La charge des pièges p_t sera donnée par l'approximation Eq.(C.66). La charge ρ_{DB}^+ est donnée par son approximation au tableau B.7 cas 2).

Les trous libres étant majoritaires, et par l'équation de continuité (C.71), les dépendances de σ_{phot} sont immédiates (Eq.(C.61):

$$P_f \propto \sigma_{phot} = \mu_p^0 \tau_p^0 G_0 \rightarrow \begin{cases} \gamma = 1 \\ \propto \frac{1}{N_{DB}} \end{cases} \quad (C.72)$$

Dépendance de N_f :

$$\begin{array}{ccc} \rho_{DB}^+ & + & p_t(P_f) & = & \rho_{doping}^- \\ \downarrow & & \downarrow & & \downarrow \\ \frac{\tau_n^+ P_f}{\tau_p^0 N_f} N_{DB} & + & \frac{N_{vbt} kT}{1 - \alpha_p} \left(\frac{P_f}{N_v} \right)^{\alpha_p} & = & \rho_{doping}^- \end{array}$$

d'où, avec la continuité Eq.(C.71) pour P_f et Eq.(C.61) pour L_{amb}^2 :

$$N_f = N_{DB} \frac{\tau_n^+}{\tau_p^0} \frac{\tau_p^0 G_0}{\rho_{\text{doping}}^- - \frac{N_{vbt} kT}{1 - \alpha_p} \left(\frac{\tau_p^0 G_0}{N_v} \right)^{\alpha_p}} \quad (\text{C.73})$$

$$L_{\text{amb}}^2 \propto \frac{N_f}{G_0} = \frac{N_{DB} \tau_n^+}{\rho_{\text{doping}}^- - \frac{N_{vbt} kT}{1 - \alpha_p} \left(\frac{\tau_p^0 G_0}{N_v} \right)^{\alpha_p}} \quad (\text{C.74})$$

$$\frac{N_f}{P_f} = \frac{\tau_n^+}{\tau_p^0} \frac{N_{DB}}{\rho_{\text{doping}}^- - \frac{N_{vbt} kT}{1 - \alpha_p} \left(\frac{\tau_p^0 G_0}{N_v} \right)^{\alpha_p}} \quad (\text{C.75})$$

De Eq.(C.74), Eq.(C.75) :

$$\begin{aligned} L_{\text{amb}}^2 & \begin{cases} \text{augmente avec } G_0 \\ \text{diminue avec } N_B \end{cases} \rightarrow \lambda > 0 \\ \frac{N_f}{P_f} & \begin{cases} \text{augmente avec } G_0 \\ \text{augmente avec } N_{DB} \end{cases} \rightarrow \beta > 0 \end{aligned} \quad (\text{C.76})$$

et selon Eq.(C.74 et C.75): $\lambda = \beta$

C'est à dire que L_{amb}^2 et $\frac{N_f}{P_f}$ ont une même dépendance avec G_0 . Ici λ et β représentent des exposants de lois de puissance: c'est une approximation très grossière étant donné les formes de Eq.(C.74 et C.75)

Situation remarquable cas 3)

$$\frac{N_f}{P_f} \approx \frac{\tau_n^0}{\tau_p^0} \leftarrow \begin{cases} \text{compensé (très léger microdopage } p) \\ \text{ou non dopé, mais fortement dégradé} \end{cases} \quad (\text{C.77})$$

Les électrons libres sont majoritaires $N_f \gg P_f$ pour le a-Si:H non-dopé, non-dégradé et sous illumination (voir Sauvain (1992)). Ce cas 3) $\frac{N_f}{P_f} \approx \frac{\tau_n^0}{\tau_p^0}$ est obtenu soit en dopant p très légèrement, soit en dégradant fortement le matériau. En effet, on verra au Tableau C.4

(voir remarque après le Tableau C.4), ainsi qu'au paragraphe C.3.4, que la dégradation (l'augmentation de N_{DB}) ramène toujours le rapport N_f/P_f vers le cas de la colonne 3).

$$\begin{aligned} \frac{N_f}{\tau_n^0} + \frac{P_f}{\tau_p^0} &= G_0 && \leftarrow \text{continuité} \\ \rho_{DB}^+ + P_t &= \rho_{DB}^- + \rho_{doping}^- && \leftarrow \begin{cases} \text{neutralité locale} \\ \text{compensé et non - dégradé} \end{cases} \\ \rho_{DB}^+ &= \rho_{DB}^+ && \leftarrow \begin{cases} \text{neutralité locale} \\ \text{fortement dégradé} \end{cases} \end{aligned} \quad (C.78)$$

Remarques:

- La charge des pièges pour électron n_t est très inférieure à la charge des pièges pour trous p_t , malgré que $N_f \approx P_f$ (voir rapport des charges des pièges en début du paragraphe). Donc n_t n'intervient pas dans la neutralité de ce cas.
- Lorsque le matériau est fortement dégradé, N_{DB} est si important que la neutralité locale ne se fait plus que par l'équilibrage des liaisons pendantes ionisées négatives avec les liaisons pendantes ionisées positives.
- Vu que, pour ce cas 3), on ne peut plus distinguer en porteurs majoritaires et en porteurs minoritaires, les deux types de porteurs interviennent dans l'équation de continuité, dans l'expression de la photoconductivité, ainsi que la diffusion des deux porteurs intervient dans l'expression de la longueur de diffusion ambipolaire (voir tableau C.3, cas 3)). Poser l'égalité $N_f \approx P_f$ est une approximation trop grossière pour décrire le comportement de L_{amb} sur toute la plage couvrant le cas 3). On peut tout de même prédire un changement du signe l'exposant λ de la loi de puissance de L_{amb} :
 - un changement de signe de λ , en passant par $\lambda=0$, doit nécessairement se produire dans la plage couvrant le cas 3), car dans le cas 2), on a obtenu $\lambda>0$ (Eq.C.(76)), et on verra lors de l'analyse du cas 4) que $\lambda<0$.

Par l'équation de continuité Eq.(C.78) et avec la plage du cas 3) ($N_f < P_f$, $N_f \approx P_f$, $N_f > P_f$) on peut dire approximativement pour la photoconductivité que $\gamma \approx 1$ et est proportionnelle avec $1/N_{DB}$.

$$\sigma_{\text{phot}} \leftarrow \begin{cases} \gamma = 1 \\ \propto \frac{1}{N_{\text{DB}}} \end{cases}$$

$$L_{\text{amb}}^2 \leftarrow \begin{cases} \lambda \text{ change de signe et passe par } \lambda = 0 \\ \propto \frac{1}{N_{\text{DB}}} \end{cases} \quad (\text{C.81})$$

Par contre, il est difficile de prédire un résultat pour le rapport N_f/P_f sans résolution numérique. Je ne le fais pas pour ce cas.

Situation remarquable cas 4):

$$\frac{\tau_n^0}{\tau_p^0} \ll \frac{N_f}{P_f} \ll \frac{\tau_n^0}{\tau_p^0} \leftarrow \begin{cases} \text{non dopé, non dégradé} \\ + \text{ hiérarchie Eq.(B.33)} \end{cases} \quad (\text{C.82})$$

$$\frac{N_f}{\tau_n^0} = G_0 \leftarrow \text{continuité}$$

$$\rho_{\text{DB}}^- = p_t \leftarrow \begin{cases} \text{neutralité locale} \\ \rho_{\text{DB}}^- \gg \rho_{\text{DB}}^+ \text{ et } n_t \ll p_t \end{cases} \quad (\text{C.83})$$

Remarque:

- Bien que $N_f \gg P_f$, on a encore $n_t \ll p_t$ pour la situation remarquable cas 4). Cela par la forte dissymétrie des queues de bande $E_c^0 < E_v^0$ (voir rapport des charges des pièges au début de ce paragraphe). La neutralité et la continuité ainsi posées Eq.(C.83) permettront de prédire correctement le comportement de L_{amb} , de σ_{phot} et du rapport N_f/P_f pour un matériau non dopé et non dégradé (voir tableau des prédictions C.4, figure C.4, et paragraphe C.3.4 avec figures C.5 et C.6)

Les électrons libres étant majoritaires, par l'équation de continuité Eq.(C.83), le comportement de σ_{phot} (Eq.C.60) est immédiat:

$$N_f \propto \sigma_{\text{phot}} = \mu_n^0 \tau_n^0 G_0 \leftarrow \begin{cases} \gamma = 1 \\ \propto \frac{1}{N_{\text{DB}}} \end{cases} \quad (\text{C.84})$$

La neutralité s'écrit (Tableau B.7 pour ρ_{DB}^- et Tableau B.8 pour p_t):

$$\begin{array}{ccc} \rho_{DB}^- & & p_t \\ \downarrow & & \downarrow \\ \frac{\tau_p^-}{\tau_n^0} \frac{N_f}{P_f} N_{DB} & = & \frac{N_{vbt} kT}{1 - \alpha_p} \left(\frac{P_f}{N_v} \right)^{\alpha_p} \end{array} \quad (C.85)$$

De l'équation de continuité $N_f = \tau_n^0 G_o$ avec la neutralité Eq.(C.85), on obtient (Eq.C.60 pour L_{amb}^2):

$$P_f \leftarrow \begin{cases} \propto G_o^{1+\alpha_p} \\ \text{constante de } N_{DB} \end{cases}$$

et:

$$L_{amb}^2 \propto \frac{P_f}{G_o} \leftarrow \begin{cases} \lambda = -\frac{\alpha_p}{1+\alpha_p} < 0 \\ \text{constante de } N_{DB} \end{cases}$$

$$\frac{N_f}{P_f} \leftarrow \begin{cases} \beta = \frac{\alpha_p}{1+\alpha_p} > 0 \\ \propto \frac{1}{N_{DB}} \end{cases} \quad (C.86)$$

On remarquera que ayant $\gamma=1$, alors $\beta = -\lambda$

Situation remarquable cas 5)

$$\frac{N_f}{P_f} \gg \frac{\tau_n^0}{\tau_p^-} \gg 1 \leftarrow \{\text{microdopé } n + \text{hiérarchie Eq.(B.33)} \quad (C.87)$$

$$\frac{P_f}{\tau_p^-} = G_o \quad \leftarrow \text{continuité}$$

$$\rho_{DB}^- + n_t = \rho_{doping}^+ \leftarrow \begin{cases} \text{neutralité locale} \\ \rho_{DB}^- \gg \rho_{DB}^+ \text{ et } n_t \gg p_t \end{cases} \quad (C.88)$$

La charge due au dopage ρ_{doping}^+ sera considérée comme constante. La charge des pièges des trous est négligeable devant la charge des pièges d'électron (voir rapport des charges des pièges en début de ce paragraphe).

On pourra prendre l'expression suivante pour la charge des pièges d'électrons (Tableau B.8):

$$n_t(N_f) = \frac{N_{\text{cvt}} kT}{1 - \alpha_n} \left(\frac{N_f}{N_v} \right)^{\alpha_n} \quad (\text{B.89})$$

Remarquons que n_t ne dépend plus que d'un seul porteur libre N_f .

La dépendance de L_{amb}^2 (Eq.C.60) est immédiate (par l'équation de continuité Eq.(C.88):

$$L_{\text{amb}}^2 = \frac{kT}{e} \mu_p^0 \tau_p^- \rightarrow \begin{cases} \lambda = 0 \text{ (constante de } G_0) \\ \infty \frac{1}{N_{\text{DB}}} \end{cases} \quad (\text{C.90})$$

Pour la suite, la démarche est identique à celle utilisée pour la situation remarquable cas 1). Eq.(C.87) et Tableau B.7 montre que les liaisons pendantes sont presque toutes ionisées négatives: $\rho_{\text{DB}}^- \approx N_{\text{DB}}$. Si l'ionisation était totale, alors par la neutralité locale Eq.(C.88) et l'expression de $n_t(N_f)$ (Eq.89), la densité de porteur majoritaire N_f , et donc σ_{phot} , ne dépendrait pas de G_0 . Une dépendance de σ_{phot} (ou N_f) avec G_0 s'explique par une ionisation incomplète des liaisons pendantes. Une variation de ρ_{DB}^- avec G_0 est compensée par une variation de la charge des pièges n_t , et donc une variation de N_f avec G_0 , ainsi que le montre le calcul suivant:

Avec Eq.(C.87) et l'expression pour f_{DB}^- (Eq.(B.27) une ionisation incomplète s'écrit:

$$\rho_{\text{DB}}^- = f_{\text{DB}}^- N_{\text{DB}} = \frac{\frac{N_f \tau_p^-}{P_f \tau_n^0}}{\frac{N_f \tau_p^-}{P_f \tau_n^0} + 1} N_{\text{DB}} = \left(1 - \frac{P_f \tau_n^0}{N_f \tau_p^-} \right) N_{\text{DB}}$$

La neutralité s'écrit:

$$\begin{array}{lcl} N_{\text{DB}} & + & n_t(N_f) & = & \rho_{\text{doping}}^+ = \text{const} & \leftarrow \text{ionization totale} \\ \downarrow & & \downarrow & & & \\ \rho_{\text{DB}}^-(G_0) & + & n_t(N_f(G_0))_t & = & \rho_{\text{doping}}^+ = \text{const} & \leftarrow \text{ionization incomplète} \end{array}$$

Le calcul qui suit est valable pour une petite variation de l'ionisation des N_{DB} .

$$\Delta \rho_{DB} + \Delta n_t = 0$$

$$-\Delta \rho_{DB} = -\frac{d\rho_{DB}}{dG_o} \Delta G = \Delta n_t = \frac{dn_t}{dG_o} \Delta G \Rightarrow -\frac{d\rho_{DB}}{dG_o} = \frac{dn_t}{dG_o}$$

D'où (+ l'équation de continuité Eq.(C.88) pour P_f):

$$-\frac{d\rho_{DB}}{dG_o} = -\left(\frac{\partial \rho_{DB}}{\partial N_f} \frac{dN_f}{dG_o} + \frac{\partial \rho_{DB}}{\partial P_f} \frac{dP_f}{dG_o}\right) = \frac{\tau_n^o}{N_f} \left(1 - \frac{G_o}{N_f} \frac{dN_f}{dG_o}\right) N_{DB}$$

$$\frac{dn_t}{dG_o} = \frac{dn_t}{dN_f} \frac{dN_f}{dG_o} = N_{cbr} kT \frac{\alpha_n}{1 - \alpha_n} \left(\frac{N_f}{N_c}\right)^{\alpha_n} \frac{G_o}{N_f} \frac{dN_f}{dG_o} \frac{1}{G_o}$$

En posant la loi de puissance de $\sigma_{phot}(N_f)$: $\gamma = \frac{G_o}{N_f} \frac{dN_f}{dG_o}$,

$$-\frac{d\rho_{DB}}{dG_o} = \frac{\tau_n^o}{N_f} N_{DB} (1 - \gamma) = \frac{dn_t}{dG_o} = N_{cbr} kT \frac{\alpha_n}{1 - \alpha_n} \left(\frac{N_f}{N_c}\right)^{\alpha_n} \gamma \frac{1}{G_o}$$

D'où, pour une petite variation de l'ionisation des N_{DB} , on aura la loi de puissance:

:

$$\frac{N_f}{N_c} = \left(\frac{1 - \gamma}{\gamma} \frac{1 - \alpha_n}{\alpha_n}\right)^{\frac{1}{\alpha_n + 1}} \left(\frac{N_{DB}}{N_c N_{cbr} kT \tau_n^o G_o}\right)^{\frac{1}{\alpha_n + 1}}$$

Donc:

$$\sigma_{phot} \propto N_f \propto \begin{cases} (G_o)^\gamma & \gamma = \frac{1}{\alpha_n + 1} > 0 \\ = \text{constante de } N_{DB} \end{cases} \quad (C.91)$$

De l'équation de continuité pour P_f (Eq.C.88) et de Eq.(C.91):

$$\frac{N_f}{P_f} \propto \begin{cases} \beta = -\frac{\alpha_n}{\alpha_n + 1} \\ \propto N_{DB} \end{cases} \quad (C.92)$$

Tableau C.4: prédictions des lois de puissances et de dépendance avec NDB, sur la base du modèle de la recombinaison par les liaisons pendantes et des charges des pièges

$f^+ \approx 1 \gg f^0 \gg f^-$	$f^0 \approx 1 \gg f^+ \gg f^-$	$f^0 \approx 1 \gg f^- \gg f^+$	$f^- \approx 1 \gg f^0 \gg f^+$
$\left\{ \begin{array}{l} \gamma = \frac{1}{\alpha_p + 1} \approx 0.66 \\ \text{constante de NDB} \end{array} \right\}$ $\sigma_{\text{phot}} \approx \frac{1}{N_{\text{DB}}}$	$\left\{ \begin{array}{l} \gamma = 1 \\ \infty \end{array} \right\}$ $\sigma_{\text{phot}} \approx \frac{1}{N_{\text{DB}}}$	$\left\{ \begin{array}{l} \gamma = 1 \\ \infty \end{array} \right\}$ $\sigma_{\text{phot}} \approx \frac{1}{N_{\text{DB}}}$	$\left\{ \begin{array}{l} \gamma = \frac{1}{\alpha_n + 1} \approx 0.6 \\ \text{constante de NDB} \end{array} \right\}$ $\sigma_{\text{phot}} \approx \frac{1}{N_{\text{DB}}}$
$\left\{ \begin{array}{l} \lambda = 0 \\ \infty \end{array} \right\}$ $L_{\text{amb}}^2 \approx \frac{1}{N_{\text{DB}}}$	$\left\{ \begin{array}{l} \lambda > 0 \\ \text{diminue} \\ \text{légèrement} \\ \text{avec NB} \end{array} \right\}$ $L_{\text{amb}}^2 \approx \frac{1}{N_{\text{DB}}}$	$\left\{ \begin{array}{l} \lambda \approx 0 \\ \infty \end{array} \right\}$ $L_{\text{amb}}^2 \approx \frac{1}{N_{\text{DB}}}$	$\left\{ \begin{array}{l} \lambda = 0 \\ \infty \end{array} \right\}$ $L_{\text{amb}}^2 \approx \frac{1}{N_{\text{DB}}}$
$\left\{ \begin{array}{l} \beta = \frac{\alpha_p}{\alpha_p + 1} \approx 0.33 \\ \infty \end{array} \right\}$ $\frac{N_f}{P_f} \approx \frac{1}{N_{\text{DB}}}$	$\left\{ \begin{array}{l} \beta = \lambda > 0 \\ \text{augmente} \\ \text{avec NDB} \end{array} \right\}$ $\frac{N_f}{P_f} \approx \frac{1}{N_{\text{DB}}}$	$\left\{ \begin{array}{l} \beta = -\lambda = -\frac{\alpha_p}{1 + \alpha_p} \approx 0.33 \\ \infty \end{array} \right\}$ $\frac{N_f}{P_f} \approx \frac{1}{N_{\text{DB}}}$	$\left\{ \begin{array}{l} \beta = -\frac{\alpha_n}{\alpha_n + 1} \approx -0.45 \\ \infty \end{array} \right\}$ $\frac{N_f}{P_f} \approx \frac{1}{N_{\text{DB}}}$
$\left\{ \begin{array}{l} \tau_n \ll \tau_p \\ \infty \end{array} \right\}$ $\frac{n_f}{P_f} \ll \frac{\tau_n}{\tau_p}$ <p>cas 1)</p>	$\left\{ \begin{array}{l} \tau_n \ll \frac{n_f}{P_f} \ll \frac{\tau_n}{\tau_p} \\ \infty \end{array} \right\}$ $\frac{n_f}{P_f} \approx \frac{\tau_n}{\tau_p}$ <p>cas 2)</p>	$\left\{ \begin{array}{l} \tau_n \ll \frac{n_f}{P_f} \ll \frac{\tau_n}{\tau_p} \\ \infty \end{array} \right\}$ $\frac{\tau_n}{\tau_p} \ll \frac{n_f}{P_f} \ll \frac{\tau_n}{\tau_p}$ <p>cas 3)</p>	$\left\{ \begin{array}{l} \tau_n \ll \frac{n_f}{P_f} \ll \frac{\tau_n}{\tau_p} \\ \infty \end{array} \right\}$ $\frac{n_f}{P_f} \gg \frac{\tau_n}{\tau_p}$ <p>cas 5)</p>

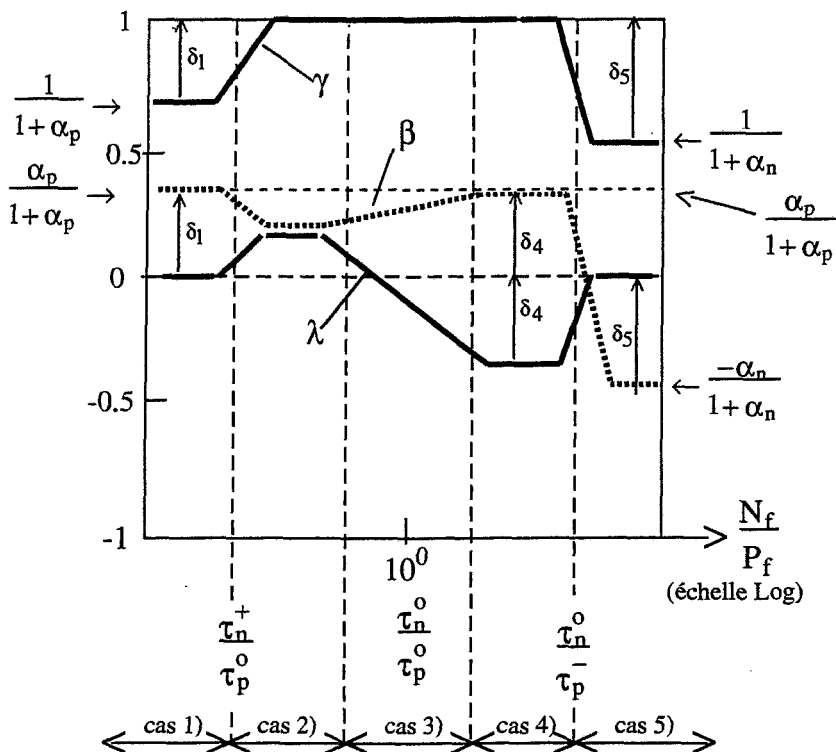


Figure C.4: représentation graphique des prédictions des exposants des lois de puissance de:

$$L_{\text{amb}}^2: \lambda, \quad \sigma_{\text{phot}}: \gamma, \quad \frac{N_f}{P_f}: \beta$$

sur la base modèle des centres de recombinaison des liaisons pendantes et des charges des pièges. Les fonction γ , β et λ sont représentée avec des lignes droites brisées; c'est une représentation "caricaturale" du comportement. Le lecteur ne doit pas y voir une simulation exacte. Cette figure doit être lue avec le tableau C.4. Les distances $\delta_{1,4,5}$ sont dessinées dans un but de comparaison avec les diverses positions des exposants des loi de puissance. On remarquera en particulier: $\lambda=\beta$ pour le cas 2) et $\lambda=-\beta$ pour le cas 4).

Remarques sur les dépendances avec la dégradation N_{DB} prédites du tableau C.4:

- Les dépendances en N_{DB} des cas 4) et cas 2) montrent que l'augmentation de la dégradation ramène le rapport N_f/P_f vers la colonne du cas 3) (voir paragraphe C.3.4). On peut parler d'un **rôle médiateur des liaisons pendantes** sur la dissymétrie du rapport N_f/P_f (dissymétrie provenant de la dissymétrie des queues de bandes et du dopage). Ce rôle médiateur est essentiellement dû à la hiérarchie des sections efficaces de capture des liaisons pendantes (Eq.(B.33)).
- Les dépendances prédites en N_{DB} des cas 1) et cas 5) sont impossibles à vérifier: on ne peut pas varier N_{DB} suffisamment faiblement pour faire ces observations. Dès que l'on varie la dégradation à partir de ces cas, cette dégradation varie si fortement que le matériau revient automatiquement dans les cas 2) et 4) (rôle médiateur des liaisons pendantes!)

C.3.4. Résumé des mesures et comparaison avec les prédictions théoriques: justification du modèle de la recombinaison par les liaisons pendantes avec trois conditions d'occupation et incompatibilité avec le modèle de la recombinaison par des états avec deux conditions d'occupation (théorie SRH)

Par des variations de microdopage n et p, Sauvain (1992) a pu faire des mesures de σ_{phot} , L_{amb} et du rapport N_f/P_f en parcourant les situations remarquables du tableau C.4 et de la figure C.4. Ces mesures sont de [Sauvain 1992] et la fabrication des couches en a-Si:H ont été faites à l'institut de microtechnique de Neuchâtel par la méthode VHF-GD. Je ne fais que donner les résultats principaux, pour les conditions et les détails des mesures voir Sauvain (1992). Notamment, on trouvera dans Sauvain l'évidence que les mesures sont faites selon les conditions requises pour mesurer le transport en diffusion ambipolaire selon le Tableau C.1 du paragraphe C.2.3.

Paramètres du grand signal pour les mesures présentées dans ce paragraphe:

- puissance lumineuse $P_l = 4 \text{ mW/cm}^2$
- longueur d'onde de $0.62 \mu\text{m} \rightarrow$ coefficient d'absorption $\alpha = 1 \mu\text{m}^{-1}$ pour le a-Si:H.
- ce qui correspond à une fonction de génération $G_0 = 10^{19} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$

Situations des niveaux de démarcation E_{TSn} et E_{TSp} :

Je vais situer les niveaux de démarcation E_{TSn} et E_{TSp} (Eq.(B.10a)) pour les mesures de σ_{phot} de matériau microdopé n et p de la figure C.7:

Valeurs numériques admises: $N_c \approx N_v \approx 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, $\mu_p^0 = 3 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$ et $\mu_n^0 = 10 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$

- microdopé n:

$$b = \frac{\mu_n^0 N_f}{\mu_p^0 P_f} = 2 \times 10^4 \rightarrow \sigma_{\text{phot}} = 10^{-4} \Omega^{-1} \text{cm}^{-1} \rightarrow \left\{ \begin{array}{l} N_f \approx 10^{14} \text{ cm}^{-3} \\ P_f \approx 10^{10} \text{ cm}^{-3} \end{array} \right\} \text{ par Eq.(C.60)}$$

$$\rightarrow \left\{ \begin{array}{l} E_c - E_{fn} = 0.3 \text{ eV} \\ E_{fp} - E_v = 0.5 \text{ eV} \end{array} \right\} \text{ par Eq.(B.3)}$$

avec $\sigma_n^{\text{Be}} N_f \gg \sigma_p^{\text{Be}} P_f$ et $\frac{\sigma_n^{\text{Bh}} N_f}{\sigma_p^{\text{Bh}} P_f} \approx 10^2$ (voir hiérarchie des sections

efficaces des pièges au paragraphe B.3.4), il vient:

$$E_{Tsn} = E_{fn} \quad \rightarrow \quad E_c - E_{Tsn} \approx 0.3 \text{ eV}$$

$$E_{Tsp} = E_{fp} - kT \ln\left(\frac{\sigma_n^{\text{Bh}} N_f}{\sigma_p^{\text{Bh}} P_f}\right) \quad \rightarrow \quad E_{Tsp} - E_v \approx 0.4 \text{ eV}$$

- microdopé p:

$$b = \frac{\mu_n^0 N_f}{\mu_p^0 P_f} = 10^{-3} \quad \rightarrow \quad \sigma_{\text{phot}} = 6 \times 10^{-6} \Omega^{-1} \text{ cm}^{-1} \quad \rightarrow \quad \left\{ \begin{array}{l} N_f = 10^{10} \text{ cm}^{-3} \\ P_f = 2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3} \end{array} \right\} \text{ par Eq.(C.61)}$$

$$\rightarrow \left\{ \begin{array}{l} E_c - E_{fn} = 0.5 \text{ eV} \\ E_{fp} - E_v = 0.34 \text{ eV} \end{array} \right\} \text{ par Eq.(B.3)}$$

avec $\sigma_n^{\text{Bh}} N_f \ll \sigma_p^{\text{Bh}} P_f$ et $\frac{\sigma_p^{\text{Be}} P_f}{\sigma_n^{\text{Be}} N_f} \approx 10^1$ (voir hiérarchie des sections

efficaces des pièges au paragraphe B.3.4)

Il vient:

$$E_{Tsn} = E_{fn} + kT \ln\left(\frac{\sigma_p^{\text{Be}} P_f}{\sigma_n^{\text{Be}} N_f}\right) \quad \rightarrow \quad E_c - E_{Tsn} \approx 0.45 \text{ eV}$$

$$E_{Tsp} = E_{fp} \quad \rightarrow \quad E_{Tsp} - E_v \approx 0.34 \text{ eV}$$

Le modèle de la recombinaison par les états des liaisons pendantes (paragraphe B.3.1) ?

Les valeurs numériques obtenues pour les niveaux de démarcation E_{Tsn} et E_{Tsp} des cas dopé n et p sont à situer sur la figure B.2 représentant la DOS du a-Si:H. On y constate que E_{Tsn} et E_{Tsp} sont situés en dehors des états des liaisons pendantes, c'est à dire que l'on peut considérer ces états comme centres de recombinaison pour lesquels les émissions thermiques sont négligeables selon le calcul du paragraphe B.3.1. Les densités volumiques des porteurs minoritaires des cas dopés n et p de la figure C.7 sont une minorisation des densité des porteurs libres pour la gamme du paramètre $b = \frac{\mu_n^0 N_f}{\mu_p^0 P_f}$ de la

figure C.7 où la distinction entre porteurs majoritaires et minoritaires n'a plus lieu. Je peux donc considéré que les niveaux de démarcation E_{TSn} et E_{TSp} sont toujours en dehors des états des liaisons pendantes pour toute la gamme du paramètre b de la mesure de la figure C.7 et donc que le modèle du chapitre B.3 s'applique.

Négliger les centres de recombinaisons des queues de bande (paragraphe B.3.1) ?

On remarque que le niveau de démarcation E_{TSp} est bien avancé dans la queue de bande de valence: est-il légitime de négliger les centres de recombinaison de la queue de bande de valence? Les mesures de σ_{phot} et L_{amb}^2 et de leurs lois de puissances sur toute la gamme de microdopé n à microdopé p s'expliquent avec le seul modèle de la recombinaison par les états des liaisons pendantes. Je peux en conclure:

- les centres de recombinaison des queues de bande sont négligeables
- si les centres de recombinaison des queues de bande ne sont pas négligeables, leurs effets ne changent pas significativement le comportement prédit en leurs absences.

Pour voir apparaître l'effet des centres de recombinaison des queues de bandes il faudrait travailler à des niveaux d'intensité de lumière très grande (par exemple $P=100 \text{ mW/cm}^2$).

Vérification des lois de puissance

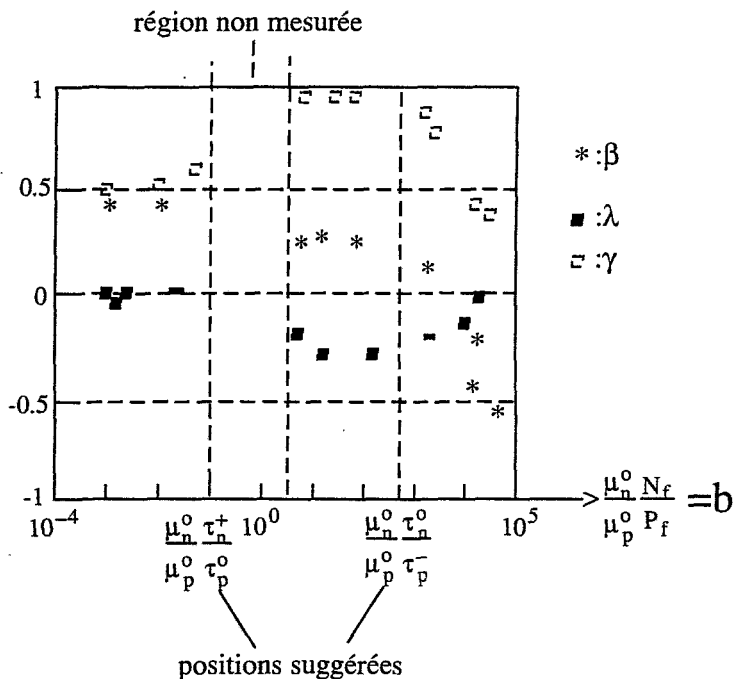


Figure C.5: mesure des lois de puissance β , λ et γ sur une gamme du paramètre $b = \frac{\mu_n^0 N_f}{\mu_p^0 P_f}$ allant de 10^{-3} à 10^5 (Sauvain (1992)). Cette gamme de

mesure a pu être obtenue en procédant à différents dopages. Cette figure est à comparer avec la figure des prédictions Fig.C.4. On remarquera la région non mesurée correspondante aux situations remarquables que je vais identifier comme celles des cas 2) et 3).

La figure des mesures C.5, comparée à la figure théorique C.4 me permet:

- Mis à part la région non mesurée $b: 10^{-1} < b < 3 \times 10^0$, les prédictions théoriques jouent bien avec les mesures.
- La bonne correspondance, concernant l'exposant γ , me permet d'identifier les deux extrémités de l'axe b (10^{-3} et 10^5) de la mesure, avec les situations remarquables des cas 1) et 5). Cette identification est également vérifiée par la bonne correspondance pour λ et β .

- L'identification des cas 1) et 5) me permet d'estimer la position des rapports caractéristiques $\frac{\mu_n^0 \tau_n^+}{\mu_p^0 \tau_p^0} \approx 10^{-1}$ et $\frac{\mu_n^0 \tau_n^0}{\mu_p^0 \tau_p^0} \approx 3 \times 10^2$. Sauvain (1992) propose pour valeur $50 \leq \frac{\tau_n^0}{\tau_p^0} \leq 100$. $\frac{\tau_n^0}{\tau_p^0} \approx \frac{\mu_p^0}{\mu_n^0} 3 \times 10^2$ est également en accord avec Wyrsh et Shah (1991), et Spear, Steemers, Le Comber et Gibson (1986).
- Dans la région pour $10^1 < b < 10^2 < \frac{\mu_n^0 \tau_n^0}{\mu_p^0 \tau_p^0}$, on a $\beta \approx -\lambda$ et $\gamma \approx 1$. C'est donc une vérification de la prédiction pour la situation remarquable cas 4).
- La chute brutale de β lors du passage des situations remarquables cas 4)-->cas 5) est bien vérifiée.
- Une région de la plage des valeurs de b: $10^{-1} < b < 3 \times 10^0$, n'a pas été mesurée. Il n'y a donc pas de mesure des situations remarquable cas 2) et cas 3), lesquelles doivent obligatoirement se situer dans cette région, puisque les régions périphériques $b < 10^{-1}$ et $b > 10^1$ sont identifiées comme les cas 1) et cas 4). Il est dommage de ne pas avoir mesuré le changement de signe de λ (passage de $\lambda > 0$ à $\lambda < 0$) prédit par la théorie et devant se produire dans la région du cas 3).
- On peut s'étonner de l'étroitesse de la région pour les situation remarquables cas 2) et 3) comparée à la largeur de la région de la situation remarquable cas 4). Il faut en conclure que $\frac{\tau_n^+}{\tau_p^0}$ et $\frac{\tau_n^0}{\tau_p^0}$ ne sont pas équidistant par rapport à $\frac{\tau_n^0}{\tau_p^0}$ (sur une échelle Log.); il faut compter avec une certaine dissymétrie entre sections efficaces de capture des électrons et des trous.
- La valeur numérique des lois de puissance prédite pour la situation remarquable cas 4) $\beta = -\lambda = \frac{\alpha_p}{1 + \alpha_p} = 0.33$ pour $\alpha_p = 0.5$ est bien vérifiée par la mesure: ceci est une confirmation de la valeur numérique de l'énergie caractéristique de la queue de bande de valence $E_v^0 = 50$ meV ($\alpha_p = \frac{kT}{E_v^0}$). Par contre les valeurs numériques prédites pour les situations remarquables cas 1) $\gamma = \frac{1}{1 + \alpha_p} = 0.66$ et cas 5) $\gamma = \frac{1}{1 + \alpha_n} = 0.55$ (pour $\alpha_p = 0.5$ et $\alpha_n = 0.8$) ne correspondent que très approximativement avec la mesure. Je rappelle que le calcul pour les cas 1) et 5) a été fait pour une petite variation de l'ionisation des liaisons pendantes: sans cette hypothèse je n'aurais pas pu obtenir des expressions pour l'exposant des

lois de puissances γ . On peut quand même dire que la prédiction est qualitativement correcte.

- La mesure dans la région identifiée comme la situation remarquable cas 4) est celle d'un matériau **non-dopé et non-dégradé**, c'est à dire que, pour le a-Si:H non-dopé et non dégradé, on a $b = \frac{\mu_n^0 N_f}{\mu_p^0 P_f} \in [10^1, 10^2]$. Ce qui signifie que les électrons libres sont majoritaires pour ce cas.

Vérification des dépendances avec la dégradation N_{DB} :

Les mesures de L_{amb}^2 , σ_{phot} et b , présentées au chapitre 5 de la thèse de Sauvain (1992), vérifient bien toutes les prédictions de dépendance avec la dégradation N_{DB} , pour les situations remarquables cas 2), cas 3) et cas 4):

- le rôle médiateur des liaisons pendantes sur la dissymétrie du rapport $\frac{N_f}{P_f}$ (à voir que l'augmentation de la dégradation ramène toujours le rapport $\frac{N_f}{P_f}$ vers la situation remarquable cas 3).

$$\left(\frac{\mu_n^0 N_f}{\mu_p^0 P_f} \right)^{\uparrow} \text{ si } (N_{DB})^{\uparrow} \text{ pour } \frac{\mu_n^0 N_f}{\mu_p^0 P_f} < \text{ou } \ll \approx 1$$

$$\left(\frac{\mu_n^0 N_f}{\mu_p^0 P_f} \right)^{\downarrow} \text{ si } (N_{DB})^{\uparrow} \text{ pour } \frac{\mu_n^0 N_f}{\mu_p^0 P_f} > \text{ou } \gg \approx 1$$

Cas du matériau non dopé et non dégradé:

Voir figure C.6

Les mesures en fonction de la dégradation pour un matériau non dopé et non dégradé correspondent bien à la prédiction théorique de la situation remarquable cas 4), à voir l'indépendance de L_{amb}^2 avec la dégradation. Les valeurs de b pour le domaine où L_{amb}^2 ne varie pas avec la dégradation correspondent aux valeurs de b de la région de la figure C.5 identifiée comme la situation remarquable cas 4): $b = \frac{\mu_n^0 N_f}{\mu_p^0 P_f} \in [10^1, 10^2]$.

Cette plage de valeur de b est en accord avec la neutralité posée pour le cas 4) si on admet un rapport des mobilités de bande comme $\frac{\mu_n^0}{\mu_p^0} = 3 \text{ à } 10$:

n_i négligeable devant p_t et ρ_{DB}^+ négligeable devant ρ_{DB}^-

je relève particulièrement le passage du cas 4) au cas 3): L_{amb}^2 est d'abord une constante de la dégradation (cas 4), et ensuite L_{amb}^2 décroît avec la dégradation (cas 3) (voir figure C.6).

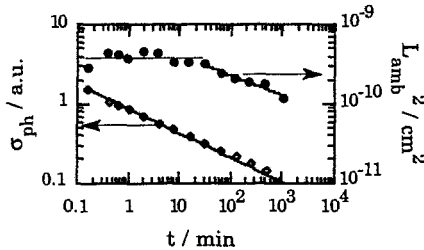


Figure C.6: mesures de L_{amb}^2 , σ_{phot} et b en fonction de la dégradation pour un matériau non-dopé (voir chapitre 5 de Sauvain (1992)). L'axe de dégradation est un axe du temps (t/min) de soumission du matériau à la dégradation. Les valeurs de b pour la région où L_{amb}^2 est constant avec la dégradation sont $b = \frac{\mu_n^0 N_f}{\mu_p^0 P_f} \in [10^1, 10^2]$. On y identifie le passage de la situation remarquable cas 4) au cas 3).

Mesure et prédiction théorique des valeurs de L_{amb}^2 et σ_{phot} (Figures C.7.a et C.7.b): valeurs numériques déduites pour les paramètres des liaisons pendantes.

Comme pour la mesure des lois de puissance (Figure C.5), L_{amb}^2 et σ_{phot} ont été mesurés pour différent cas de microdopage (n et p) permettant de parcourir l'axe b de $b=10^{-3}$ à $b=10^5$. Les échantillons ont été dans l'état recuit (non dégradé) avant chaque mesure. La simulation théorique est faite avec les expressions générales de L_{amb}^2 et σ_{phot} (Eqs.(C.57, C.58 et C.62) sous l'hypothèse $R_{total}=R_{DB}$) et en prenant les expressions des f_{DB}^+ , f_{DB}^0 et f_{DB}^- donnée au chapitre B.3. L'ajustement des courbes théoriques avec les points de mesures ont permis de déduire les 4 produits "mobilité \times temps de capture" des liaisons pendantes (Eq.(C.63)).

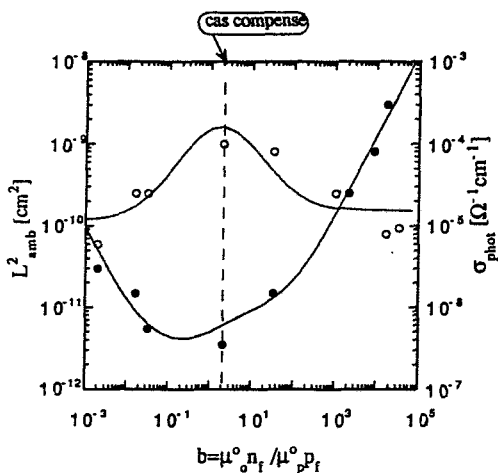


Figure C.7.a: voir la legende sous Figure C.7.b

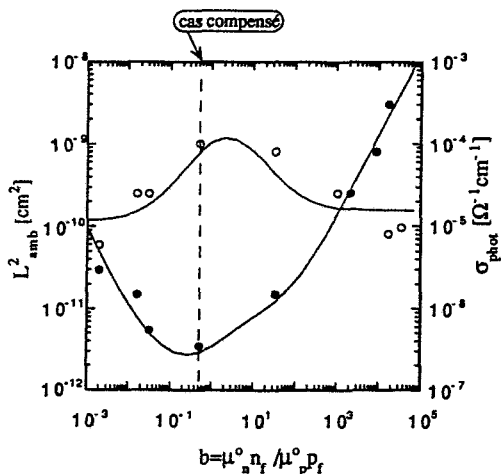


Figure C.7.b: (C.7.a et C.7.b) Les mesures de L^2_{amb} sont représentées par les cercles blancs, celles de σ_{phot} sont des cercles noirs. Ces mesures sont tirées du chapitre 5 de Sauvain (1992), on y trouvera les conditions de la mesure, en particulier pour le grand signal uniforme:

- puissance lumineuse $P_1 = 4mW/cm^2$

- longueur d'onde de $0.62 \mu\text{m}$ --> coefficient d'absorption $\alpha \approx 1 \mu\text{m}^{-1}$ pour le a-Si:H, ce qui correspond à une fonction de génération $G_0 = 10^{19} \text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}$
- état recuit pour tous les échantillons

Les courbes continues sont la simulation théorique. L'explication est dans le texte avant et après les deux figures.

La mesure du cas compensé ne permet pas de sélectionner entre deux valeurs possible pour b , c'est à dire $b=2$ (Fig. C.7.a) et $b=0.6$ (Fig. C.7.b), alors que la valeurs de b est pleinement déterminée pour tous les autres points de mesures. Donc les points de mesures de Fig.C.7.b sont tous identiques à ceux de Fig.C.7.a sauf pour le cas compensé. La simulation théorique (courbes continues) a été faite pour les deux valeurs possibles de b du cas compensé et donne selon les deux possibilités des valeurs des produits "mobilité \times temps de capture" légèrement différentes. Valeurs numériques pour la simulation:

$$G_0 = 2 \times 10^{19} \text{cm}^{-3} \text{s}^{-1} \quad \text{et} \quad \frac{kT}{e} = 0.026 \text{ V}$$

$$\text{Fig. C.7.a: } \left\{ \begin{array}{l} \mu_n^0 \tau_n^0 = 3 \times 10^{-7} \text{ cm}^2 / \text{V} \\ \mu_p^0 \tau_p^0 = 1 \times 10^{-7} \text{ cm}^2 / \text{V} \\ \mu_n^0 \tau_n^+ = 3 \times 10^{-9} \text{ cm}^2 / \text{V} \\ \mu_p^0 \tau_p^- = 4 \times 10^{-9} \text{ cm}^2 / \text{V} \end{array} \right\} \rightarrow \frac{\sigma_n^+}{\sigma_n^0} = 100 \quad \text{et} \quad \frac{\sigma_p^-}{\sigma_p^0} = 25$$

$$\text{Fig. C.7.b: } \left\{ \begin{array}{l} \mu_n^0 \tau_n^0 = 3 \times 10^{-7} \text{ cm}^2 / \text{V} \\ \mu_p^0 \tau_p^0 = 0.6 \times 10^{-7} \text{ cm}^2 / \text{V} \\ \mu_n^0 \tau_n^+ = 3 \times 10^{-9} \text{ cm}^2 / \text{V} \\ \mu_p^0 \tau_p^- = 4 \times 10^{-9} \text{ cm}^2 / \text{V} \end{array} \right\} \rightarrow \frac{\sigma_n^+}{\sigma_n^0} = 100 \quad \text{et} \quad \frac{\sigma_p^-}{\sigma_p^0} = 13$$

La simulation numérique a été faite en admettant une valeur constante de N_{DB} pour tous les échantillons de la mesure. En fait, Sauvain, Mettler, Wyrsh et Shah (1993) montrent par les mesures "Photothermal Deflection Spectroscopy (PDS)" et "Constant Photocurrent Method (CPM)" que la valeur de N_{DB} peut varier d'un rapport de 1 à 3 selon PDS et d'un rapport de 1 à 10 selon CPM, cela pour les faible taux de microdopage des échantillons utilisés pour parcourir l'axe b . Ainsi les valeurs numériques déduites de Fig.C.7.a et b sont des indications de première approximation. Pour préciser ces valeurs, il serait nécessaire d'introduire un modèle de la variation de N_{DB} avec le microdopage (voir Street (1982), Skumanich, Amer et Jackson (1985)). Les valeurs déduites des "produits "mobilité \times temps de capture" sont dépendantes de l'état de dégradation (valeur de N_{DB}); elles sont indicatives pour un état non dégradé (échantillons recuits). Par contre les

valeurs déduites des rapports des section efficaces de capture ($\sigma_n^+ / \sigma_n^0, \sigma_p^- / \sigma_p^0$) sont indépendantes de l'états de dégradation: **elles sont une vérification de la hiérarchie des sections efficaces de capture admise pour le modèle de la recombinaison par les liaisons pendantes (paragraphe B.3.2, Eq.(B.33)).**

A noter que la valeur $\sigma_p^- / \sigma_p^0 = 13$ est plutôt faible: il serait intéressant de déterminer la valeur de b du cas compensé par une mesure indépendante pour trancher entre $\sigma_p^- / \sigma_p^0 = 13$ (Fig.C.7.b) et $\sigma_p^- / \sigma_p^0 = 25$ (Fig.C.7.a). Je dois spécifier que les valeurs numériques obtenues par ces simulations sont nécessaires: il est impossible d'obtenir une si bonne correspondance avec les points de mesure avec d'autres valeurs numériques pour autant que l'on se base sur le modèle de la recombinaison par les liaisons pendantes.

σ_{phot} connait un minimum en $b \approx 10^0$, en effet:

$$\begin{array}{l} \text{cas 3) } \sigma_{\text{phot}} \propto N_f \approx P_f \approx G_0 \tau_{n,p}^0 \\ \left. \begin{array}{l} \text{cas 5) } \frac{N_f}{P_f} \gg \frac{\tau_n^0}{\tau_p^-} \\ P_f = G_0 \tau_p^- \end{array} \right\} \rightarrow \sigma_{\text{phot}} \propto N_f \gg G_0 \tau_n^0 \\ \left. \begin{array}{l} \text{cas 1) } \frac{N_f}{P_f} \ll \frac{\tau_n^+}{\tau_p^0} \\ N_f = G_0 \tau_n^+ \end{array} \right\} \rightarrow \sigma_{\text{phot}} \propto P_f \gg G_0 \tau_p^0 \end{array}$$

De même L_{amb}^2 connait un maximum pour $b \approx 10^0$. En effet:

$$\begin{array}{l} \text{cas 3) } N_f \approx P_f \rightarrow L_{\text{amb}}^2 \approx \frac{kT}{e} \frac{\mu_n^0 \mu_p^0}{\mu_n^0 + \mu_p^0} \tau_{n,p}^0 \\ \left. \begin{array}{l} \text{cas 5) } \frac{N_f}{P_f} \gg \frac{\tau_n^0}{\tau_p^-} \\ P_f = G_0 \tau_p^- \end{array} \right\} \rightarrow L_{\text{amb}}^2 = \frac{kT}{e} \mu_p^0 \tau_p^- \\ \left. \begin{array}{l} \text{cas 1) } \frac{N_f}{P_f} \ll \frac{\tau_n^+}{\tau_p^0} \\ N_f = G_0 \tau_n^+ \end{array} \right\} \rightarrow L_{\text{amb}}^2 = \frac{kT}{e} \mu_n^0 \tau_n^+ \end{array}$$

Comparaison avec le modèle de la recombinaison se basant sur des états avec deux conditions d'occupation (théorie SRH)

$$G_0 = R_{SRH} = \frac{N_f P_f}{N_f \tau_p + P_f \tau_n} = \begin{cases} \frac{P_f}{\tau_p} \leftarrow \frac{N_f}{P_f} \gg \frac{\tau_n}{\tau_p} & (\text{dopé n}) \\ \frac{N_f}{\tau_n} \leftarrow \frac{N_f}{P_f} \ll \frac{\tau_n}{\tau_p} & (\text{dopé p}) \end{cases} \quad (C.93)$$

Avec les 3 conditions d'occupation, on avait 3 rapports caractéristiques $\frac{\tau_n^+}{\tau_p^0}$, $\frac{\tau_n^0}{\tau_p^0}$ et $\frac{\tau_n^0}{\tau_p^-}$ ayant permis de diviser l'axe N_f/P_f en 5 zones distinguables grâce à la hiérarchie des sections efficaces de capture (Eq.(33) (les 5 situations remarquables du Tableau B.7).

Avec deux conditions d'occupation, on a plus que 1 rapport caractéristique $\frac{\tau_n}{\tau_p}$, et on ne peut plus diviser l'axe N_f/P_f qu'en 3 zones. On aura remarqué la relative symétrie des figures C.7.a et b. Le centre de cette symétrie est en $b = \frac{\mu_n^0 N_f}{\mu_p^0 P_f} \approx 10^{-1}$ à 10^0 . $b = 10^{-1}$ à

10^0 est également dans la région identifiée comme celle de la situation remarquable cas 3) ($\frac{N_f}{P_f} = \frac{\tau_n^0}{\tau_p^0}$) par la figure C.5. La théorie SRH donne également une symétrie de σ_{phot} en

fonction de b , centrée en $b = \frac{\mu_n^0 N_f}{\mu_p^0 P_f} = \frac{\mu_n^0 \tau_n}{\mu_p^0 \tau_p}$.

Par Eq.(C.93), la théorie SRH prédit:

$$\begin{aligned} \frac{N_f}{P_f} \gg \frac{\tau_n}{\tau_p} &\rightarrow P_f = G_0 \tau_p \rightarrow L_{\text{amb}}^2 \propto \frac{P_f}{G_0} = \text{const. de } G_0 \rightarrow \lambda = 0 \\ \frac{N_f}{P_f} \ll \frac{\tau_n}{\tau_p} &\rightarrow N_f = G_0 \tau_n \rightarrow L_{\text{amb}}^2 \propto \frac{N_f}{G_0} = \text{const. de } G_0 \rightarrow \lambda = 0 \end{aligned}$$

La figure C.5 donne $\lambda=0$ aux extrémités: $b=10^{-3}$ et $b=10^4$, mais entre ces deux extrémités, pour $b \in [10^1, 10^2]$, λ est significativement non nulle. Ceci est incompatible avec la théorie SRH:

- si $\frac{\mu_n^0 \tau_n}{\mu_p^0 \tau_p} \approx 1$, alors pour $b \in [10^1, 10^2]$ on devrait avoir $\lambda=0$

- si $\frac{\mu_n^0 \tau_n}{\mu_p^0 \tau_p} \in [10^1, 10^2]$, alors la symétrie des figures C.7 devrait être décalée en

$$b = \frac{\mu_n^0 N_f}{\mu_p^0 P_f} \in [10^1, 10^2]$$

Insuffisance du modèle SRH

Le modèle SRH pour états avec deux conditions d'occupation, rend fortement incompatible 1) avec 2):

1): la position du centre de la symétrie de la courbe mesurée de σ_{phot} en $b \approx 10^0$ (figures C.7)

2): la loi de puissance pour L_{amb}^2 dans la région de la situation remarquable

$$\text{cas 4): } \lambda = -\frac{\alpha_p}{1 + \alpha_p} \neq 0 \text{ pour } b \in [10^1, 10^2] \text{ (figure C.5)}$$

Le modèle pour états avec trois conditions d'occupation, et comprenant la hiérarchie des sections efficaces de capture (Eq.(33), supprime cette incompatibilité

C.3.5. Discussion des informations sur le matériau déduites des mesures de photoconductivité et de transport ambipolaire.

- D'une manière générale, la bonne correspondance entre théorie et mesure (principalement les lois de puissance: Figure C.4 et C.5, et les valeurs absolues de σ_{phot} et de L_{amb} : Figure C.7.a et b) montre le bien-fondé du modèle. A savoir:

La division de la DOS en une zone de centres de recombinaison par les liaisons pendantes et deux zones de pièges (pièges pour trous et pièges pour électrons), selon des définitions se basant sur l'équilibre stationnaire (paragraphe B.2.2). La neutralité locale exprimée avec des charges se basant sur cette division de la DOS, conjointement à la recombinaison par les liaisons pendantes, a permis de prédire analytiquement et correctement les mesures.

Le modèle de la recombinaison se basant seulement sur les liaisons pendantes s'est montré suffisant. En effet, l'intensité de lumière du grand signal uniforme,

lors de la mesure, a été prise telle que l'effet des centres de recombinaison des états des queues de bande est négligeable (voir Tableau C.2 sur les conditions de mesures des centres de recombinaison des états des liaisons pendantes au début du chapitre C.3, et la discussion sur la position des niveaux de démarcation au début du paragraphe C.3.4). Ce sont bien les paramètres des états des liaisons pendantes que l'on a mesurés. Les valeurs numériques proposées (plus haut) sont des ajustements pour la bonne correspondance.

A été particulièrement vérifié:

- nécessité de tenir compte des trois conditions d'occupation pour la recombinaison par les états des liaisons pendantes et l'insuffisance d'un modèle se basant seulement sur deux conditions d'occupation (théorie SRH)
- la hiérarchie des sections efficaces de capture relative aux trois conditions d'occupation des états des liaisons pendantes, permettant la séparation distincte des 5 situations remarquables du tableau B.7 (Eq.(B.33), paragraphe B.3.2). De la figure C.7.a et b, on déduit:

$$\frac{\sigma_n^+}{\sigma_n^0} = 100, \quad \frac{\sigma_p^-}{\sigma_p^0} = 25 \text{ (cas a)} \quad \text{et} \quad \frac{\sigma_p^-}{\sigma_p^0} = 13 \text{ (cas b)}$$

- Proposition de valeurs pour les 4 produits "mobilité \times temps de capture" des liaisons pendantes pour un état non dégradé (échantillons recuits):

$$\left\{ \begin{array}{l} \mu_n^0 \tau_n^0 = 3 \times 10^{-7} \text{ cm}^2 / \text{V} \\ \mu_p^0 \tau_p^0 = 1 \times 10^{-7} \text{ cm}^2 / \text{V} \\ \mu_n^0 \tau_n^+ = 3 \times 10^{-9} \text{ cm}^2 / \text{V} \\ \mu_p^0 \tau_p^- = 4 \times 10^{-9} \text{ cm}^2 / \text{V} \end{array} \right.$$

Fig. C.7.a

$$\left\{ \begin{array}{l} \mu_n^0 \tau_n^0 = 3 \times 10^{-7} \text{ cm}^2 / \text{V} \\ \mu_p^0 \tau_p^0 = 0.6 \times 10^{-7} \text{ cm}^2 / \text{V} \\ \mu_n^0 \tau_n^+ = 3 \times 10^{-9} \text{ cm}^2 / \text{V} \\ \mu_p^0 \tau_p^- = 4 \times 10^{-9} \text{ cm}^2 / \text{V} \end{array} \right.$$

Fig. C.7.b

- La bonne concordance, entre la valeur numérique prédite et celle mesurée pour la situation remarquable cas 4) (Figure C.4 et C.5) $\beta = -\lambda = 0.33$ est une confirmation de la valeur de l'énergie caractéristique de la queue de bande de valence $\alpha_p = \frac{kT}{E_v^0} \approx 0.5$ avec $E_v^0 = 50 \text{ meV}$ (voir Curtins et Favre (1988))

pour des mesures indépendantes de E_v^0 confirmant $E_v^0 = 50\text{meV}$ pour le a-Si:H déposé par la méthode VHF-GD)

- La mesure de paramètres constants des centres de recombinaison des états des liaisons pendantes, tels que les valeurs individuelles des sections efficaces de capture $\sigma_n^0, \sigma_n^+, \sigma_p^0$ et σ_p^- , et les valeurs individuelles des mobilités de bandes μ_n^0 et μ_p^0 (ou leur rapport) ne pourra se faire qu'en associant aux mesures décrites dans ce travail d'autres mesures telles que des mesures non-stationnaires, mais restant en condition petit-signal (la variation petit-signal étant la partie non-stationnaire), pour lesquelles on pourra utiliser mon modèle de la recombinaison pour la partie grand-signal de la mesure: je cite les techniques du "grating dynamique" et de la "photoconductivité transitoire" lesquelles est en cours d'étude actuellement à l'institut de microtechnique de Neuchatel dans le groupe du Prof. A.Shah (Nathalie Beck et Patrice Pipoz).

C.4 Cellule solaire p-i-n en mode de détecteur

L'analyse de ce chapitre a pour but de donner un exemple d'application du modèle de la recombinaison par les liaisons pendantes et de montrer l'incompatibilité de ce modèle avec le modèle classique de Shockley-Read-Hall (théorie SRH).

C.4.1 Principe de fonctionnement, paramètres limitant la collection, et calcul de première approximation des densités des porteurs libres.

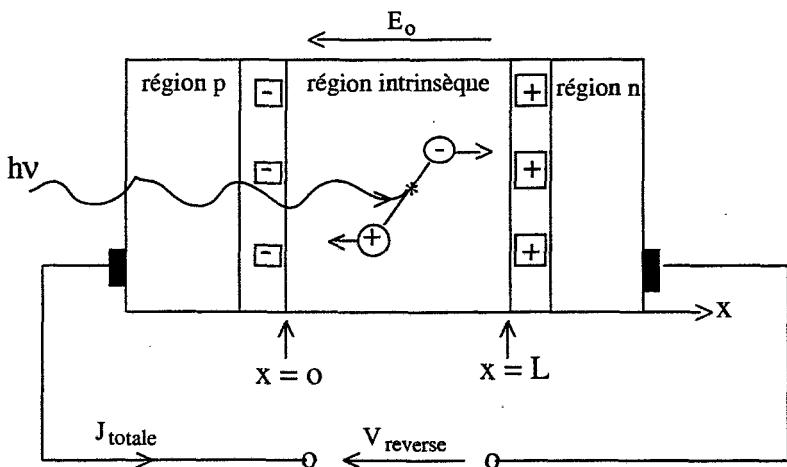


Figure C.8: Représentation schématique d'une cellule solaire p-i-n. On y distingue la région intrinsèque, les deux régions dopées p et n, et les deux zones de déplétion aux deux interfaces p-i et i-n. La région intrinsèque commence en $x=0$ et prend fin en $x=L$. Les distances ne sont pas représentées sur une échelle réelle. Voici des indications de distances usuelles:

- longueur région intrinsèque: de $0.5 \mu\text{m}$ à $10 \mu\text{m}$

longueur région dopée: $< 0.1 \mu\text{m}$

La cellule solaire p-i-n est en fait une diode à jonction p-n à laquelle on a intercalé une longue région intrinsèque i. Les charges des zones de déplétion aux interfaces p-i et n-i produisent un important champ électrique E dans la région intrinsèque. Les porteurs photogénérés dans la région intrinsèque seront mis en mouvement par le champ électrique de la région intrinsèque, traverseront les interfaces p-i et n-i, constitueront un courant par diffusion dans les zones neutres des régions dopées p et n, et finalement constitueront le courant extrait de la cellule. Les porteurs photogénérés dans les régions dopées p et n recombinaison sur place, ne pouvant être mis en mouvement car le champ électrique dans les régions dopées n et p est nulle (régions neutres). Donc, la zone active pour l'extraction d'un courant d'une cellule solaire p-i-n est la région intrinsèque i.

La valeur du courant extrait sera donnée par les porteurs photogénérés ayant eu le temps de quitter la région intrinsèque avant de recombinaison dans cette même région. La recombinaison des porteurs photogénérés se produisant aux interfaces p-i et n-i est également un facteur très important de limitation du courant extrait.

Condition d'analyse pour la cellule solaire p-i-n:

- je traite la cellule en mode de détecteur (voir définition du mode de détecteur après/et la figure C.9).
- je traite le cas d'une illumination uniforme: G_0 indépendant de x
- je traite des facteurs, limitant le courant extrait, dû à la région intrinsèque (je ne m'occupe pas de la recombinaison aux interfaces)
- je ne considère que la recombinaison par les liaisons pendantes $R=R_{DB}$

Remarques:

- Le lien entre l'effet Staebler-Wronski (diminution de la photoconductivité d'une couche uniforme lorsqu'elle est soumise un certain temps à une forte illumination, d'intensité de l'ordre de celle du soleil de midi par exemple, et l'augmentation de la densité volumique totale des liaisons pendantes N_{DB} est bien établi (voir Staebler et Wronski (1980), et Stutzmann, Jackson et Tsai (1985). De plus Wyrsh et Shah (1991 b) montre que les paramètres des états des queues de bande ne sont pas affectés par l'exposition de la couche à la lumière. Donc la dégradation d'une couche uniforme est l'augmentation de N_{DB} . Je considérerai, pour mon analyse, que l'augmentation de N_{DB} , dans la couche intrinsèque, est un facteur important de dégradation des cellules solaires p-i-n,

bien qu'il n'existe pas encore actuellement de preuve véritable que ce soit le facteur le plus important. Je me limiterai donc à l'étude de l'effet des centres de recombinaison des liaisons pendantes sur la collection.

- Pour une région intrinsèque, en a-Si:H, de longueur de $1\mu\text{m}$, une illumination uniforme correspond à une lumière de longueur d'onde supérieur à $0.62\mu\text{m}$, c'est à dire que la limite supérieur correspond à la fin du rouge et au début de l'infrarouge (une longueur d'onde de $0.62\mu\text{m}$ correspond pour le a-Si:H intrinsèque à un coefficient d'absorption de $1/\alpha=1\mu\text{m}$, voir Wyrsh (1992)).
- Le courant extrait lorsque l'on ne tient pas compte de la recombinaison aux interfaces sera appelé "courant de bulk".

Paramètres dont dépend le courant de bulk:

Le courant extrait dépend des caractéristiques de la région intrinsèque suivante:

- vitesse de déplacement des porteurs photogénérés

champ électrique E et mobilités μ_n^o et μ_p^o

- recombinaison des porteurs photogénérés

temps de recombinaison τ_n^R et τ_p^R et densité des centres de recombinaison N_{DB}

Le courant de bulk total extrait est donné par la différence entre ce qui est photogénéré et ce qui recombine dans la région intrinsèque:

$$\frac{1}{e} J_{\text{total}} = \frac{1}{e} J_n + \frac{1}{e} J_p = \int_0^L (G_o - R_{DB}) dx \quad (\text{C.94})$$

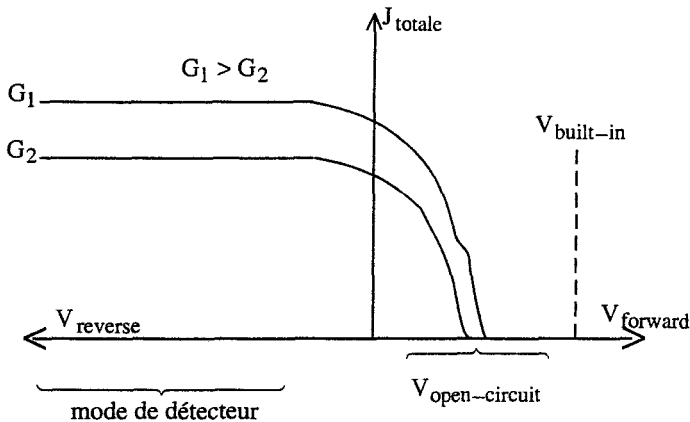


Figure C.9: courbe J-V pour une cellule solaire p-i-n

Mode de détecteur:

C'est le mode de fonctionnement, lorsque la tension externe appliquée est en "reverse": $V_{reverse}$. $V_{reverse}$ accentue fortement le champ dans la région intrinsèque dû aux zones de déplétion des régions n et p (voir figure C.8). $V_{built-in}$ est la barrière de potentiel due aux charges des zones de déplétion des régions n et p ($V_{built-in}$ est le maximum théorique que peut atteindre la tension de circuit ouvert $V_{open-circuit}$). Le maximum que peut avoir $V_{built-in}$ est la distance entre la bande de conduction et celle de valence: pour le a-Si:H $V_{built-in}^{Max} = 1.8$ Volt. La caractéristique J-V en mode de détecteur est pratiquement horizontale (figure C.9); c'est l'indication que dans ce mode l'on extrait pratiquement tous les porteurs photogénérés dans la région intrinsèque.

Hypothèse du mode de détecteur:

- Le champ électrique de la région intrinsèque est suffisamment important, lors de l'application de $V_{reverse}$, pour que le courant de cette région soit essentiellement dû à la dérivation: je négligerai les courants de diffusion, dans la région intrinsèque, pour l'analyse de ce chapitre.

Remarque:

- Pour expliquer une forte recombinaison aux interfaces p-i et n-i, ce dont je ne m'occupe pas, un courant de diffusion du porteur minoritaire à l'interface, en direction de la région dopée, est nécessaire. Négliger les courants de diffusion

revient à admettre pour conditions aux limites de la région intrinsèque des valeurs nulles des densités des porteurs minoritaires : $n_f(x=0)=0$ et $p_f(x=L)=0$. Les courbes des densités des porteurs libres des Figures 12.a et 12.b du paragraphe C.4.3 montrent que c'est effectivement aux limites de la région intrinsèque que la négligence des courants de diffusion est la moins valable.

Première approximation du calcul des densités des porteurs libres:

L'application de V_{reverse} permet, pour une première approximation, de négliger la recombinaison:

- le champ électrique est suffisamment grand pour que tous les porteurs photogénérés soient extrait de la région intrinsèque.

Les équations de continuités (Eq.(C.3)) seront:

$$\begin{aligned} 0 &= G_o + \frac{1}{e} \frac{dj_n}{dx} \Rightarrow j_n(x) = -e G_o x \\ 0 &= G_o - \frac{1}{e} \frac{dj_p}{dx} \Rightarrow j_p(x) = -e G_o (L - x) \end{aligned} \quad (\text{C.95})$$

Eq.(C.95) admet les conditions aux limites suivante:

$$j_n(x=0) = 0 \quad \text{et} \quad j_p(x=L) = 0$$

$$\text{et } J_{\text{total}} = -e G_o L$$

Des équations des courants (Eq.C.1) avec Eq.(C.95), on obtient:

Première approximation des densités des porteurs libres en mode de détecteur:

$$\begin{aligned} \frac{1}{e} j_n &= \mu_n^o n_f E \Rightarrow n_f(x) = \frac{G_o}{|E| \mu_n^o} x \\ \frac{1}{e} j_p &= \mu_p^o p_f E \Rightarrow p_f(x) = \frac{G_o}{|E| \mu_p^o} (L - x) \end{aligned} \quad (\text{C.96})$$

E est le champ total, dans la région intrinsèque, dû: à V_{reverse} , aux charges des zones de déplétion des régions p et n ($V_{\text{built-in}}$), et aux charges des états localisés dans la région intrinsèque. E est orienté négatif (voir figure C.8).

Le rapport des densités de porteurs libres vaut:

$$\frac{n_f}{p_f} = \frac{\mu_p^0}{\mu_n^0} \frac{x}{L-x} \quad (\text{C.97})$$

Ainsi, le rapport n_f/p_f ne dépend, pour cette 1^{ière} approximation, que du rapport des mobilités de bande et de la position x . Le rapport n_f/p_f ne dépend, en mode de détecteur, ni de G_0 et ni de E (donc pas de l'influence des charges des états localisés).

Remarque:

- On verra, au paragraphe C.4.3, un calcul des densités des porteurs libres, fait sans négliger la recombinaison.

C.4.2 Déformation du champ électrique, dans la région intrinsèque, due à la charge des états localisés.

Le champ électrique E , dans la région intrinsèque, assure l'extraction des porteurs photogénérés. La charge due aux liaisons pendantes et aux pièges diminue la valeur du champ à l'intérieur de la région intrinsèque, et par là favorisent la recombinaison dans cette région, donc diminuent le nombre de porteurs photogénérés extrait.

Définition: déformation du champ

$$\frac{E_{\max} - E_0}{|E_0|}$$

- E_0 est le champ s'il n'y avait pas de charges dans la région intrinsèque. Selon la figure C.8, E_0 est orienté négatif. $|E_0| \approx \frac{V_{\text{reverse}} + V_{\text{built-in}}}{L}$
- E_{\max} est la valeur maximale, que prend le champ total E dans la région intrinsèque. E_{\max} est supérieur à E_0 par l'effet de la charge des états localisés et E_{\max} se situe en un x particulier là où $\rho_{\text{total}} = 0$ ($\frac{dE}{dx} = \frac{c}{\epsilon} \rho_{\text{total}}$).

Il s'agit donc de trouver les paramètres déterminant la déformation du champ, et par là sur lesquels agir pour minimiser cette déformation.

L'équation du champ, selon la division de la densité des états localisés en zone de recombinaison et en zones de pièges, est (en négligeant n_f et p_f devant l'importance des charges des états localisés):

$$\frac{dE}{dx} = \frac{e}{\varepsilon} \left(\underbrace{p_t - n_t}_{\frac{dE_t}{dx}} + \underbrace{\rho_{DB}^+ - \rho_{DB}^-}_{\frac{dE_{DB}}{dx}} \right) \quad (\text{C.98})$$

Profil de la charge des liaisons pendantes dans la région intrinsèque:

En introduisant le rapport obtenu $\frac{n_f}{p_f}$ Eq.(C.97) dans les expressions des charges des liaisons pendantes (Eq.(B.27 et B.31)), on obtient le profil de la charge des liaisons pendantes, $\rho_{DB}^{\text{total}}(x) = \rho_{DB}^+(x) - \rho_{DB}^-(x)$.

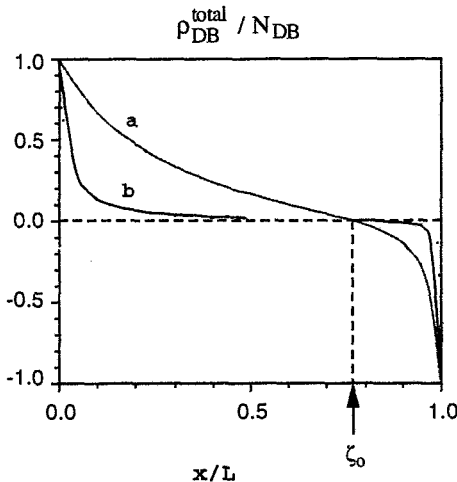


Figure C.10: profil de la charge des liaisons pendantes dans la région intrinsèque, en mode de détecteur. $\rho_{DB}^{\text{total}} = \rho_{DB}^+ - \rho_{DB}^-$

pour $\frac{\mu_n^0}{\mu_p^0} = 3$, $\sigma_n^+ = \sigma_p^- = \sigma^\pm$ et $\sigma_n^0 = \sigma_p^0 = \sigma^0$

a) $\sigma^\pm / \sigma^0 = 15$

b) $\sigma^\pm / \sigma^0 = 200$

Le point $\rho_{DB}^{total} = 0$ est en

$$\frac{x}{L} = \zeta_0 = \frac{\frac{\mu_n^0}{\mu_p^0} \sqrt{\frac{\sigma_p^- \sigma_p^0}{\sigma_n^+ \sigma_n^0}}}{1 + \frac{\mu_n^0}{\mu_p^0} \sqrt{\frac{\sigma_p^- \sigma_p^0}{\sigma_n^+ \sigma_n^0}}} \quad (C.99)$$

Remarques sur le profil de la charge des liaisons pendantes en mode de détecteur:

- 1) Ni G_0 et ni E_n influence le profil de la charge des liaisons pendantes, cela tient aux hypothèses du calcul pour Eq.(C.97), c'est à dire de négliger la diffusion et la recombinaison (un niveau suffisant de E_0 , donc de dopage des régions n,p et de $V_{reverse}$, est requis pour être dans cette condition). Donc le profil des liaisons pendantes ne dépend pas de l'influence des autres charges des états localisés
- 2) La figure C.10 montre que, plus le rapport des sections efficaces de capture chargés à neutres, $\frac{\sigma^\pm}{\sigma^0}$, est élevé, alors plus la densité de charge des liaisons pendantes est concentrée aux limites de la région intrinsèque et plus elle est nulle dans la majeure partie de cette région intrinsèque (comparez a) et b).
- 3) Le point de neutralité $\rho_{DB}^{total} = 0$ ne dépend que du rapport des mobilités de bande ($\frac{\mu_n^0}{\mu_p^0} \rightarrow \infty \Rightarrow \zeta_0 \rightarrow 1$ et $\frac{\mu_n^0}{\mu_p^0} \rightarrow 0 \Rightarrow \zeta_0 \rightarrow 0$) et de la dissymétrie des rapports des sections efficaces de capture électron-trou ($\sigma_p^0, \sigma_p^- \gg \sigma_n^0, \sigma_n^+ \Rightarrow \zeta_0 \rightarrow 1$ et $\sigma_p^0, \sigma_p^- \ll \sigma_n^0, \sigma_n^+ \Rightarrow \zeta_0 \rightarrow 0$)
- 4) La densité volumique totale des liaisons pendantes N_{DB} n'influence pas la position ζ_0 , ni le phénomène de concentration des charges aux interfaces (voir 2)). Mais, plus N_{DB} est grand, plus la densité de charge des liaisons pendantes sera importante et plus le champ électrique sera réduit dans l'intérieur de la région intrinsèque.

Déformation du champ électrique due à la charge des liaisons pendantes:

La partie du champ due aux liaisons pendantes se calcule par:

$$E_{DB}(x) = \frac{e}{\epsilon} \int_0^x \rho_{DB}^{total} dx \quad (C.100)$$

$$\text{avec } E_{DB}(x=0)=0$$

Selon Eq.(C.27), $\rho_{DB}^{total} = N_{DB}(f_{db}^+ - f_{db}^-)$ est une fonction du rapport n_f/p_f , lequel ne dépend que de x et du rapport des mobilité de bande par Eq.(C.97). On pourra donc calculer le champ $E_{DB}(x)$, sans avoir à s'occuper de l'influence d'autres charges que celles des liaisons pendantes. Les charges des pièges, E_0 et $V_{reverse}$ n'influencent pas les charges des liaisons pendantes pour autant que Eq.(C.97) est valable, c'est à dire que le mode de fonctionnement de la cellule soit celui de détecteur.

$$\rho_{DB}^{total} = \frac{\frac{p_f \sigma_p^0}{n_f \sigma_n^+} - \frac{n_f \sigma_n^0}{p_f \sigma_p^-}}{\frac{p_f \sigma_p^0}{n_f \sigma_n^+} + 1 + \frac{n_f \sigma_n^0}{p_f \sigma_p^-}} N_{DB} \quad (C.101)$$

Intruisant le rapport n_f/p_f obtenu (Eq.C97)) dans Eq.(C.101), on obtient une fraction rationnelle pour $\rho_{DB}^{total}(x)$.

Décomposition de $\rho_{DB}^{total}(x)$ en éléments simples:

$$\rho_{DB}^{total}(x) = \left(\frac{A-1}{1+A-B} + \frac{a}{x-x_1} + \frac{b}{x-x_2} \right) N_{DB} \quad (x \in [0, L])$$

d'où:

$$E_{DB}(x) = \left[\frac{A-1}{1+A-B} x + a \ln\left(\frac{x_1-x}{x_1}\right) + b \ln\left(\frac{x_2-x}{x_2}\right) \right] N_{DB} \frac{e}{\epsilon}$$

$$E_{DBmax} = E_{DB}(x = \zeta_0 L) \leftarrow \rho_{DB}^{total}(\zeta_0 L) = 0$$

$$E_{DBmin} = E_{DB}(x = 0) = 0$$

Avec:

$$A = \frac{\sigma_p^0 \sigma_p^-}{\sigma_n^0 \sigma_n^+} \left(\frac{\mu_n^0}{\mu_p^0} \right)^2 \quad \text{et} \quad B = \frac{\sigma_p^- \mu_n^0}{\sigma_n^0 \mu_p^0}$$

$$a = \frac{-L \frac{B-2A+\sqrt{B^2-4A}}{2(1+A-B)} (4A-AB-B) + A(2-B)}{1+A-B \sqrt{B^2-4A}}$$

$$b = \frac{L \frac{B-2A-\sqrt{B^2-4A}}{2(1+A-B)} (4A-AB-B) + A(2-B)}{1+A-B \sqrt{B^2-4A}}$$

$$x_1 = -L \frac{B-2A+\sqrt{B^2-4A}}{2(1+A-B)} \quad \text{et} \quad x_2 = -L \frac{B-2A-\sqrt{B^2-4A}}{2(1+A-B)}$$

Le champ E_{DB} est orienté positif (voir figure C.10) et doit s'additionner au champ E_0 , lequel est orienté négatif (voir figure C.8):

La déformation du champ due aux liaisons pendantes est:

$$\frac{E_{DB \max} - E_{DB \min}}{|E_0|} = \frac{1}{|E_0|} \left[\frac{A-1}{1+A-B} \zeta_0 L + a \ln\left(\frac{x_1 - \zeta_0 L}{x_1}\right) + b \ln\left(\frac{x_2 - \zeta_0 L}{x_2}\right) \right] N_{DB} \frac{e}{\varepsilon}$$

avec les simplifications caricaturales suivantes:

$$\sigma_n^+ \approx \sigma_p^- \approx \sigma^\pm, \quad \sigma_n^0 \approx \sigma_p^0 \approx \sigma^0 \quad \text{et} \quad \sigma^\pm \gg \sigma^0$$

$$B \gg 1, \quad B \gg A, \quad B^2 \gg A \quad \frac{\mu_n^0}{\mu_p^0} \gg 1$$

il vient:

$$a \approx L \frac{\sigma^0 \mu_p^0}{\sigma^\pm \mu_n^0} \quad \text{et} \quad b \approx L \frac{\sigma^0 \mu_n^0}{\sigma^\pm \mu_p^0}$$

$$\frac{x_1 - \zeta_0 L}{x_1} \approx \frac{\mu_p^0}{\mu_n^0} \quad \text{et} \quad \frac{x_2 - \zeta_0 L}{x_2} \approx \frac{\mu_p^0 \sigma^\pm}{\mu_n^0 \sigma^0}$$

et:

$$\frac{E_{DB \max} - E_{DB \min}}{|E_0|} \approx \frac{N_{DB}}{|E_0|} L \frac{\sigma^0 \mu_n^0}{\sigma^\pm \mu_p^0} \left[-1 + \ln\left(\frac{\sigma^\pm}{\sigma^0}\right) + \ln\left(\frac{\mu_p^0}{\mu_n^0}\right) \right] \frac{e}{\varepsilon}$$

$$\text{avec: } |E_0| = \frac{V_{\text{reverse}} + V_{\text{built-in}}}{L}$$

Tableau C.5: Déformation du champ par les charges des liaisons pendantes

$\frac{E_{DB\max} - E_{DB\min}}{ E_0 } \approx N_{DB} \frac{L^2}{V_{\text{reverse}} + V_{\text{built-in}}} \frac{\sigma^{\circ} \mu_n^{\circ} e}{\sigma_{\pm}^{\circ} \mu_p^{\circ} \epsilon}$
<ul style="list-style-type: none"> - la déformation augmente linéairement avec N_{DB} - la déformation augmente en L^2 - la déformation est d'autant plus faible que le rapport des sections efficaces de capture chargé à neutre, $\frac{\sigma_{\pm}^{\circ}}{\sigma^{\circ}}$, est grand (voir figure C.10 en comparant a) avec b)). C'est à dire que plus $\frac{\sigma_{\pm}^{\circ}}{\sigma^{\circ}}$ est grand plus les liaisons pendantes dans la majeure partie de la région intrinsèque sont dans un état neutre. - la déformation est inversement proportionnelle à $V_{\text{reverse}} + V_{\text{built-in}}$ - l'intensité de la génération G_0 n'influence pas la déformation - selon la valeur de ζ_0 ($\rightarrow 0$ ou $\rightarrow 1$) la déformation sera due plutôt aux liaisons pendantes ionisées positives ou aux liaisons pendantes ionisées négatives (voir figure C.10 et Eq.(C.99))

Exemple numérique:

$$L = 1 \mu\text{m} = 10^{-4} \text{ cm}, \quad V_{\text{reverse}} + V_{\text{built-in}} = 2 \text{ V} \quad (V_{\text{built-in}}^{\text{Max}} = 1.8 \text{ V})$$

$$\epsilon = \epsilon_r \epsilon_0 = 10 \times 9 \times 10^{-14} \text{ As/Vcm} = 10^{-12} \text{ As/Vcm}$$

$$e = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ As}$$

$$\frac{\sigma^{\circ}}{\sigma_{\pm}^{\circ}} = 10^{-2} \quad \text{et} \quad \frac{\mu_n^{\circ}}{\mu_p^{\circ}} = 3$$

$$\frac{E_{DB\max} - E_{DB\min}}{|E_0|} \approx 10^{-2} \quad \text{pour } N_{DB} = 10^{15} \text{ cm}^{-3} \quad (\text{matériau non dégradé})$$

$$\frac{E_{DB\max} - E_{DB\min}}{|E_0|} \approx 1 \quad \text{pour } N_{DB} = 10^{17} \text{ cm}^{-3} \quad (\text{matériau très dégradé})$$

Remarque:

- il y a un compromis sur la longueur de la cellule à faire: entre un L petit pour minimiser la déformation du champ (dépendance en L^2), et un L grand pour absorber un maximum de lumière et photogénérer un maximum de porteurs libres.

Déformation du champ due à la charge des pièges

Approximations:

- Les charges des pièges sont des fonctions des porteurs libres: $n_t(n_f)$ et $p_t(p_f)$. L'expression des porteurs libres donnée en Eq.(C.96) comprend le champ électrique total E, donc je ne puis résoudre par voie analytique le champ du à la charge des pièges (alors que j'ai pu le faire pour les liaisons pendantes car ces dernières ne dépendaient que du rapport n_f/p_f , rapport qui ne dépendait pas du champ E). Pour procéder correctement je devrai résoudre l'équation entière Eq.(C.98), laquelle ne peut se résoudre que numériquement. Voulant absolument obtenir une expression qualitative, je supprimerai le terme des liaisons pendantes dans Eq.(C.98): cela revient à calculer la déformation du champ pour un matériau ne possédant que des pièges et n'ayant pas de centre de recombinaison:
- Même avec l'approximation ci-dessus, l'expression des pièges est trop complexe pour un calcul analytique. J'admettrai pour ce calcul:

$$\frac{n_f}{n_t} = \theta_n = \text{constante} \quad \text{et} \quad \frac{p_f}{p_t} = \theta_p = \text{constante}$$

approximation à juger avec les expressions des charges des pièges:

$$n_t = \frac{N_{cbl} kT}{1 - \alpha_n} \left(\frac{n_f}{N_c} \right)^{\alpha_n} \quad \text{et} \quad p_t = \frac{N_{vbl} kT}{1 - \alpha_p} \left(\frac{p_f}{N_v} \right)^{\alpha_p} \quad (\text{C.102})$$

et $\alpha_n \approx 0.8$, $\alpha_p \approx 0.5$ à température ambiante (voir chapitre C.3)

Les constantes θ_n et θ_p rendront compte des caractéristiques des queues de bandes

De Eq.(C.96):

$$n_t = -\frac{G_0}{E_t \mu_n^0 \theta_n} x \quad \text{et} \quad p_t = -\frac{G_0}{E_t \mu_p^0 \theta_p} (L - x)$$

$E_t = E_0 + \text{champ dû aux charges des pièges} < 0$ ($E_0 < 0$!!)

(le signe négatif, dans les expressions de n_t et p_t , provient de ce que le champ E_t est négatif)

L'équation du champ sera:

$$\frac{dE_t}{dx} = \frac{e}{\varepsilon} (p_t - n_t) = \frac{e G_0}{\varepsilon E_t} \left(\frac{x}{\mu_n^0 \theta_n} - \frac{L-x}{\mu_p^0 \theta_p} \right)$$

avec $E_t(x=0) = E_0 < 0$

d'où:

$$E_t dE_t = \frac{e}{\varepsilon} G_0 \left(\frac{x}{\mu_n^0 \theta_n} - \frac{L-x}{\mu_p^0 \theta_p} \right) dx$$

La solution en intégrant de $x=0$ à $x=L$:

$$E_t^2 = E_0^2 + \frac{e}{\varepsilon} \frac{G_0}{\mu_p^0 \theta_p} \left(x^2 \left(1 + \frac{1}{b_t} \right) - 2Lx \right)$$

$$E_t(x) = E_0 \sqrt{1 + \frac{e}{\varepsilon} \frac{1}{E_0^2} \frac{G_0}{\mu_p^0 \theta_p} \left[\left(1 + \frac{1}{b_t} \right) x^2 - 2Lx \right]}$$

$$\text{avec } b_t = \frac{\mu_n^0 \theta_n}{\mu_p^0 \theta_p}$$

Développement pour petite déformation:

$$E_t(x) \approx E_0 + \frac{1}{2} \frac{e}{\varepsilon} \frac{1}{E_0} \frac{G_0}{\mu_p^0 \theta_p} \left(\left(1 + \frac{1}{b_t} \right) x^2 - 2Lx \right)$$

$$E_{t \max}(x_{\max}) = E_0 + \frac{1}{2} \frac{e}{\varepsilon} \frac{1}{|E_0|} \frac{G_0}{\mu_p^0 \theta_p} L^2 \frac{b_t}{b_t + 1}$$

$$x_{\max} = L \frac{b_t}{b_t + 1}$$

Tableau C.6: Déformation du champ due aux charges des pièges (à comparer avec le tableau C.5

$\frac{E_{t,max} - E_0}{ E_0 } \approx \frac{1}{2} \frac{e}{\epsilon} \frac{L^4}{(V_{reverse} + V_{built-in})^2} G_0 \frac{1}{\mu_p^0 \theta_p} \frac{b_t}{1 + b_t}$
<ul style="list-style-type: none"> - La déformation est proportionnelle en L^4 (comparer avec la dépendance en L^2 pour les liaisons pendantes) - La déformation est inversement proportionnelle à $(V_{reverse} + V_{built-in})^2$ - La déformation est proportionnelle à G_0 (G_0 n'avait d'influence pour la déformation due aux charges des liaisons pendantes) - Si $\theta_p \ll \theta_n$, alors $b_t \gg 1$: dans ce cas c'est la charge des pièges des trous qui domine la déformation. - Si $\theta_p \gg \theta_n$, alors $b_t \ll 1$: dans ce cas c'est la charge des pièges des électrons qui domine la déformation.

Exemple numérique:

$$L = 1 \mu\text{m} = 10^{-4} \text{ cm}, \quad V_{reverse} + V_{built-in} = 2 \text{ V} \quad (V_{built-in}^{Max} = 1.8 \text{ V})$$

$$\epsilon = \epsilon_r \epsilon_0 = 10 \times 9 \times 10^{-14} \text{ As/Vcm} = 10^{-12} \text{ As/Vcm}$$

$$e = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ As}$$

$\theta_p \ll \theta_n$ (la charge piégée de la queue de bande de valance est plus grande que la charge piégée de la queue de bande de conduction, voir rapport des charges des pièges en début du paragraphe C.3.3); $\theta_p = 10^{-2}$ et $\mu_p^0 = 3 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$

$G_0 = 4 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ (puissance lumineuse de 100 mW/cm^2 pour une longueur d'onde de $0.62 \mu\text{m}$)

$$\frac{E_{t,max} - E_0}{|E_0|} = 10^{-1}$$

C.4.3 Influence de la recombinaison par les états des liaisons pendantes sur la collection: produits $\mu\tau$ caractérisant la collection (cellule en mode de détecteur).

Incompatibilité avec la théorie SRH.

Les résultats de ce paragraphe ont été publiés dans Shah, Hubin et Sauvain (1992).

Définition de la collection (voir J_{total} Eq.(C.94):

$$\chi = \frac{J_{\text{total}}}{\int_0^L G_0 dx} = \frac{\int_0^L (G_0 - R_{DB}) dx}{\int_0^L G_0 dx} = 1 - \frac{\int_0^L R_{DB} dx}{G_0 L} \quad (\text{C.103})$$

Remarque:

- Le champ électrique total, E, sera admis constant pour cette analyse (mode de détecteur).

Stratégie:

- 1^{ière} étape: montrer que les liaisons pendantes sont en majorité dans la condition d'occupation neutre pour la majeure partie de la région intrinsèque, et donc que la forme particulière de R_{DB} de la situation remarquable cas 3) du tableau B.7 (chapitre B.3) s'applique à la majeure partie de la région intrinsèque (pour une cellule en mode de détecteur).
- 2^{ième} étape: recalculer la densité des porteurs libres avec R_{DB} proposé en 1^{ière} étape et ensuite calculer la collection
- 3^{ième} étape: calculer la collection avec la fonction classique de recombinaison de Shockley-Read-Hall (R_{SRH}).
- 4^{ième} étape: montrer le caractère opposé des conclusions sur la collection selon que l'on emploie R_{DB} ou R_{SRH} .

1^{ière} étape: justification de l'emploi de la forme simplifiée, pour la recombinaison:

$$R_{DB} = \frac{n_f}{\tau_n^0} + \frac{p_f}{\tau_p^0} \quad (\text{situation remarquable cas 3 du tableau B.7}) \quad (\text{C.104})$$

Cette forme simplifiée correspond à des états des liaisons pendantes en majorité dans une condition d'occupation neutre Tableau B.7).

Je prend pour la comparaison entre la forme complète de R_{DB} (Eq.(B.30)) et la forme simplifiée proposée Eq.(C.104):

$$\tau_n^+ = \tau_p^- = \tau^\pm \quad \text{et} \quad \tau_n^0 = \tau_p^0 = \tau^0$$

En introduisant les densités des porteurs libres obtenues en première approximation Eq.(C.96) dans:

1) la forme complète de R_{DB} (Eq.B.30)

$$R_{DB}(x) = \frac{(L-x)^2 + \frac{\mu_p^0}{\mu_n^0} x(L-x)}{\frac{\tau^\pm}{\tau^0} (L-x)^2 + \frac{\mu_p^0}{\mu_n^0} x(L-x) + \frac{\tau^\pm}{\tau^0} \left(\frac{\mu_p^0}{\mu_n^0} \right)^2 x^2} \frac{x}{L} \frac{L G_0}{\tau^0 \mu_n^0 |E|} \quad (C.105)$$

2) la forme simplifiée proposée Eq.(C.104)

$$R_{DB}(x) \approx \left(\frac{x}{L} + \frac{\mu_n^0}{\mu_p^0} \left(1 - \frac{x}{L} \right) \right) \frac{L G_0}{\tau^0 \mu_n^0 |E|} \quad (C.106)$$

La forme de $R_{DB}(x)$ pour Eq.(C.105) ne dépend que des rapports $\frac{\mu_n^0}{\mu_p^0}$ et $\frac{\tau^\pm}{\tau^0}$, et non pas des valeurs absolues des paramètres. De même la forme de $R_{DB}(x)$ pour Eq.(C.106) ne dépend que du rapport $\frac{\mu_n^0}{\mu_p^0}$ et non pas des valeurs absolues des paramètres.

La dépendance absolue des paramètres est formulée pour R_{DB} de Eq.(C.105) de même que pour R_{DB} de Eq.(C.106), c'est à dire:

$$\frac{L G_0}{\tau^0 \mu_n^0 |E|}$$

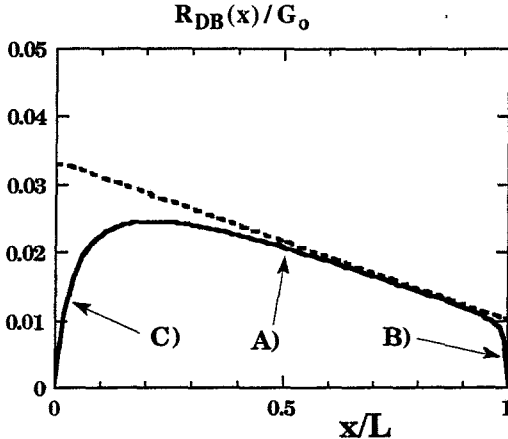


Figure C.11: Fonction de recombinaison des états des liaisons pendantes, $R_{DB}(x)$, dans la région intrinsèque:

- ligne pleine: fonction complète Eq.(C.105)
- ligne traitillée: fonction simplifiée Eq.(C.106)

Valeurs numériques prises pour le graphique:

$$\frac{\mu_n^0}{\mu_p^0} = 3, \quad \frac{\tau^0}{\tau_{\pm}^0} = 80, \quad \tau^0 = 10^{-7} \text{ s}, \quad \mu_n^0 = 10 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$$

$L=1\mu\text{m}$ et $E=10^4 \text{ V/cm}$ (les valeurs absolues τ^0 , μ_n^0 , E et L n'ont aucune importance pour la comparaison des formes de Eqs.(C.105 et C.106).

On distingue trois régions pour la forme complète de R_{DB} (Eq.(C.105)) sur la figure C.11:

- la région A): la forme complète de R_{DB} (Eq.(B.30)) se confond avec la forme simplifiée (Eq.(C.104)). Cette région correspond à la région où la majeure partie des liaisons pendantes est dans un état neutre ($f_{db}^0 \gg f_{db}^-, f_{db}^+$: cas 3) du tableau B.7))
- la région B): correspond à la région où les liaisons pendantes sont presque toutes ionisées négatives ($f_{db}^- \gg f_{db}^0 \gg f_{db}^+$: cas 5) du tableau B.7)). La fonction de recombinaison vaut $R_{DB} \approx \frac{pf}{\tau_p^-}$.

- la région C): correspond à la région où les liaisons pendantes sont presque toutes ionisées positives ($f_{db}^+ \gg f_{db}^0 \gg f_{db}^-$: cas 1) du tableau B.7)). La fonction de recombinaison vaut $R_{DB} \approx \frac{n_f}{\tau_n^+}$.

On peut dire avec la figure C.11:

- calculer la collection avec la forme simplifiée de R_{DB} (Eq.(C.104) est une majoration de la collection (la forme complète de R_{DB} s'annule aux extrémités de la région intrinsèque)
- plus le rapport des section efficaces de capture chargés à neutres est élevé ($\frac{\sigma^\pm}{\sigma^0} = \frac{\tau^0}{\tau^\pm}$ élevé), plus les régions B) et C) de la figure deviennent étroites et donc plus l'emploi de la forme simplifiée de R_{DB} (Eq.(C.104) est justifié en remplacement de la forme complète.
- Le rapport $\frac{\sigma^\pm}{\sigma^0} = \frac{\tau^0}{\tau^\pm}$ est effectivement élevé; on peut avancer une valeur de l'ordre de $\frac{\sigma^\pm}{\sigma^0} = \frac{\tau^0}{\tau^\pm} \approx$ de 50 à 100 (voir paragraphe C.3.4).

- Des considérations précédentes: la plus part des liaisons pendantes sont, sur la majeure partie de la région intrinsèque, dans une condition d'occupation neutre (voir figure C.10 et la remarque suivant après, ainsi que le tableau C.5). Donc la forme simplifiée $R_{DB} = \frac{n_f}{\tau_n^0} + \frac{p_f}{\tau_p^0}$ peut s'appliquer pour le calcul des densités de porteurs libres et de la collection de la cellule en mode de détecteur.
- Même si le rapport σ^\pm/σ^0 n'était pas si élevé, c'est quand même la partie de la région intrinsèque, où les liaisons pendantes sont dans un état neutre, qui détermine la collection.

2^{ème} étape: calcul de la densité des porteurs libres et de la collection avec la forme simplifiée de R_{DB} (Eq.(C.104)).

Introduire dans les deux équations de continuité (Eq.C.3) la fonction R_{DB} et les deux équations du transport, en négligeant les courants de diffusion et en assumant un champ E constant:

$$\begin{aligned}
 0 &= G_0 - \left(\frac{n_f}{\tau_n^0} + \frac{p_f}{\tau_p^0} \right) + \mu_n^0 E \frac{dn_f}{dx} \\
 0 &= G_0 - \left(\frac{n_f}{\tau_n^0} + \frac{p_f}{\tau_p^0} \right) - \mu_p^0 E \frac{dp_f}{dx}
 \end{aligned}
 \tag{C.107}$$

$$\text{avec } \begin{cases} n_f(x=0) = 0 \\ p_f(x=L) = 0 \end{cases}$$

En résolvant Eq.(C.107):

Densité des porteurs libres:

$$\begin{aligned}
 n_f(x) &= G_0 \tau_n^0 \frac{\frac{l_p}{l_n}}{\exp\left(\frac{L}{L_c}\right) - \frac{l_p}{l_n}} \left[\exp\left(\frac{x}{L_c}\right) - 1 \right] \\
 p_f(x) &= G_0 \tau_p^0 \frac{\exp\left(\frac{L}{L_c}\right)}{\exp\left(\frac{L}{L_c}\right) - \frac{l_p}{l_n}} \left[1 - \exp\left(-\frac{L-x}{L_c}\right) \right]
 \end{aligned}
 \tag{C.108}$$

$$\text{avec } \begin{cases} l_n = \mu_n^0 \tau_n^0 |E| \\ l_p = \mu_p^0 \tau_p^0 |E| \end{cases} \quad \begin{array}{l} \text{Longueurs de dérive} \\ \text{des électrons et trous} \end{array}
 \tag{C.109}$$

$$\text{et } L_c = \frac{l_n l_p}{l_n - l_p}$$

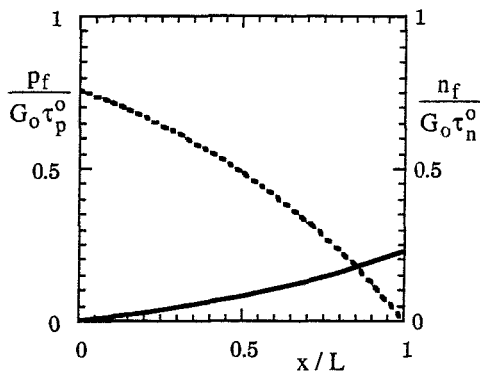


Figure C.12.a: profil des densités de porteurs libres (Eq.(C.108))

valeurs numériques: $\frac{l_p}{l_n} = 0.3$ et $\frac{l_n}{L} = 2$

si $l_n \gg l_p \rightarrow P_f(x=0) \approx \tau_p^o G_o$

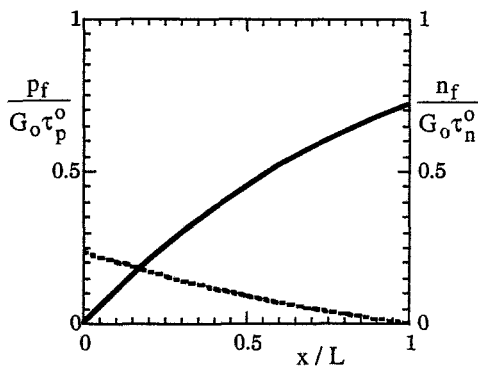


Figure C.12.b: profil des densités de porteurs libres (Eq.(C.108))

valeurs numériques: $\frac{l_p}{l_n} = 3$ et $\frac{l_n}{L} = 0.66$

si $l_p \gg l_n \rightarrow n_f(x=L) \approx \tau_n^o G_o$

Collection avec R_{DB} :

En résolvant Eq.(C.103) avec R_{DB} donné par Eq.(C.104) et avec les densités des porteurs libres Eq.(C.108), on obtient:

$$\chi\left(\frac{l_n}{L}, \frac{l_p}{L}\right) = \frac{L_c}{L} \frac{\frac{l_n}{L} - 1}{\frac{l_n}{L} - \exp\left(-\frac{L}{L_c}\right)} \left(1 - \exp\left(-\frac{L}{L_c}\right)\right) \quad (\text{C.110})$$

Remarquez que la collection n'est que fonction des rapports $\frac{l_n}{L}$ et $\frac{l_p}{L}$

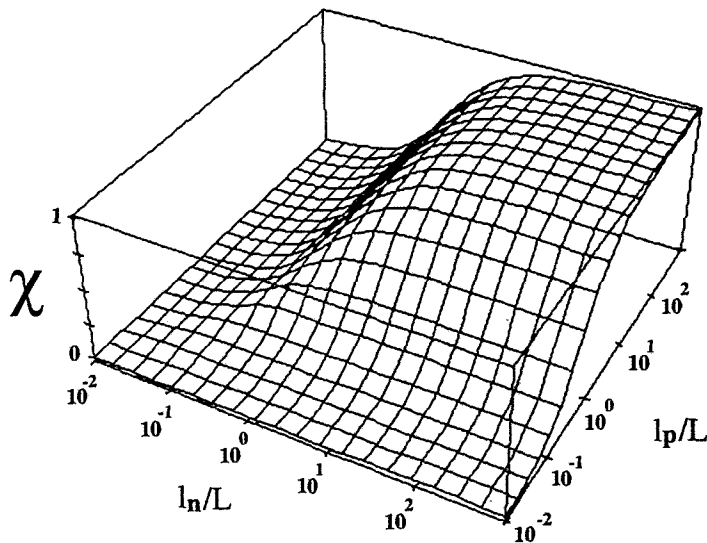


Figure C.13: collection χ (Eq.(C.110)) calculée avec la forme simplifiée de R_{DB} (Eq.(C.104))

Tableau C.7: collection avec R_{DB} (figure C.13)

- Plus les rapports $\frac{l_n}{L}$ et $\frac{l_p}{L}$ (longueurs de dérive: $l_n = \mu_n^o \tau_n^o |E|$ et $l_p = \mu_p^o \tau_p^o |E|$), sont grand plus la collection est grande ($\chi=1$ indique que la collection est maximum).
 - **C'est la longueur de dérive la plus courte qui limite la collection**
 - Les produits $\mu\tau$ caractérisant la collection sont des produits "mobilité de bande \times temps de capture", c'est à dire $\mu_n^o \tau_n^o$ et $\mu_p^o \tau_p^o$.
- Ce sont donc ces produits qui caractérisent la qualité de la cellule en mode de détecteur.

3^{ème} étape: calcul de la collection avec la recombinaison de Shockley-Read-Hall R_{SRH} (Eq.(B.32))

Collection obtenue par Crandall (1983) avec l'approximation régionale pour R_{SRH} :

$$\chi = \frac{l_n + l_p}{L} \left(1 - \exp\left(-\frac{L}{l_n + l_p}\right) \right) \quad (\text{C.111})$$

Collection, sans faire l'approximation régionale de Crandall, mais se limitant au mode de détecteur:

en introduisant les densités des porteurs libres Eq.(C.96) dans R_{SRH} , on obtient,

$$R_{SRH}(x) = \frac{G_o x (L - x)}{x (l_p - l_n) + l_n L}$$

De Eq.(C.103)), il vient:

$$\chi = 1 - L \frac{(l_n + l_p)(l_n - l_p) + 2 l_n l_p \ln\left(\frac{l_p}{l_n}\right)}{2 (l_n - l_p)^3} \quad (\text{C.112})$$

L'expression Eq.(C.112) n'a de sens que pour l_n et $l_p \gg L$, suite aux simplifications faites pour obtenir les densités des porteurs libres Eq.(C.96).

4^{ème} étape: Incompatibilité de la collection obtenue soit avec R_{DB} , et soit avec R_{SRH} .

- C'est la longueur de dérive la plus courte qui limite la collection calculée avec R_{DB}
- Autant par l'approximation régional de Crandall (Eq.(C.111)), que par le calcul Eq.(C.112), c'est la longueur de dérive la plus longue qui limite la collection calculée avec R_{SRH}

C.4.4 Discussion sur les mesures de produits $\mu\tau$ pour caractériser la collection

Comme mentionné au paragraphe C.4.1, le courant de bulk dépendra des mobilités de bandes et des temps de recombinaison des porteurs libres:

$$\mu_n^o, \mu_p^o \quad \text{et} \quad \tau_n^R, \tau_p^R$$

Les temps de recombinaisons sont très dépendant du rapport n_i/p_i : voir Eq.(C.62) et le tableau des temps de recombinaison C.3 au paragraphe C.3.2.

Les mesures de photoconductivité (σ_{phot}) et de longueur de diffusion ambipolaire (L_{amb}), discutées au chapitre C.3, mesurent des produits $\mu_n^o \tau_n^R$ et $\mu_p^o \tau_p^R$, mais seulement lorsqu'une distinction entre porteurs majoritaires et porteurs minoritaire à lieu. De plus les temps de recombinaison déduit de σ_{phot} et L_{amb} , sont mesurés pour un rapport n_i/p_i fixé (le matériau pour la mesure est uniforme). Alors que le rapport n_i/p_i , et donc τ_n^R et τ_p^R , sont, en générale, très variable selon la position dans la région intrinsèque de la cellule solaire (voir figures C.12.a, C.12.b et Eq.C.108) pour le cas particulier du mode de détecteur).

Donc d'une façon générale, des mesures de produits $\mu_n^o \tau_n^R$ et $\mu_p^o \tau_p^R$ sur des couches uniformes ne peuvent pas être directement utilisées pour caractériser une cellule solaire.

Pour caractériser complètement la collection de bulk d'une cellule solaire, en mode de fonctionnement général, il faut connaître les 4 produits "mobilité \times temps de capture" de la recombinaison par les liaisons pendantes, donnés en Eq.(C.63), paragraphe C.3.2:

$$\mu_n^0 \tau_n^0, \mu_n^0 \tau_n^+, \mu_p^0 \tau_p^0 \text{ et } \mu_p^0 \tau_p^-$$

et pour le mode de fonctionnement en détecteur, il suffit de connaître les deux produits "mobilité \times temps de capture", comme le montre le calcul du paragraphe C.4.3:

$$\mu_n^0 \tau_n^0 \text{ et } \mu_p^0 \tau_p^0$$

Au chapitre C.3, paragraphe C.3.4, je donne une méthode de déduction des valeurs numériques de ces 4 produits "mobilité \times temps de capture" par "Fit" des courbes mesurées de L_{amb} et de σ_{phot} sur des couches uniformes (Figures C.7.a et b). Cette déduction a été possible si on considère les variations de L_{amb} et de σ_{phot} sur l'ensemble des 5 situations remarquables pour la recombinaison par les liaisons pendantes.

D. Conclusions

1) Essentiellement:

J'ai construis un modèle phénoménologique, entièrement analytique (plutôt que numérique), du transport électronique dans les matériaux en a-Si:H:



Avec les buts:

- a) d'une manière générale de compréhension de la physique du matériau. Cette compréhension est illustrée par l'application aux mesures de photoconductivité et de transport ambipolaire,
- b) déduire des mesures des valeurs numériques des paramètres exprimant la qualité du matériau (utile en tant que test de qualité des couches pour la fabrication des dispositifs en a-Si:H),
- c) proposer le modèle comme outil d'analyse pour les dispositifs en a-Si:H.

Le point a) est satisfait pour autant que l'on reste dans le cadre des mesures de photoconductivité et de transport ambipolaire avec la condition de stationnarité dans le temps et dans les conditions d'illumination (intensité de l'ordre de 4 mW/cm^2 et spectre du visible). Un élargissement à d'autres mesures est actuellement en cours d'étude (mesures transitoires à l'institut de microtechnique de Neuchâtel, groupe du prof. A. Shah). Le point b) est partiellement satisfait par ce que l'on peut déduire des mesures mentionnées sous le point a) (voir la réserve mentionnée plus en dessous dans le texte), notez que les mesures transitoires apporteraient des informations supplémentaires très utiles. Le point c) a été illustré par l'analyse de la cellule solaire en mode de détecteur (il reste à élargir cette analyse, pour la cellule solaire, au mode de fonctionnement actif, ainsi que à d'autres dispositifs tel que le transistor à effet de champ).

2) Construction du modèle:

La division de la DOS des états localisés du a-Si:H en zones (chapitre B.2):

- zone des pièges de la queue de bande de conduction (égalité du taux de capture des électrons libres avec le taux d'émission thermique des électrons libres, captures et émissions thermiques des trous libres négligeables)
- zone des centres de recombinaison (égalité du taux de capture d'électrons libres avec le taux de capture de trous libres, les émissions thermiques sont négligeables)
- zone des pièges de la queue de bande de valence (égalité du taux de capture des trous libres avec le taux d'émission thermique des trous libres, captures et émissions thermiques des électrons libres négligeables)

permet d'obtenir pour chaque zone des expressions simplifiées (chapitre B.3) et adaptées à un traitement analytique (plutôt que numérique) pour l'interprétation des mesures faites pour caractériser le a-Si:H. Les expressions obtenues se prêtent également bien à l'analyse des dispositifs en a-Si:H. Les zones sont séparées par les niveaux de démarcation. J'ai établi l'équivalence d'une image physique directe pour la distinction entre centres de recombinaison et entre pièges avec la distinction donnée par les "quasi-niveaux pour pièges" de Simmons et Taylor (1971). Les "quasi-niveaux pour pièges" sont donc les niveaux de démarcation (chapitre B.2):

- Un modèle de la charge électrique constituée dans les pièges des queues de bande (les pièges ont une contribution nulle à la recombinaison, ces derniers n'ont d'influence sur le transport électronique que par la charge électrique constituée) (chapitre B.3).
- Deux modèles de la recombinaison: l'un pour la recombinaison par les états des queues de bande, l'autre pour la recombinaison par les états des liaisons pendantes (chapitre B.3).

Les centres de recombinaison sont les facteurs limitant les performances photoconductrices des dispositifs en a-Si:H, d'où l'importance de leurs études. La dégradation du matériau (effet Steabler et Wronski (1980)) est liée à l'augmentation des centres de recombinaison des liaisons pendantes (Stutzmann, Jackson et Tsai (1985)), alors que les paramètres des queues de bandes (et donc les paramètres de la recombinaison par les queues de bande) ne sont pas affectés par la dégradation (Wyrsh et Shah (1991 b)). Ceci justifie l'élaboration d'un modèle de la recombinaison par les états des liaisons pendantes:

- Je considère, ici, que la qualité du matériau est donnée par les paramètres des liaisons pendantes.

Le modèle de la recombinaison par les états des liaisons pendantes, que j'ai construits dans ce travail, est simple suite à ce que l'on peut négliger les émissions thermiques pour ces états. Il est à remarquer:

- Ce modèle de la recombinaison par les liaisons pendantes est construit en tenant compte des trois conditions d'occupation de ces états (non occupé, une fois occupé et deux fois occupé).
- La hiérarchie des sections efficaces de capture, relative aux états des liaisons pendantes, (Eq.(B.33), chapitre B.3) implique la séparation distincte en 5 situations remarquables pour la recombinaison par les états des liaisons pendantes (Tableau B.7, paragraphe B.3.2). C'est cette hiérarchie des sections efficaces de capture (et donc que les 5 situations remarquables soient distinguables entre elles) qui rend la théorie de la recombinaison par les liaisons pendantes différente, voir incompatible, avec la théorie classique de Shockley-Read-Hall faite pour des états n'ayant que deux conditions d'occupation (théorie SRH) (comparez les Tableaux B.6 et B.7). Sans cette hiérarchie des sections efficaces de capture alors il n'y aurait pas de différence significative entre la théorie de la recombinaison pour états avec 3 conditions d'occupation et la théorie classique SRH.

3) Application aux mesures de caractérisation et vérification du modèle:

Ce modèle de la recombinaison, conjointement au modèle pour les pièges des queues de bande, a été appliqué aux mesures de transport en diffusion ambipolaire et de photoconductivité en condition stationnaire (ces mesures ont fait l'objet de la thèse de Sauvain (1992)) (chapitre C.3). Je donne des conditions de mesures à respecter pour que ce que l'on mesure soit déterminé par les paramètres des centres de recombinaison par les liaisons pendantes (c'est à dire que la recombinaison par les états des queues de bande n'intervienne pas), et l'intérêt de cela est de pouvoir déduire des mesures les paramètres de la recombinaison par les liaisons pendantes (puisque cette recombinaison est la limitation principale des performances photoconductrices du matériau). On notera:

- Une distinction entre produits "mobilité \times temps de recombinaison" et produits "mobilité \times temps de capture" est capitale (paragraphe C.3.2). Les produits "mobilité \times temps de recombinaison" sont ce que l'on mesure directement par le transport en diffusion ambipolaire et par la photoconductivité: les valeurs numériques de ces produits sont trop dépendantes de conditions spécifiquement expérimentales (condition d'illumination, condition de morphologie du dispositif) pour pouvoir exprimer la qualité du matériau employé pour la construction des dispositifs. Par contre, les produits "mobilité \times temps de capture" sont des constantes indépendantes des conditions expérimentales: ainsi ces produits expriment la qualité du matériau (bien entendu que pour obtenir ces

valeurs numériques il est nécessaire d'observer les conditions de mesures des paramètres de la recombinaison par les liaisons pendantes, et aussi bien entendu que lorsque je parle de qualité du matériau je parle des paramètres de la recombinaison par les liaisons pendantes).

- Les conditions de mesure de Sauvain (1992) sont celles requises pour mesurer les paramètres de la recombinaison par les liaisons pendantes. En effet, le modèle de la recombinaison des liaisons pendantes, conjointement au modèle des pièges des queues de bandes est suffisant pour expliquer les mesures précitées, à voir que la recombinaison par les états des queues de bande est nullement nécessaire (pour voir apparaître l'effet de la recombinaison par les queues de bande, il faudrait travailler avec une intensité de lumière par exemple $P=100 \text{ mW/cm}^2$, c'est à dire nettement supérieur à celle employée par Sauvain (4 mW/cm^2)).
- La concordance entre mesure et théorie est vérifiée particulièrement pour les lois de puissance, et les valeurs absolues, de la photoconductivité et de la longueur de diffusion ambipolaire, cela pour des échantillons couvrant la plage des 5 situations remarquables de la recombinaison par les liaisons pendantes (réalisé par des microdopages des échantillons) (paragraphe C.3.4).

A particulièrement été vérifié:

- L'insuffisance d'un modèle se basant seulement sur deux conditions d'occupation (théorie SRH). Nécessité de tenir compte des trois conditions d'occupation des états des liaisons pendantes avec la hiérarchie des sections efficaces de capture relative à ces états (Eq.(B.33)). Cette hiérarchie est capitale pour concilier la position de symétrie de la courbe mesurée de l'amplitude de la photoconductivité avec les mesures de lois de puissance de la longueur de diffusion ambipolaire (paragraphe C.3.4).

4) Déduction de valeurs numériques des paramètres des liaisons pendantes:

Je fournis une méthode, par ajustement numérique des courbes mesurées avec les courbes théoriques pour la photoconductivité et le transport en diffusion ambipolaire, de déduction des valeurs numériques des quatre produits "mobilité \times temps de capture" des liaisons pendantes, lesquelles expriment la qualité du matériau (Figure C.7.a et b, paragraphe C.3.4). Cet ajustement est fait pour des échantillons couvrant la plage des 5 situations remarquables de la recombinaison par les liaisons pendantes, (réalisé par des microdopages des échantillons). Cette méthode de déduction est à améliorer dans le sens

où une certaine variation de la densité des liaisons pendantes à lieu lors du microdopage des échantillons. Les valeurs proposées ci-dessous sont indicatives pour un état non-dégradé (échantillons recuits).

$$\left\{ \begin{array}{l} \mu_n^o \tau_n^o = 3 \times 10^{-7} \text{ cm}^2 / \text{V} \\ \mu_p^o \tau_p^o = 1 \times 10^{-7} \text{ cm}^2 / \text{V} \\ \mu_n^o \tau_n^+ = 3 \times 10^{-9} \text{ cm}^2 / \text{V} \\ \mu_p^o \tau_p^- = 4 \times 10^{-9} \text{ cm}^2 / \text{V} \end{array} \right.$$

Fig. C.7.a

$$\left\{ \begin{array}{l} \mu_n^o \tau_n^o = 3 \times 10^{-7} \text{ cm}^2 / \text{V} \\ \mu_p^o \tau_p^o = 0.6 \times 10^{-7} \text{ cm}^2 / \text{V} \\ \mu_n^o \tau_n^+ = 3 \times 10^{-9} \text{ cm}^2 / \text{V} \\ \mu_p^o \tau_p^- = 4 \times 10^{-9} \text{ cm}^2 / \text{V} \end{array} \right.$$

Fig. C.7.b

De ces valeurs numériques, on déduit les rapports des sections efficaces de capture:

$$\frac{\sigma_n^+}{\sigma_n^o} = 100, \quad \frac{\sigma_p^-}{\sigma_p^o} = 25 \text{ (cas a)} \quad \text{et} \quad \frac{\sigma_p^-}{\sigma_p^o} = 13 \text{ (cas b)}$$

Ces valeurs numériques constituent une vérification de la hiérarchie des sections efficaces de capture des liaisons pendantes. Notez que ces rapports sont sujets à beaucoup de controverse dans la littérature. Street (1982), Street, Zesch et Thompson (1983) reportent $\sigma^\pm / \sigma^o \approx 3 \text{ à } 5$, Henry et Lang (1977) admettent que ce rapport peut être jusqu'à $\sigma^\pm / \sigma^o \approx 10^3$, Spear, Steemers, Le Comber et Gibson (1984) donnent $\sigma_n^+ / \sigma_n^o \geq 30$ (mais $\sigma_p^- / \sigma_p^o < 1$!?!), Wyrsh et Shah (1991) obtiennent $\sigma_n^+ / \sigma_n^o \approx 100$, Vaillant et Jousse (1986) prennent $\sigma^\pm / \sigma^o \approx 5 \text{ à } 50$.

5) Application à la cellule solaire:

L'étude de la cellule solaire p-i-n en mode de détecteur montre l'incompatibilité des conclusions sur la collection selon que l'on emploie le modèle classique de Shockley-Read-Hall (théorie SRH) ou que l'on emploie le modèle des liaisons pendantes avec les trois conditions d'occupation et la hiérarchie des sections efficaces de capture de ces états. Entendez ici que le but est d'avoir trouver une situation caractéristique et didactique: le choix du mode de détecteur, donc avec l'hypothèse d'un champ électrique constant, est nécessaire pour découpler les paramètres en jeu et ainsi mettre clairement en relief la différence entre le modèle des liaisons pendantes et le modèle de Shockley-Read-Hall (voir la discussion sur l'intérêt de cette démarche ci-dessous dans le point suivant 6)):

- avec deux conditions d'occupation (théorie SRH): c'est le porteur dont la longueur de dérive est la plus longue qui détermine la collection.
- avec trois conditions d'occupation (les liaisons pendantes): c'est le porteur dont la longueur de dérive est la plus courte qui détermine la collection.

Le procédé de déduction des valeurs numériques des paramètres de la recombinaison par les liaisons pendantes (les 4 produits "mobilité \times temps de capture") donne la mesure de la

qualité du matériau, et, plus, permettent de faire des simulations numériques réalistes de la cellule solaire pour des conditions plus large que celui du mode de détecteur telle que celui du mode actif de la cellule.

6) Remarque sur le choix d'une démarche analytique (plutôt que numérique) :

Ma démarche a été de trouver des résolutions purement analytiques et ceci dans les intérêts expliqués 6.1) et 6.2).

6.1) La réalité est complexe. Une situation donnée et quelconque est souvent le résultat de l'interrelation d'un grand nombre de paramètres en jeux. Donc vu cette complexité, la situation quelconque apparait comme inintelligible à la pensée analogique propre au cerveau humain. La démarche analytique ne peut pas résoudre des situations quelconques (si le système étudié est complexe), mais elle peut mettre en évidence des situations caractéristiques (comme les 5 situations remarquables de la recombinaison par les liaisons pendantes) pour lesquelles une information didactique (et utile) sera déduite. Pour le voyageur étranger arrivant dans une vallée riche en variétés (variétés topologiques, cours d'eau, bosquets, plaines, monticules, etc...) repérer des points stratégiques (tels que un croisement de route, un village, etc...) est essentiel. Les points stratégiques seront repérés en ce placant dans des situations privilégiées (au sommet des montagnes environnant la vallée par exemple): ceci est typique de la démarche analytique.

6.2) J'ai trouvé une situation caractéristique, concernant la collection de la cellule solaire, pour laquelle l'incompatibilité du modèle classique de Shockley-Read-Hall avec le modèle de la recombinaison par les liaisons pendantes est clairement montrée. On peut certainement trouver d'autres situations pour lesquelles cette incompatibilité n'est pas visible. Je cite les travaux de Hack et Shur (1985), lesquels montrent, par utilisation d'un programme de résolution numérique (donc couvrant une large plage de situations possibles), que, avec le modèle classique de Shockley-Read-Hall, on obtient la même conclusion que celle que j'obtiens avec le modèle pour les liaisons pendantes: c'est la longueur de dérive la plus courte qui détermine la collection d'une cellule solaire. Mais, dans leurs simulations numériques, Hack et Shur ont pris une situation pour laquelle le champ électrique est fortement déformé (contrairement à la situation du champ constant que j'ai pris), et, conséquemment aux valeurs numériques prises, cette déformation du champ est due aux porteurs dont la longueur de dérive est la plus courte, d'où la conclusion obtenue.

Ce résultat obtenu par Hack et Shur illustre bien l'ambiguïté des conclusions que l'on peut obtenir par les méthodes de résolution numérique: en jouant sur les valeurs numériques des divers paramètres en jeux (et en jouant ainsi sur la multitude des situations possibles) on peut arriver à montrer à peu près n'importe quel résultat indépendamment du modèle utilisé (avec une non visibilité de la cause du résultat!). J'exprime ici que l'analyse numérique est, certes, très utile pour préciser, obtenir des raffinements, de situations spécifiquement connues, mais, l'analyse numérique ne permet pas (ou rarement) de dégager une compréhension didactique d'un problème nouveau (étant donné le nombre élevé de paramètres en jeux pour des problèmes complexes).

Jacques Hubin, le 5 février 1994

Références

- Anderson, P.W., 1958, *Phys. Rev.*, **109**, 1492
- Anderson, P.W., 1975, *Phys. Rev. Lett.*, **34**, 953
- Cohen, J.D., Lang, D.V., Harbison, J.P., 1980, *Phys. Rev. Lett.*, **45**, 197
- Cohen, M.H., Fritzsche, H., Ovshinski, S.R., 1969, *Phys. Rev. Lett.*, **22**, 1065
- Crandall, R.S., 1983, *J. Appl. Phys.*, **54** (12), 7176
- Crandall, R.S., 1984, *Photoconductivity in Semiconductors and Semimetals*, Vol. 21 Part B (Chapter 8), Edited by J. I. Pankove, Academic Press Inc. London
- Curtins, H., Favre, M., 1988, in *Amorphous Silicon and Related Materials-Vol. A* (Advances in Disordered Semiconductors-Vol. 1), edited by Hellmut Fritzsche, World Scientific Publishing Company, 329
- Dersch, H., Stuke, J., Beichler, J., 1981, *Phys. Stat. Sol.(b)*, **105**, 265
- Favre, M., Shah, A., Hubin, J., Bustarret, E., Hachicha, M.A., Basrour, S., 1991, *J. Non-Cryst. Solids* 137&138, 335
- Hall, R.N., 1952, *Phys. Rev.*, **87**, 387
- Hack, M., Shur, M., 1985, *J. Appl. Phys.*, **58** (2), 997
- Henry, C.H., Lang, D.V., 1977, *Phys. Rev. B*, **15**, 989
- Hubin, J., Shah, A., Sauvain, E., 1992, *Phil. Mag. Lett.*, **66** (3), 115
- Kocka, J., Nebel, C.E., Abel, C.D., 1991, *Phil. Mag. B*, **63** (1), 221
- Main, C., Berkin, J., Merazga, A., 1991, *New Physical Problems in Electronic Matériaux*, edited by N. Kirov (Singapore: World Scientific), p. 55
- Mott, N.F., 1967, *Adv. Phys.*, **16**, 49
- Mott, N.F., 1970, *Philosophical Magazine*, **22**, 7
- Mott, N., F., Davis, E., A., 1979, *Electronic Processes in Non-Crystalline Materials*, Edited by Oxford University Press.
- Morgado, E., 1991, *Phil. Mag. B*, **63** (2), 529

- Okamoto, H., Kida, H., Hamakawa, Y., 1984, *Phil. Mag. B*, **49**, 231
- Overhof, H., Thomas, P., 1989, *Electronic transport in Hydrogenated Amorphous Semiconductors*, in *Springer Tracts in Moderne Physics*, Vol. 114, Edited by Springer-Verlag Berlin.
- Rivkin, S.M., 1964, *Photoelectric Effects in Semiconductors*, Library of Congress Catalog Card, Number 64-25832, 1964 Consultants Bureau Enterprises, Inc., New-York 10011.
- Rose, A., 1963, *Concepts in Photoconductivity and allied Problems*, Interscience, John Wiley & Sons
- Sauvain, E., 1992, *Thèse de Doctorat à la Faculté des Sciences de l'Université de Neuchatel* (2000 Neuchatel, Suisse)
- Sauvain, E, Shah, A., Hubin, J., Pipoz, P., 1991, *J. Non- Cryst. Solids*, **137&138**, 475
- Sauvain, E, Hubin, J., Shah, A., Pipoz, P., 1991, *Phil. Mag. Lett.*, **63** (6), 327
- Sauvain, E, Mettler, A, Wyrsh, N, Shah, A, 1993, *Solid State Comm.*, **85** (3), 219
- Shah, A., Hubin, J., Sauvain, E., 1992, *Proceeding of 6th International Photovoltaic Science and Engineering Conference (PVSEC-6)*, New Delhi (India), 685
- Shockley, W., Read, W.T., 1952, *Phys. Rev.*, **87**, 35
- Simmons, J.G., Taylor, G.W., 1971, *Phys. Rev. B*, **4** (2), 502
- Skumanich, A., Amer, N., Jackson, W., 1985, *Phys. Rev. B*, **34** (4), 2263
- Spear, W.E., Steemers, H.L., Le Comber, P.G., Gibson, R.A., 1984, *Phil. Mag.*, **50** (3), L33
- Staebler, D.L., Wronski, C.R., 1980, *J. Appl. Phys.*, **51**, 3262
- Street, R.A., 1980, *Phys. Rev. B*, **21**, 5775
- Street, R.A., 1981, *Adv. Phys.*, **30**, 593
- Street, R.A., 1982, *Phys. Rev. Lett.*, **49** (16), 1187
- Street, R.A., Mott, N.F., 1975, *Phys. Rev. Lett.*, **35**, 1293
- Street, R.A., Biegelsen, D.K., 1980, *J. Non-Crys. Solids*, **35-36**, 651
- Street, R.A., Zesch, J., Thompson, M.J., 1983, *Appl. Phys. Lett.*, **43**, 672

- Street, R.A., 1984, in *Semiconductors and Semimetals*, edited by J.I. Pankove (academic Press, New York), Vol. 21B, 9
- Stutzmann, M., Stuke, J., Dersch, H., 1983, *Phys. Stat. Sol. (b)*, **115**, 141
- Stutzmann, M., Jackson, W.B., Tsai, C.C., 1985, *Phys. Rev. B*, **32**, 23
- Vardeny, Z, Tauc, J., 1985, *Phys. Rev. Lett.*, **54**, 1844
- Vaillant, F., Jousse, D., 1986, *Phys. Rev. B*, **34** (6), 4088
- Vaillant, F., Jousse, D., Bruyere, J.C., 1988, *Phil. Mag. B*, **57** (5), 649
- Wagner, S., Chu, V., Shen, D.S., Conde, J.P., Aljishi, S., Smith, Z.E., 1988, *Materials Research Society 1988 Meeting, Reno, Nevada* (to be published in *MRS Symp. Proc. Vol. 118*)
- Wilson, B.A., Sergeant, A.M., Harbison, J.P., 1984, *Phys. Rev. B*, **30**, 2282
- Wyrsh, N., Shah, A., (a) 1991, *J. Non-Cryst. Solids*, 137&138, 431
- Wyrsh, N., Shah, A., (b) 1991, *Solid State Comm.*, **80**, 10, 807
- Wyrsh, N., 1992, *Thèse de Doctorat à la Faculté des Sciences de l'Université de Neuchatel* (2000 Neuchatel, Suisse).

Liste des symboles

α_n, α_p :	paramètres des queues de bande de conduction et de valence
β :	exposant de la loi de puissance du rapport des porteurs libres N_f/P_f
λ :	exposant de la loi de puissance de la longueur de diffusion ambipolaire L_{amb}^2
γ	exposant de la loi de puissance de la photoconductivité σ_{phot}
Λ	longueur d'onde de l'excitation
μ_n^o, μ_p^o	mobilités de bande de conduction et de valence
μ_{amb}^*	mobilité de la perturbation ambipolaire
μ_N^*, μ_P^*	mobilités grand signal des porteurs totaux
$\mu_{NN}^*, \mu_{NP}^*, \mu_{PP}^*, \mu_{PN}^*$	mobilités petit signal des porteurs totaux
D_n^o, D_p^o	constantes de diffusion microscopique des porteurs libres
D_{amb}^*	constante de diffusion de la perturbation ambipolaire
$D_{NN}^*, D_{PN}^*, D_{PP}^*, D_{NP}^*$	constantes de diffusion des porteurs totaux
τ_n, τ_p	temps de capture de la théorie de Shockley-Read-Hall
τ_n^o, τ_p^o	temps de capture des liaisons pendantes ionisées neutres
τ_n^+, τ_p^-	temps de capture des liaisons pendantes ionisées positives et négatives
τ_n^{Be}, τ_p^{Be}	temps de capture des centres de recombinaison de la queue de bande de conduction
τ_n^{Bh}, τ_p^{Bh}	temps de capture des centres de recombinaison de la queue de bande de valence
τ_n^R, τ_p^R	temps de recombinaison des porteurs libres
τ_{amb}^*	temps de recombinaison de la perturbation ambipolaire
τ_n^*, τ_p^*	temps de vie des porteurs totaux
σ_n^o, σ_p^o	sections efficaces de capture des porteurs libres par les liaisons pendantes ionisées neutres
σ_n^+, σ_p^-	sections efficaces de capture des porteurs libres par les liaisons pendantes ionisées positives et négatives
$\sigma_n^{Be}, \sigma_p^{Be}$	sections efficaces de capture des porteurs libres par les états de la queue de bande de conduction
$\sigma_n^{Bh}, \sigma_p^{Bh}$	sections efficaces de capture des porteurs libres par les états de la queue de bande de valence
σ_{phot}	photoconductivité
ρ_{total}	densité de charge électrique totale

ρ_{DB}^-, ρ_{DB}^+	densités de charge des centres de recombinaison des liaisons pendantes ionisées négatives et positive
ρ_{DB}^{total}	densités total de charge des centres de recombinaison des liaisons pendantes
$\rho_{Rcvt}^-, \rho_{Rvbt}^+$	densités de charges des centres de recombinaison des queues de bande de conduction et de valence
c_n, c_p	probabilités de capture de porteurs libres pour états localisés avec deux conditions d'occupation
c_n^{Be}, c_p^{Be}	probabilités de capture de porteurs libres pour les états de la queue de bande de conduction
c_n^{Bh}, c_p^{Bh}	probabilités de capture de porteurs libres pour les états de la queue de bande de valence
D^+, D^0, D^-	liaisons pendantes ionisées positives, neutres et négatives
DET	déterminant d'une matrice
e	électrons libres ("free electron") ou charge électrique élémentaire
e_n, e_p	probabilités d'émission thermique de porteurs libres pour états localisés avec deux conditions d'occupation
e_n^{Be}, e_p^{Be}	probabilités d'émission thermique de porteurs libres pour les états de la queue de bande de conduction
e_n^{Bh}, e_p^{Bh}	probabilités d'émission thermique de porteurs libres pour les états de la queue de bande de valence
E:	niveau d'énergie dans la DOS ou champ électrique.
E_c, E_v :	seuils de mobilités des bandes de conduction et de valence.
E_{cb0}, E_{vbt} :	niveaux d'énergie de, respectivement, le bas de la queue de bande de conduction et le haut de la queue de bande de valence.
E_c^0, E_v^0 :	énergies caractéristiques de, respectivement, la queue de bande de conduction et la queue de bande de valence
E_D :	niveau d'énergie d'un état des liaisons pendantes
E_{fn}, E_{fp} :	quasi-niveaux de Fermi des électrons libres et des trous libres
E_{TSn}, E_{TSp} :	quasi-niveaux des pièges de Simmons & Taylor: niveaux de démarcation proposés pour mon travail
E_{Rn}, E_{Rp} :	niveaux de démarcation de Rose (et de Rivkin)
ΔE :	champ électrique de relaxation (dû aux charges locales)
E_{ext} :	champ électrique d'origine de tension externe
E_o :	champ électrique de la région intrinsèque d'une p-i-n, dû aux zones de déplétion des région n et p, et dû à l'application d'une tension externe $V_{reverse}$
E_{DB}	champ électrique dû aux charges des liaisons pendantes

E_t	champ électrique dû aux charges des pièges
f	fonction d'occupation des états localisés
f_{Be}^-, f_{Be}^-	fonctions de simple occupation et de double occupation des états de la queue de bande de conduction
f_{Bh}^+, f_{Bh}^{++}	fonctions de simple occupation et de double occupation des états de la queue de bande de valence
$f_{db}^+, f_{db}^0, f_{db}^-$	fonctions d'occupation des états des liaisons pendantes pour les ionizations positive, neutre et négative
$G(x)$	fonction de photogénération des paires de porteurs libres
G_o	fonction de photogénération grand signal uniforme
$\Delta G(x)$	fonction de photogénération petit signal non uniforme
h	trous libres ("free hole")
J_{total}	densité de courant total
j_n, j_p	densité de courant des électrons libres et des trous libres
$\Delta j_n^{ext}, \Delta j_p^{ext}$	densités de courant petit signal dû au champ externe E_{ext}
$\Delta j_n^{int}, \Delta j_p^{int}$	densités de courant petit signal dû au champ de relaxation ΔE
kT	énergie thermique (= 26 meV à température ambiante)
L	longueur de la région intrinsèque d'une cellule solaire p-i-n
L_{amb}	longueur de diffusion ambipolaire
L_{amb}^{der}	longueur de dérive ambipolaire
L_{diel}	longueur de relaxation diélectrique pour le transport en diffusion
L_{diel}^{der}	longueur de relaxation diélectrique pour le transport en dérive
n_f, p_f	densités volumiques des porteurs libres
N_f, P_f	densités volumiques des porteurs libres grand signal uniforme
$\Delta n_f, \Delta p_f$	densités volumiques des porteurs libres petit signal non uniforme
n_t, p_t	densités volumiques des charges des pièges dans les queues de bande de conduction et de valence
n^*, p^*	densités volumiques des porteurs totaux
N^*, P^*	densités volumiques des porteurs totaux grand signal uniforme
$\Delta n^*, \Delta p^*$	densités volumiques des porteurs totaux petit signal non uniforme
$N(E), N_s(E)$	densité d'état localisés en fonction du niveau d'énergie E
$N_D(E)$	densité des états des liaisons pendantes
$N_{CBT}(E), N_{VBT}(E)$	densités des états des queues de bande de conduction et de valence
N_{cbt}, N_{vbt}	maximum des densités des états des queues de bande de conduction et de valence
N_{DB}	densité volumique totale des liaisons pendantes
N_{Rcbt}	densité volumique totale des centres de recombinaison de la queue de bande de conduction
N_{Rvbt}	densité volumique totale des centres de recombinaison de la queue de bande de valence

N_c, N_v	densités volumiques effectives des états des bandes de conduction et de valence
r_{cn}	taux de capture d'électrons libres pour états localisés avec deux conditions d'occupation
r_{cp}	taux de capture de trous libres pour états localisés avec deux conditions d'occupation
r_{en}	taux d'émission thermique d'électrons libres pour états localisés avec deux conditions d'occupation
r_{ep}	taux d'émission thermique de trous libres pour états localisés avec deux conditions d'occupation
r_{cn}^0, r_{cn}^-	taux de capture d'électrons libres par un état de la queue de bande de conduction en condition d'occupation neutre et une fois occupé.
r_{en}^-, r_{en}^{--}	taux d'émission thermique d'électrons libres par un état de la queue de bande de conduction en condition d'occupation une fois occupé et doublement occupé.
r_{cp}^-, r_{cp}^{--}	taux de capture de trous libres par un état de la queue de bande de conduction en condition d'occupation une fois occupé et doublement occupé.
r_{ep}^0, r_{ep}^-	taux d'émission thermique de trous libres par un état de la queue de bande de conduction en condition d'occupation neutre et une fois occupé.
r_a^+, r_a^0	taux de capture d'électrons libres par un état des liaisons pendantes en condition d'ionisation positive et neutre
r_c^0, r_c^-	taux de capture de trous libres par un état des liaisons pendantes en condition d'ionisation neutre et négative.
R	fonction de recombinaison
R_{DB}	fonction de recombinaison par les états des liaisons pendantes
R_{SRH}	fonction de recombinaison de la théorie Shockley-Read-Hall
R_{cvt}	fonction de recombinaison par les états de la queue de bande de conduction
R_{vbt}	fonction de recombinaison par les états de la queue de bande de valence
T_d	temps de relaxation diélectrique
T_{dn}	temps de relaxation diélectrique des électrons
T_{dp}	temps de relaxation diélectrique des trous
U	énergie de corrélation des liaisons pendantes
v_{th}	vitesse thermique
V_{ext}	tension externe appliquée
Z_n, Z_p	fonction de transfert des porteurs totaux négatifs et positifs