



Université de Neuchâtel
Institut de Microtechnique

1255
1298

La photoconductivité transitoire dans le silicium amorphe hydrogéné

Thèse présentée à la Faculté des Sciences
pour obtenir le grade de docteur ès sciences
par

Patrice Pipoz

IMPRIMATUR POUR LA THÈSE

La photoconductivité transitoire dans le silicium amorphe
hydrogéné

de M. Patrice Pipoz

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, P. Thomas (Marburg) et
R. Schwarz (Munich)

autorise l'impression de la présente thèse.

Neuchâtel, le 28 novembre 1995

Le doyen:



R. Dändliker



Université de Neuchâtel

Institut de Microtechnique

La photoconductivité transitoire dans le silicium amorphe hydrogéné

Thèse présentée à la Faculté des Sciences
pour obtenir le grade de docteur ès sciences

par

Patrice Pipoz

Table des matières

1	Introduction	1
1.1	Le silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H)	1
1.2	Le a-Si:H illuminé	5
1.3	Le dopage	6
1.4	La dégradation	8
1.5	La densité d'états localisés	8
1.6	La photoconductivité transitoire	10
2	Modèle de calcul	13
2.1	Mécanismes de transport.....	13
2.1.1	Les bandes	14
2.1.2	Les queues de bande.....	14
2.1.3	Les liaisons pendantes	16
2.2	Equations d'évolution.....	17
2.3	Equilibre thermodynamique.....	18
2.4	Etat stationnaire hors équilibre thermodynamique	19
3	Calcul de la réponse transitoire	23
3.1	Linéarisation du système.....	23
3.2	Effet des queues de bande: calcul de $f_n(z)$ et $f_p(z)$	25
3.2.1	Queue de bande de conduction	26
3.2.2	Queue de bande de valence.....	29
3.3	Cas du a-Si:H non-dopé.....	30
3.3.1	Simplification de la matrice $A(z)$	30
3.3.2	Etude de la fonction $\delta n(z)$	34
3.3.3	Transformation de Laplace inverse.....	35
3.3.4	Calcul des résidus	37
3.3.5	Intégration de la coupure.....	38
3.4	Cas du a-Si:H dopé de type $\langle n \rangle$	40
3.4.1	Simplification de la matrice $A_n(z)$	40
3.4.2	Transformation de Laplace inverse.....	42

4	Evaluation numérique des densités de porteurs.....	47
4.1	Cas non dopé recuit.....	47
4.1.1	Estimation des différents paramètres.....	47
4.1.2	Variation de la densité d'électrons libres.....	49
4.1.3	Variation de la densité de trous libres.....	54
4.1.4	Variation de la photoconductivité.....	56
4.2	Cas dopé type $\langle n \rangle$	57
4.2.1	Variation de la densité d'électrons libres.....	58
5	Mesure de la photoconductivité transitoire	63
5.1	Principe.....	63
5.2	Dispositif expérimental.....	64
5.3	Schéma de mesure.....	66
5.4	Mesures complémentaires	67
5.4.1	Mesure de la photoconductivité stationnaire.....	67
5.4.2	Mesure de la longueur de diffusion ambipolaire par SSPG	67
5.4.3	Mesure de conductivité dans l'obscurité.....	68
6	Résultats des mesures de la photoconductivité transitoire.....	69
6.1	Cas non dopé.....	69
6.1.1	Détermination de la mobilité de bande des électrons	76
6.1.2	Mobilité de bandes des électrons en fonction de la température de déposition	77
6.2	Cas dopé $\langle n \rangle$	78
6.2.1	Détermination de la mobilité de bande des trous.....	82
7	Conclusions	85
	Références	89
	Remerciements	93
	Annexes.....	95
A.	Transformation de Laplace inverse pour le cas dopé $\langle n \rangle$	95
B.	Calcul des éléments optiques.....	100
C.	Mesures et ajustements sur des échantillons non dopés	105

Introduction

1.1 Le silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H)

Un des résultats les plus importants de la mécanique quantique a été la description des solides cristallins et leur classification en métaux, isolants et semiconducteurs. Le formalisme de Bloch appliqué aux solides cristallins a permis de décrire les électrons par des fonctions d'ondes qui sont étendues dans l'espace. Le théorème de Bloch est une conséquence directe de la périodicité du réseau atomique. Les états électroniques des solides cristallins sont groupés en bandes d'énergies permises. Deux bandes d'énergies permises sont séparées par une **bande interdite**, domaine d'énergies pour lesquelles il n'existe pas d'état, que l'on désigne communément par le terme anglais "**gap**". Cette bande interdite est aussi une conséquence de la périodicité du réseau (voir par exemple [1]).

Dans un semiconducteur à température nulle, la dernière bande dont les états sont occupés par des électrons provenant des couches externes des atomes est appelée **bande de valence**. Les états de cette bande sont **tous** occupés par un électron. La bande permise immédiatement supérieure n'a quant à elle pas d'état occupé par un électron. Elle est totalement vide et s'appelle **bande de conduction**. Il n'y a pas de transport de charge possible. Mais si la largeur de la bande interdite n'est pas trop élevée, ce qui d'ailleurs différencie un semiconducteur d'un isolant, la bande de conduction peut se peupler, lorsque la température augmente, par des électrons excités thermiquement depuis la bande de valence laissant vides des états dans celle-ci. Un transport de charge par ces électrons excités thermiquement a lieu et une conduction par **trous** (défauts d'électrons) peut aussi apparaître dans la bande de valence d'où les électrons ont été extraits. La conduction par trous est en fait due au déplacement d'électrons liés à travers les liaisons atomiques. La probabilité d'occupation d'un état par un

électron est donnée par la statistique de Fermi-Dirac (voir par exemple les références [1] et [2]).

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{\beta(E - E_F)}}$$

$$\beta = 1/k_B T$$

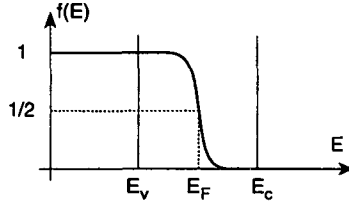


Figure 1.1: allure de la probabilité d'occupation électronique donnée par la fonction de Fermi-Dirac pour une température non nulle. Le point d'inflexion définit l'énergie de Fermi E_F . Si $T=0$, l'occupation vaut un jusqu'au niveau de Fermi et zéro pour les états au-dessus. Dans les semiconducteurs, la position de l'énergie de Fermi, ou "niveau" de Fermi, se trouve toujours à l'intérieur de la bande interdite.

Le matériau objet de cette étude, le **silicium amorphe hydrogéné** (a-Si:H), est un semiconducteur amorphe. Il a été obtenu par la technologie de déposition en couches minces. Le gaz source, le silane (SiH_4), est décomposé dans une enceinte fermée par la méthode de la décharge lumineuse à haute fréquence (VHF-GD)^[3] et le silicium se dépose progressivement sur un substrat tel que le verre. D'autres techniques de fabrication sont possibles, par exemple par évaporation ou par pulvérisation.

Un solide amorphe est caractérisé par une absence d'ordre apparent. Comme la périodicité de la structure atomique est un trait essentiel de la théorie de Bloch, cette absence d'ordre nécessiterait une approche différente. Toutefois, on a constaté expérimentalement qu'il n'y a pas de disparition totale du gap mais seulement une perturbation de celui-ci (voir par exemple les références [4], [5] et [6]).

D'un point de vue structural, le désordre n'est pas total. Il subsiste un ordre à **courte portée** dans l'arrangement des atomes déterminé par leurs propriétés chimiques. Les liaisons atomiques sont approximativement les mêmes: même nombre de proches voisins, même longueur moyenne des liaisons et même angle moyen entre les liaisons. Cet ordre disparaît après quelques distances interatomiques. En effet, en empilant **aléatoirement** des agrégats de quelques atomes pourtant bien ordonnés, on va nécessairement tordre ou casser des liaisons. Ce désordre structural va influencer les propriétés électroniques de différentes manières:

- (1) le désordre représenté par des déviations dans la longueur de la liaison et dans l'angle entre les liaisons (torsion) va faire apparaître dans la bande interdite des états permis situés aux bords des bandes de conduction et de valence. Les seuils de ces bandes, abrupts dans le cas cristallin, seront remplacés par des **queues de bande** d'une certaine largeur à l'intérieur du "pseudo-gap";
- (2) le désordre dû à des liaisons cassées provoque des états électroniques qui se trouvent approximativement au milieu de la "pseudo-bande" interdite. On appelle ces liaisons des **liaisons pendantes** ou **dangling bonds** en anglais. Ces états électroniques peuvent avoir trois possibilités de charge: neutres (D^0), chargés négativement (D^-) ou positivement (D^+).

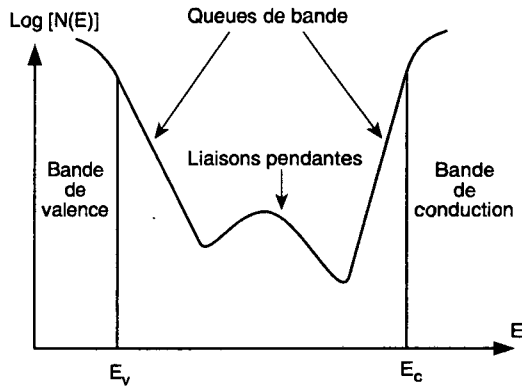


Figure 1.2: densité des états $N(E)$ du α -Si:H en fonction de leur énergie.

D'un point de vue du transport électronique, la théorie de Bloch stipule que la fonction d'onde associée aux électrons qui participent au transport est une combinaison particulière d'ondes planes délocalisées. Dans une approche faisant intervenir des variations aléatoires du potentiel atomique dans un réseau périodique, Anderson^[7] a démontré que le désordre peut engendrer une localisation des électrons pour lesquels la fonction d'onde est confinée dans un petit volume du matériau au lieu d'être étendue dans tout l'espace du matériau. Ces électrons ne participent pas au transport et leurs états énergétiques se situent aux bords des bandes. Cette distinction entre états délocalisés (étendus) et états localisés est un des concepts fondamentaux de l'étude des

semiconducteurs amorphes. C'est ce qui a amené Mott^[8] à introduire le concept de **seuil de mobilité** à une énergie E_c pour la bande de conduction et E_v pour la bande de valence séparant les états étendus des états localisés, des états qui participent au transport des états qui n'y participent pas. C'est l'idée du **modèle standard** appliqué aux semiconducteurs amorphes^[4,8]. Ce modèle donne une bonne description des semiconducteurs amorphes et permet d'interpréter la plupart des mesures de transport activées thermiquement^[4] bien que certains problèmes nécessitent une approche théorique microscopique différente (par exemple la double anomalie de signe de l'effet Hall^[4]). La conduction par états étendus est donc le processus dominant à température ambiante.

Bien qu'à température nulle les états localisés ne participent pas au transport, des transitions par effet tunnel (saut ou "hopping" en anglais) apparaissent entre états localisés des queues de bande voisins dans l'espace et contribuent à la conduction pour des températures plus élevées. Ce processus peut être plus important que la conduction par états étendus lorsque la température est inférieure à la température ambiante. A des températures encore plus basses, une conduction apparaît, par sauts entre états proches énergétiquement situés au milieu du gap, lorsque la densité de ces états est relativement élevée. Cette conduction est toutefois très faible.

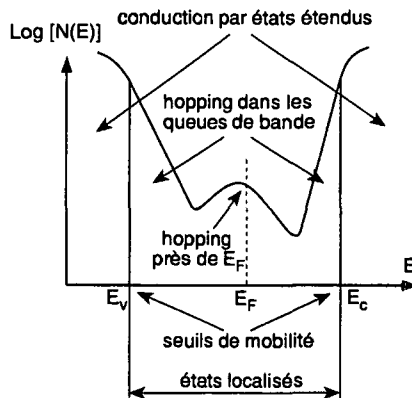


Figure 1.3: illustration des trois principaux mécanismes de conduction dans le α -Si:H: conduction par états étendus, conduction par sauts (hopping) entre états localisés dans les queues de bande et entre états proche du niveau de Fermi E_F .

1.2 Le a-Si:H illuminé

Dans les semiconducteurs soumis à une illumination, on observe un accroissement de la conductivité. On parle alors de **photoconductivité**. Cette propriété est une conséquence de la faible énergie du gap qui permet aux photons lumineux d'extraire des électrons de la bande de valence et de les mettre dans la bande de conduction. Il en résulte une conduction par ces électrons et par les trous qu'ils ont engendrés dans la bande de valence. Cette particularité de produire en excès une grande quantité de porteurs mobiles est primordiale et ouvre la porte à des applications intéressantes telles que les cellules photovoltaïques et les senseurs optiques.

Si l'énergie des photons lumineux est supérieure à l'énergie du gap, une absorption du rayonnement fait apparaître un nombre égal d'électrons et de trous. On appelle ce processus la **photogénération** de paires électron-trou. Ces porteurs photoexcités peuvent se déplacer dans le matériau sous l'effet d'un champ électrique. Ils peuvent aussi être capturés par des atomes et une paire de charge disparaît. On parle alors de **recombinaison**. La durée de vie des porteurs avant qu'ils ne recombinent (disparaissent) est une fonction sensible à la densité d'états localisés dans le gap (niveaux de pièges, de recombinaison). L'étude de la recombinaison dans le a-Si:H fournit autant une information sur la nature des états dans le gap que sur les mécanismes de recombinaison. Elle est d'un intérêt primordial pour l'optimisation des dispositifs photoélectriques.

Avant d'être capturé, un porteur excité perd de l'énergie à cause des multiples chocs inélastiques qu'il subit. Ce processus est appelé **thermalisation**. Il entraîne de multiples transitions entre états de la bande et entre états de la queue de bande proches du seuil de mobilité. Trois différents mécanismes de thermalisation ont lieu dans le a-Si:H:

- (1) le porteur dans les états étendus perd de l'énergie par émission d'un unique phonon lorsqu'il diffuse d'un état à un autre;
- (2) des transitions entre états localisés apparaissent par effet tunnel direct (saut);
- (3) des transitions entre états localisés apparaissent par un mécanisme de **piégeage multiple** ^[9,10] qui consiste en une excitation (émission thermique) d'un porteur d'un état localisé vers un état étendu, sa capture par un autre état de la queue de bande et ainsi de suite.

Ce dernier mécanisme est dominant au-dessus de 200 K pour les trous et 50 K pour les électrons [11]. Ainsi à température ambiante, c'est le mécanisme de piégeage multiple qui gouverne la thermalisation.

Les deux mécanismes principaux de la recombinaison dans le a-Si:H sont les transitions radiatives entre états des queues de bande et les transitions non radiatives de la bande (des états étendus) vers des états dus aux défauts profonds (liaisons pendantes). Ces dernières peuvent avoir lieu soit par capture directe d'un porteur mobile sur un défaut (centre de recombinaison), soit par effet tunnel d'un état localisé de la queue de bande vers un défaut. Notons que la recombinaison directe (recombinaison bimoléculaire) d'un électron libre et d'un trou libre est très peu probable car elle nécessite l'apport de plusieurs phonons. A des températures supérieures à 100 K et pour des illuminations pas trop élevées (taux de génération compris environ entre $10^{17}/\text{cm}^3\text{s}$ et $10^{21}/\text{cm}^3\text{s}$), le mécanisme de recombinaison dominant est la capture directe d'un porteur libre sur une liaison pendante [6,12].

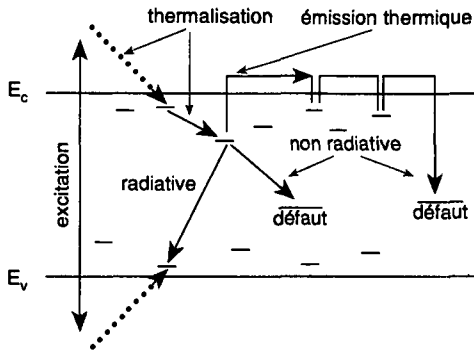
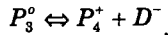


Figure 1.4: illustration des différents mécanismes de thermalisation et de recombinaison. D'après Street [6].

1.3 Le dopage

On a cru longtemps qu'il n'était pas possible de doper les semiconducteurs amorphes. Deux raisons étaient avancées: le trop grand nombre de défauts dans le gap empêche le déplacement du niveau de Fermi; un atome étranger introduit dans une matrice amorphe flexible doit garder sa valence chimique et n'est pas

contraint à se coordonner comme les atomes de la matrice. La découverte par Spear et LeComber [13] que le a-Si:H pouvait être dopé a été d'une grande importance. Elle a ouvert la voie des applications technologiques au a-Si:H. Street [14] a proposé une explication du mécanisme de dopage basée sur les réactions entre atomes dopants (phosphore, bore) et les liaisons pendantes au cours desquelles les atomes dopants changent d'états de coordination et deviennent actifs. Par exemple, pour un dopage de type <n> au phosphore:



Le dopage du a-Si:H s'effectue le plus couramment en mélangeant au gaz de silane (SiH_4) un gaz de dopage, phosphine (PH_3) pour le type <n> et diborane (B_2H_6) pour le type <p> par exemple.

On a pu mesurer, due au dopage, une variation de la conductivité à température ambiante de plus de huit ordres de grandeurs. On a observé que la densité de liaisons pendantes augmente approximativement avec la racine carrée de la concentration de dopants [14,15]. L'énergie caractéristique des queues de bande est aussi affectée par le dopage. En effet, les états électroniques des dopants ionisés se situent dans les queues de bande. Le changement est assez faible; il est d'environ 10% pour une concentration de dopant de 10^{-4} . Pour de très grands taux de dopage ($> 10^{-2}$), une diminution de l'énergie de gap d'environ 0.1 eV apparaît. Par contre, pour des taux de dopage faibles (micro-dopage), de l'ordre du ppm, les queues de bande et l'énergie de gap ne sont pas affectées de manière significative. Tout au plus, il y aura une augmentation de la densité des liaisons pendantes. Les échantillons dopés étudiés dans ce travail appartiennent précisément à cette gamme de micro-dopage (voir aussi les références [16] et [17]).

Le dopage influence par contre fortement l'occupation des liaisons pendantes modifiant la manière dont la neutralité de charge est maintenue dans le matériau. Pour un échantillon dopé de type <n>, les liaisons pendantes sont quasiment toutes chargées négativement. Dans le cas dopé <p>, les liaisons pendantes sont positivement chargées.

L'effet du micro-dopage sur le a-Si:H illuminé a été mesuré par E. Sauvain [16]. Ces mesures font apparaître une même variation de la photoconductivité avec la densité de dopants que la conductivité dans l'obscurité. Bien que la densité de porteurs libres photogénérés soit $10^3 - 10^5$ fois plus élevée qu'à l'équilibre thermodynamique, elle est encore gouvernée par les effets du dopage.

1.4 La dégradation

Une particularité très importante mais indésirable du a-Si:H est l'effet Staebler-Wronski [18] ou "light-induced degradation process". Sous une exposition prolongée à la lumière, une lente dégradation des caractéristiques du a-Si:H apparaît: la conductivité et la photoconductivité décroissent. Cet effet a été étudié par différentes techniques mais il y a toujours un grand débat autour de ce phénomène et de son interprétation [19]. Cependant, la plupart des interprétations concluent à une création de liaisons pendantes (neutres) supplémentaires dans le gap. Une partie des liaisons saturées par l'hydrogène (Si-H) sont brisées ou de nouvelles liaisons pendantes sont créées (Si-Si). Cet effet conduit asymptotiquement à une densité de défauts d'environ $10^{17} - 10^{18}/\text{cm}^3$. Cet effet est réversible. En effet, par recuit à $150 - 200^\circ\text{C}$, on peut passiver voire "renouer" les liaisons pendantes nouvellement créées. La création de défauts peut aussi dériver d'une injection de porteurs de charge sans qu'il y ait d'illumination. Une explication possible [15] de la création de défauts supplémentaires met en exergue le rôle de la recombinaison non radiative bande à bande d'une paire électron-trou. Cette recombinaison apporte 1.5 eV d'énergie qui permet de briser une liaison faible et génère un défaut supplémentaire.

1.5 La densité d'états localisés

Si on désire étudier le transport électronique, il est nécessaire de connaître la densité des états électroniques dans le gap (états localisés) du a-Si:H. Elle a été considérablement mesurée mais elle reste encore mal connue. De multiples techniques sensibles à des zones différentes de la densité d'états ont été utilisées. Sans être exhaustif, citons en quelques unes des plus couramment utilisées:

- (a) mesures de photoémission [20];
- (b) mesures de spectroscopie à déflexion optique (PDS) [21,22];
- (c) technique du photocourant constant (CPM)[23,24];
- (d) mesures électriques transitoires telles que le temps de vol (TOF) [25,26,27], la photoconductivité transitoire (TPC) [28,29], la photoconductivité modulée MPC [30,31,32];

- (e) mesures sur des structures capacitives; par exemple: "deep level transient spectroscopy" (DLTS) [33] ou "space charge limited current" (SCLS) [34];
- (f) mesures de résonance paramagnétique électronique (ESR) [35].

Pour comparer et discuter des résultats de ces différentes méthodes, il faut connaître les mécanismes sur lesquels elles se basent et les problèmes qu'elles engendrent. Citons par exemple, les problèmes de contacts, de surface, l'influence de la position du niveau de Fermi, de l'occupation de charge des défauts, etc. Le débat est actuellement encore ouvert sur l'interprétation des résultats et la comparaison d'une méthode à l'autre. Les résultats de ces mesures sont continuellement "raffinés".

Pour un matériau non dopé de relativement bonne qualité (faible densité de défauts), les estimations dues aux techniques citées précédemment permettent de nous imaginer la distribution des états électroniques de la façon suivante:

- deux bandes de conduction et de valence paraboliques;
- deux queues de bande exponentielles d'une énergie caractéristique de:

$$E_o^c \approx 20 - 25 \text{ meV} \text{ pour la queue de bande de conduction,}$$

$$E_o^v \approx 45 - 55 \text{ meV} \text{ pour la queue de bande de valence;}$$
- une décroissance un peu plus faible est observée pour le début des queues de bande près des seuils de mobilité E_c et E_v ;
- une distribution assez large de défauts profonds assimilés aux liaisons pendantes d'une densité totale allant d'environ $10^{15} \text{ défauts/cm}^3$ pour un matériau non dégradé jusqu'à environ $10^{17} - 10^{18} \text{ défauts/cm}^3$ pour un matériau dégradé et d'une largeur énergétique estimée à environ 0.5 eV;
- une énergie de gap optique située au environ de $E_g \approx 1.8 \text{ eV}$.

Les queues de bande exponentielles varient très peu d'un matériau non dopé à un matériau micro-dopé [20]. Par contre, le micro-dopage accroît la densité de défauts profonds [16].

Les liaisons pendantes restent un des paramètres du a-Si:H les plus méconnus et les plus controversés. Le modèle des défauts profonds (liaisons pendantes) que nous allons décrire par la suite est le modèle le plus couramment et le plus largement accepté. Cependant, il existe d'autres modèles plus complexes de la densité d'états des liaisons pendantes, par exemple le modèle dit du "réservoir de défauts" (defect pool model) [36,37].

Chaque état énergétique électronique peut être occupé par un ou deux électrons, ces derniers ayant, dû au principe d'exclusion de Pauli, des spins opposés. Une liaison pendante peut alors exister dans trois états de charge différents selon la position du niveau de Fermi :

- (a) une liaison pendante est neutre D^0 si elle est simplement occupée;
- (b) une liaison pendante est positivement chargée D^+ si elle n'est pas occupée;
- (c) une liaison pendante est négativement chargée D^- si elle est doublement occupée.

Dans le dernier cas, l'énergie de l'état est légèrement plus élevée. On suppose que cela est dû à la répulsion coulombienne entre électrons. Les deux niveaux énergétiques simplement et doublement occupés sont donc décalés d'une énergie U que l'on nomme *énergie de corrélation*. Elle n'est pas bien connue; on estime qu'elle doit être positive et valoir autour de $U \approx 0.2 eV$ [33].

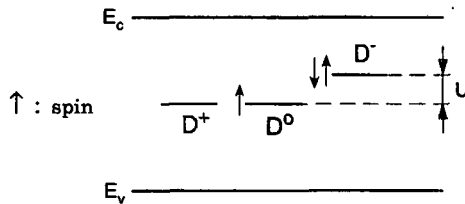


Figure 1.5: illustration des trois différents états de charge des liaisons pendantes et de leur occupation électronique.

1.6 La photoconductivité transitoire

Une grande variété d'expériences basées sur la réponse transitoire à une excitation lumineuse a été utilisée pour étudier les propriétés de transport dans les matériaux désordonnés et en particulier dans le a-Si:H. Ces différentes expériences ont pu être décrites de manière satisfaisante dans le cadre du modèle du piégeage multiple [9,10,38]. Diverses approches ont été envisagées telles que la simulation numérique (voir par exemple [28], [39] et [40]) et l'approximation de l'énergie de démarcation dépendante du temps (modèle de "TROC") [41,42] qui décrit l'évolution des porteurs excédentaires. D'autre part, Pandya & Schiff [43]

ont proposé une résolution des équations du piégeage multiple en présence d'un fond lumineux continu.

Notre travail s'inscrit dans le prolongement de cette dernière étude. Mais, au lieu de regarder l'évolution temporelle d'un excès de porteurs superposé à une illumination de fond, nous avons étudié la variation temporelle de la photoconductivité causée par un très léger changement de l'état stationnaire [44]. Cette façon de faire nous autorise, comme dans le cas précédent, à linéariser les équations du piégeage multiple. Un modèle de la densité d'états et de la recombinaison des porteurs libres sur les liaisons pendantes nous permettra, moyennant une hypothèse supplémentaire sur l'occupation des queues de bande, de trouver une expression analytique de la variation de la photoconductivité dans les échantillons non dopés et dopés du type n. Une étude globale de la variation de la densité des porteurs libres (électrons et trous) et des liaisons pendantes sera effectuée permettant de trouver les conditions de validité du traitement séparé des électrons et des trous, hypothèse admise à priori chez Pandya & Schiff.

De plus, en ajustant les courbes théoriques obtenues dans le cadre de ce modèle aux résultats expérimentaux, on pourra déduire le temps de recombinaison des porteurs libres. Celui-ci nous permettra, combiné à des mesures stationnaires de photoconductivité et de longueur de diffusion ambipolaire, d'en extraire la mobilité de bande (microscopique) des porteurs.

Modèle de calcul

2.1 Mécanismes de transport

Les conditions de mesures de la photoconductivité transitoire, c'est-à-dire quand le a-Si:H est illuminé, à température ambiante, par une source lumineuse monochromatique d'énergie légèrement supérieure au gap optique, nous permettent de faire les hypothèses suivantes concernant les mécanismes de transport illustrés à la figure 2.1 (voir Introduction).

- (h1) La conduction se fait dans les états étendus [4,6] par des porteurs libres ayant une mobilité de bande μ_n^o pour les électrons et μ_p^o pour les trous. La mobilité est nulle pour les porteurs des états localisés.
- (h2) La conductivité dans l'obscurité est négligeable par rapport à la photoconductivité [16].
- (h3) L'illumination produit une génération bande à bande. Un photon crée une paire de porteurs libres.
- (h4) La recombinaison a lieu par capture des porteurs libres (uniquement) sur un état énergétique discret des liaisons pendantes [6,17]. Les émissions thermiques depuis les liaisons pendantes vers les bandes peuvent être négligées [12,45].
- (h5) Des processus de piégeage multiple (capture et émission de porteurs libres) ont lieu entre les queues de bande de conduction et de valence et leurs bandes respectives [38].

2.1.1 Les bandes

Les électrons libres ont une énergie égale ou supérieure à E_c , proche de E_c . On considère pour simplifier qu'ils ont tous la même énergie E_c d'une densité effective N_c . L'occupation de ces états est donnée par la fonction de Fermi-Dirac $f(E_c)$ évaluée pour l'énergie E_c . La densité d'électrons libres vaut donc:

$$n = N_c f(E_c) \quad (2.1)$$

De manière similaire, pour les trous, on ne considère qu'un seul niveau énergétique E_v avec une densité d'états effective N_v et la densité de trous libres est donnée par

$$p = N_v f(E_v) \quad (2.2)$$

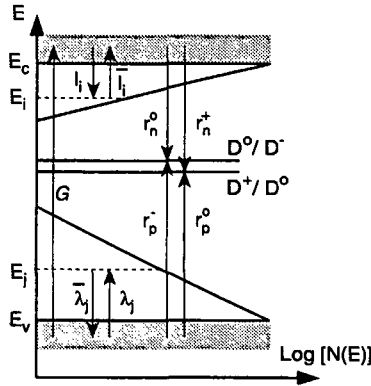


Figure 2.1: transitions permises dans le modèle entre états étendus et états localisés. G est le taux de génération interbande. Il représente le nombre de paires électrons-trous créées par unité de temps et de volume.

2.1.2 Les queues de bande

Dans une première approche, nous allons supposer une densité d'états discrète dans les queues de bande. On considère donc des niveaux d'énergie discrets E_i pour la queue de bande de conduction de densité N_i ainsi que E_j et N_j pour la queue de bande de valence.

L'occupation de ces états est aussi donnée par la statistique de Fermi-Dirac.

$$n_i = N_i f(E_i) \quad (2.3)$$

$$p_j = N_j (1 - f(E_j)) \quad (2.4)$$

Le taux de capture l_i des électrons libres par les pièges est proportionnel à leur densité et à la densité de places disponibles,

$$l_i(t) = w_{in} n(t) [N_i - n_i(t)] \quad (2.5)$$

où w_{in} est le coefficient de capture d'un électron libre par le niveau piège i de la queue de bande de conduction.

Le taux d'émission est proportionnel à l'occupation du niveau i par un électron. La bande de conduction étant relativement peu remplie, un électron y trouvera forcément une place,

$$\bar{l}_i(t) = e_{in} n_i(t) \quad (2.6)$$

où e_{in} est le coefficient d'émission thermique d'un électron piégé au niveau i de la queue de bande vers la bande de conduction.

Pour les trous, on a mutatis mutandis,

$$\lambda_j(t) = w_{jp} p(t) [N_j - p_j(t)] \quad (2.7)$$

$$\bar{\lambda}_j(t) = e_{jp} p_j(t) \quad (2.8)$$

2.1.3 Les liaisons pendantes

Les trois états de charge des liaisons pendantes définissent quatre transitions possibles des électrons et des trous libres vers les liaisons pendantes permettant deux chemins de recombinaison en parallèle:

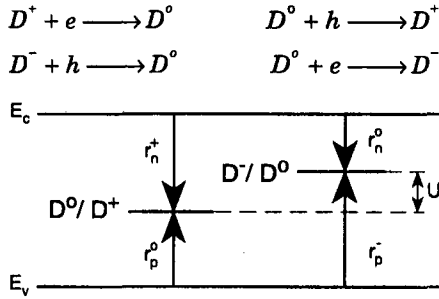


Figure 2.2: transitions des porteurs libres vers les liaisons pendantes.

Les taux de capture des porteurs libres sur les centres de recombinaison que sont les liaisons pendantes sont proportionnels, dans une approche balistique [46], à la densité de porteurs libres, à la densité de liaisons pendantes disponibles, à la vitesse thermique des porteurs libres v_{th} et à une constante que l'on nomme **section efficace de capture** caractéristique du centre et du porteur en question. La vitesse thermique n'est en principe pas la même pour les électrons et les trous. Toutefois, on fait l'hypothèse qu'elle est identique pour les deux porteurs. Pour les quatre différents chemins de capture, on obtient les taux suivants:

$$r_n^+(t) = v_{th} \sigma_n^+ n(t) N^+(t) \quad (2.9)$$

$$r_n^0(t) = v_{th} \sigma_n^0 n(t) N^0(t) \quad (2.10)$$

$$r_p^-(t) = v_{th} \sigma_p^- p(t) N^-(t) \quad (2.11)$$

$$r_p^0(t) = v_{th} \sigma_p^0 p(t) N^0(t) \quad (2.12)$$

avec

v_{th} : vitesse thermique classique des porteurs libres supposée identique pour les électrons et les trous;

σ_n^0 : section efficace de capture des électrons par les liaisons pendantes neutres;

σ_n^+ : section efficace de capture des électrons par les liaisons pendantes positives;

σ_p^0 : section efficace de capture des trous par les liaisons pendantes neutres;

σ_p^- : section efficace de capture des trous par les liaisons pendantes négatives;

N^o, N^+, N^- représentent les densités de liaisons pendantes respectivement neutres, chargées positivement et chargées négativement. Elles sont liées par

$$N_{db} = N^o(t) + N^-(t) + N^+(t) = cte \quad (2.13)$$

2.2 Equations d'évolution

Avec le modèle de la densité d'états que nous avons introduit précédemment et les mécanismes de piégeage et de recombinaison qui s'y produisent, on va décrire l'évolution temporelle de six variables densités:

- $n(t)$: densité d'électrons libres;
- $p(t)$: densité de trous libres;
- $n_i(t)$: densité d'électrons piégés sur le niveau i d'énergie E_i ;
- $p_j(t)$: densité de trous piégés sur le niveau j d'énergie E_j ;
- $N^-(t)$: densité de liaisons pendantes chargées négativement;
- $N^+(t)$: densité de liaisons pendantes chargées positivement;

une équation pour $N^o(t)$ serait redondante car N_{db} est constant.

Les équations d'évolution s'écrivent de la façon suivante:

$$\frac{d}{dt} n(t) = G(t) - \sum_i [l_i(t) - \bar{l}_i(t)] - [r_n^o(t) + r_n^+(t)] \quad (I)$$

$$\frac{d}{dt} p(t) = G(t) - \sum_j [\lambda_j(t) - \bar{\lambda}_j(t)] - [r_p^o(t) + r_p^-(t)] \quad (II)$$

$$\frac{d}{dt} n_i(t) = l_i(t) - \bar{l}_i(t) \quad (III)$$

$$\frac{d}{dt} p_j(t) = \lambda_j(t) - \bar{\lambda}_j(t) \quad (IV)$$

$$\frac{d}{dt} N^-(t) = r_n^o(t) - r_p^-(t) \quad (V)$$

$$\frac{d}{dt} N^+(t) = r_p^o(t) - r_n^+(t) \quad (VI)$$

2.3 Equilibre thermodynamique

A partir du système d'équations précédent, on voit que, lorsqu'il y a équilibre thermodynamique, la génération est nulle et il y a, pour chaque niveau de pièges de la queue de bande, égalité entre le taux de capture et d'émission thermique. Ceci est une conséquence de la relation du **bilan détaillé**.

$$l_i = \bar{l}_i \quad \text{et} \quad \lambda_j = \bar{\lambda}_j \quad (2.14)$$

L'occupation des états électroniques dans la queue de bande et la bande de conduction est donnée par la fonction de Fermi-Dirac:

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{\beta(E - E_F)}}$$

$$\beta = 1/k_B T$$

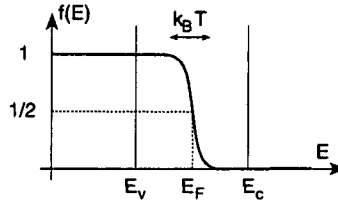


Figure 2.3: probabilité d'occupation électronique donnée par la fonction de Fermi-Dirac. Presque toute la variation se fait sur un intervalle d'énergie $k_B T$.

Elle est approximée, pour des états d'énergie tels que $E - E_F \gg k_B T$, par la fonction de Boltzmann. En effet, pour la plupart des cas considérés ici, le niveau de Fermi se trouve bien en dehors des queues de bande. Ce n'est plus vrai si le taux de dopage est élevé.

$$n = N_c \exp[-\beta(E_c - E_F)] \quad (2.15)$$

$$n_i = N_i \exp[-\beta(E_i - E_F)] \quad (2.16)$$

La relation du bilan détaillé s'écrit ici

$$\frac{e_{in}}{w_{in}} = N_c \exp[-\beta(E_c - E_i)] \quad (2.17)$$

Similairement, on obtient pour les trous

$$p = N_v \exp[-\beta(E_F - E_v)] \quad (2.18)$$

$$p_j = N_j \exp[-\beta(E_F - E_j)] \quad (2.19)$$

et

$$\frac{e_{jp}}{w_{jp}} = N_v \exp[-\beta(E_j - E_v)] \quad (2.20)$$

2.4 Etat stationnaire hors équilibre thermodynamique

Lorsque le photoconducteur est soumis à une illumination continue, le taux de génération est indépendant du temps

$$G(t) = G \quad (2.21)$$

Il en résulte un état *stationnaire* pour toutes les variables et il y a égalité entre les taux de génération et de recombinaison par les liaisons pendantes

$$G = R = r_n^o + r_n^+ = r_p^o + r_p^- \quad (2.22)$$

De la même manière que dans l'étude des semiconducteurs cristallins, on exprime le taux de recombinaison en fonction de la densité de porteurs libres.

$$R = \frac{n}{\tau_n^R} = \frac{p}{\tau_p^R} \quad (2.23)$$

où τ_n^R et τ_p^R représentent les temps de recombinaison des porteurs excédentaires.

Remarquons qu'en général, τ_n^R et τ_p^R ne sont pas des constantes du matériau [47].

Par (2.9) à (2.12), on obtient

$$\frac{1}{\tau_n^R} = v_{th} \sigma_n^o N^o + v_{th} \sigma_n^+ N^+ \quad (2.24)$$

$$\frac{1}{\tau_p^R} = v_{th} \sigma_p^o N^o + v_{th} \sigma_p^- N^- \quad (2.25)$$

Par les équations (V et VI), on peut exprimer les densités des liaisons pendantes en fonction des concentrations de porteurs libres (voir équations (2.34) et (2.35)).

La notion de *quasi-niveaux de Fermi* E_{Fn} et E_{Fp} est introduite pour exprimer la concentration des porteurs libres hors équilibre thermodynamique par analogie avec l'équilibre thermodynamique [2].

$$n = N_c \exp[-\beta(E_c - E_{Fn})] \quad (2.26)$$

$$p = N_v \exp[-\beta(E_{Fp} - E_v)] \quad (2.27)$$

En général, on admet que les relations (2.17) et (2.20) entre coefficients de capture et d'émission thermique issues de l'application du principe du bilan détaillé restent valables dans ce cas [2]. On trouve alors la fonction d'occupation des queues de bande en termes de E_{Fn} et E_{Fp}

$$f(E_i) = \frac{1}{1 + e^{\beta(E_i - E_{Fn})}} \quad (2.28)$$

$$1 - f(E_j) = \frac{1}{1 + e^{\beta(E_{Fp} - E_j)}} \quad (2.29)$$

E_{Fn} et E_{Fp} définissent donc un niveau d'énergie des queues de bande où la probabilité de capture d'un porteur libre est égale à la probabilité d'émission thermique d'un porteur piégé vers la bande. Dans le cas où on néglige la recombinaison par les états des queues de bande (hypothèse h4), les quasi-niveaux de Fermi E_{Fn} et E_{Fp} sont identiques aux niveaux de démarcation. En effet, les niveaux de démarcation introduits par Taylor et Simmons [48], niveaux séparant les pièges des centres de recombinaison, définissent un niveau énergétique, par exemple de la queue de bande de conduction, pour lequel la probabilité d'émission thermique d'un électron vers la bande est égale à la probabilité de capture d'un électron libre et d'un trou libre. Si on néglige la capture d'un trou libre par un état de la queue de bande (pas de recombinaison par les queues de bande), la définition du niveau de démarcation est identique à celle du quasi-niveau de Fermi.

Nous avons fait une hypothèse supplémentaire concernant l'occupation des pièges des queues de bande:

- (h6) les états en dessous de E_{Fn} ou en dessus de E_{Fp} sont tous occupés;
- (h7) les états en dessus de E_{Fn} ou en dessous de E_{Fp} sont faiblement occupés et l'occupation est du type Boltzmann.

Les densités inconnues valent donc pour un état stationnaire hors équilibre:

$$n = N_c \exp[-\beta(E_c - E_{Fn})] \quad (2.30)$$

$$p = N_v \exp[-\beta(E_{Fp} - E_v)] \quad (2.31)$$

$$n_i = \begin{cases} N_i \exp[-\beta(E_i - E_{Fn})] & \text{si } E_{Fn} < E_i < E_c \\ N_i & \text{si } E_F < E_i < E_{Fn} \end{cases} \quad (2.32)$$

$$p_j = \begin{cases} N_j \exp[-\beta(E_{Fp} - E_j)] & \text{si } E_v < E_j < E_{Fp} \\ N_j & \text{si } E_{Fp} < E_j < E_F \end{cases} \quad (2.33)$$

$$N^- = \frac{\frac{\sigma_n^o}{\sigma_p^-} \frac{n}{p}}{\frac{\sigma_p^o}{\sigma_n^+} \frac{p}{n} + 1 + \frac{\sigma_n^o}{\sigma_p^-} \frac{n}{p}} N_{db} \quad (2.34)$$

$$N^+ = \frac{\frac{\sigma_p^o}{\sigma_n^+} \frac{p}{n}}{\frac{\sigma_p^o}{\sigma_n^+} \frac{p}{n} + 1 + \frac{\sigma_n^o}{\sigma_p^-} \frac{n}{p}} N_{db} \quad (2.35)$$

Calcul de la réponse transitoire

3.1 Linéarisation du système

On va calculer la réponse temporelle des six variables due à un petit saut instantané du taux de génération. On ajoute donc une petite perturbation à une génération constante et on regarde comment le nouvel état stationnaire est atteint.

$$G(t) = G + \delta G(t)$$
$$\delta G(t) = \begin{cases} 0 & \text{si } t < 0 \\ \delta G & \text{si } t \geq 0 \end{cases} \quad \left| \frac{\delta G}{G} \right| \approx 5\% \quad (3.1)$$

La perturbation étant faible, on fait un calcul petit signal en substituant dans les six équations d'évolution:

$$n(t) = n + \delta n(t), \quad p(t) = p + \delta p(t), \quad n_i(t) = n_i + \delta n_i(t), \quad p_j(t) = p_j + \delta p_j(t),$$
$$N^-(t) = N^- + \delta N^-(t) \quad \text{et} \quad N^+(t) = N^+ + \delta N^+(t).$$

En tenant compte des relations valables pour un état stationnaire et en ne gardant que les termes *linéaires* dans les variations, on obtient six équations différentielles linéaires couplées pour lesquelles on effectue une transformation de Laplace. La **transformation de Laplace** unilatérale d'une fonction $f(t)$ définie pour $t \geq 0$, notée $\tilde{f}(z)$ de variable complexe z , est donnée par ^[49]:

$$f(t) \xrightarrow{\mathcal{L}} \tilde{f}(z) = \int_0^{\infty} dt e^{-zt} f(t) \quad (3.2)$$

Les transformations de variables utiles pour notre système sont (on omettra par la suite l'indice \sim):

$$\delta n(t) \xrightarrow{\mathcal{L}} \delta \tilde{n}(z); \frac{d}{dt} \delta n(t) \xrightarrow{\mathcal{L}} z \delta \tilde{n}(z); \delta G \xrightarrow{\mathcal{L}} \frac{\delta G}{z} \quad (3.3)$$

Le système d'équations linéaires formulé dans le domaine de Laplace peut être réduit de six à quatre équations en tirant de (III) et (IV):

$$\delta n_i(z) = \frac{w_{in}(N_i - n_i)}{z + e_{in} + n w_{in}} \delta n(z) \quad (3.4)$$

$$\delta p_j(z) = \frac{w_{jp}(N_j - p_j)}{z + e_{jp} + p w_{jp}} \delta p(z) \quad (3.5)$$

On définit les fonctions $f_n(z)$ et $f_p(z)$ qui contiennent tout *l'effet du trafic dans les queues de bande*:

$$f_n(z) = z \sum_i \frac{w_{in}(N_i - n_i)}{z + n w_{in} + e_{in}} \quad (3.6)$$

$$f_p(z) = z \sum_i \frac{w_{jp}(N_j - p_j)}{z + p w_{jp} + e_{jp}} \quad (3.7)$$

Ainsi que l'inverse des temps de recombinaison des porteurs libres

$$\lambda_n = \frac{1}{\tau_n^R} = v_{th} \sigma_n^o N^o + v_{th} \sigma_n^+ N^+ \quad (3.8)$$

$$\lambda_p = \frac{1}{\tau_p^R} = v_{th} \sigma_p^o N^o + v_{th} \sigma_p^- N^- \quad (3.9)$$

Par commodité, on définit aussi les fréquences:

$$\omega_n^o = v_{th} \sigma_n^o n, \quad \omega_n^+ = v_{th} \sigma_n^+ n, \quad (3.10)$$

$$\omega_p^o = v_{th} \sigma_p^o p, \quad \omega_p^- = v_{th} \sigma_p^- p, \quad (3.11)$$

$$\rho_n^o = v_{th} \sigma_n^o N^o, \quad \rho_n^+ = v_{th} \sigma_n^+ N^+, \quad (3.12)$$

$$\rho_p^o = v_{th} \sigma_p^o N^o, \quad \rho_p^- = v_{th} \sigma_p^- N^-. \quad (3.13)$$

On obtient alors un système de quatre équations linéaires inhomogènes couplées que l'on peut écrire sous forme matricielle

$$z \begin{pmatrix} \delta n(z) \\ \delta p(z) \\ \delta N^-(z) \\ \delta N^+(z) \end{pmatrix} = \mathbf{A}(z) \begin{pmatrix} \delta n(z) \\ \delta p(z) \\ \delta N^-(z) \\ \delta N^+(z) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{\delta G}{z} \\ \frac{\delta G}{z} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

avec

$$\mathbf{A}(z) = \begin{pmatrix} -f_n(z) - \lambda_n & 0 & \omega_n^o & -\omega_n^+ + \omega_n^o \\ 0 & -f_p(z) - \lambda_p & -\omega_p^- + \omega_p^o & \omega_p^o \\ \rho_n^o & -\rho_p^- & -\omega_n^o - \omega_p^- & -\omega_n^o \\ -\rho_n^+ & \rho_p^o & -\omega_p^o & -\omega_p^o - \omega_n^+ \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

La résolution du système pour les variations des densités de porteurs recherchées est donnée par

$$\delta n(z) = \sum_{j=1}^2 \left[(z - \mathbf{A}(z))^{-1} \right]_{1j} \frac{\delta G}{z} \quad (3.16)$$

$$\delta p(z) = \sum_{j=1}^2 \left[(z - \mathbf{A}(z))^{-1} \right]_{2j} \frac{\delta G}{z} \quad (3.17)$$

3.2 Effet des queues de bande: calcul de $f_n(z)$ et $f_p(z)$

Pour calculer l'effet des queues de bande représenté par les fonctions $f_n(z)$ et $f_p(z)$, on revient à une densité d'états de pièges continue $N(E)$ dans les queues de bande. La sommation devient une intégrale portant sur les états allant de E_{min} aux bords de bande E_c et E_v . On considère le coefficient de capture w_{in} indépendant du niveau énergétique, que l'on désigne par b [42]. Il est pris identique pour les pièges des queues de bande de conduction et de valence.

$$w_{in}, w_{jp} \longrightarrow b$$

$$N_i, N_j \longrightarrow N(E) dE$$

3.2.1 Queue de bande de conduction

Pour la queue de bande de conduction, la relation (2.17) du bilan détaillé devient:

$$\frac{e_n(E)}{b} = N_c \exp[-\beta(E_c - E)] \quad (3.18)$$

La fonction $f_n(z)$ s'écrit,

$$f_n(z) = zb \int_{E_{min}}^{E_c} dE \frac{N(E)[1-f(E)]}{z + nb + e_n(E)} \quad (3.19)$$

On a fait l'hypothèse que les états en dessous de E_{Fn} sont tous occupés et qu'en dessus l'occupation reste faible et est donnée par le facteur de Boltzmann:

$$f(E) = \begin{cases} e^{-\beta(E-E_{Fn})} \ll 1 & \text{pour } E_{Fn} < E < E_c \\ 1 & \text{pour } E_{min} < E < E_{Fn} \end{cases} \quad (3.20)$$

L'intégrale (3.19) est donc non nulle pour des énergies allant de E_{Fn} à E_c ,

$$f_n(z) = zb \int_{E_{Fn}}^{E_c} dE \frac{N(E)}{z + nb + e_n(E)} \quad (3.21)$$

Il faut maintenant introduire une forme de la distribution des états de la queue de bande de conduction.

Distribution exponentielle

On a tout d'abord considéré une queue de bande purement exponentielle. La distribution d'états peut donc s'exprimer comme

$$N(E) = N_o \exp[-\beta_c(E_c - E)] \quad (3.22)$$

où $\beta_c = 1/k_B T_c$ représente la décroissance caractéristique de la queue de bande de conduction et N_o la densité de pièges au seuil de mobilité E_c .

On effectue le changement de variable suivant:

$$u = e_n(E) = N_c b \exp[-\beta(E_c - E)] \quad ; \quad du = \beta u dE$$

donc

$$u_{inf} = e_n(E_{Fn}) = nb \quad ; \quad u_{sup} = e_n(E_c) = N_c b$$

En définissant le paramètre caractéristique α_n de la queue de bande de conduction exponentielle

$$\alpha_n = \frac{T}{T_c} = \frac{\beta_c}{\beta} \quad (3.23)$$

l'intégrale prend la forme:

$$f_n(z) = \frac{zb}{(N_c b)^{\alpha_n}} \frac{N_o}{\beta} \int_{nb}^{N_o b} du \frac{u^{\alpha_n-1}}{z+nb+u} \quad (3.24)$$

En supposant que la distribution des états dans la bande est égale à la distribution au bord de la queue de bande (continuité), on peut calculer la densité d'états effective N_c

$$N_c = \int_{E_c}^{\infty} dE N(E) f(E) = \frac{N_o}{\beta} \quad (3.25)$$

et l'intégrale à effectuer devient

$$f_n(z) = z(N_c b)^{1-\alpha_n} \int_{nb}^{N_o b} du \frac{u^{\alpha_n-1}}{z+nb+u} \quad (3.26)$$

Cette intégrale peut être calculée analytiquement pour certaines valeurs de α_n entier et demi-entier. Pour la queue de bande de conduction, les données expérimentales nous ont permis d'estimer l'énergie caractéristique de la queue de bande (approximativement exponentielle) à

$$k_B T_c = 20 - 25 \text{ meV} \quad (3.27)$$

et comme à température ambiante

$$k_B T = 25 \text{ meV} \quad (3.28)$$

on peut raisonnablement choisir

$$\alpha_n = 1 \quad (3.29)$$

L'intégrale à effectuer est alors

$$f_n(z) = z \int_{nb}^{N_o b} du \frac{1}{z+nb+u} \quad (3.30)$$

On peut intégrer et en négligeant dans tous les calculs suivants n devant N_c , on trouve que $f_n(z)$ vaut

$$f_n(z) = z \operatorname{Log} \frac{z + N_c b}{z + 2nb} \quad (3.31)$$

Distribution exponentielle + constante

La fonction $f_n(z)$ a aussi été calculée pour une autre distribution d'états de la queue de bande de conduction. A une même décroissance exponentielle, on ajoute une densité constante N_m d'états profonds.

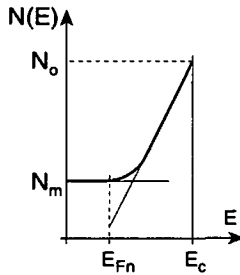


Figure 3.1: illustration de la distribution d'états de la queue de bande de conduction composée d'une exponentielle et d'une densité constante d'états profonds.

Cette forme correspond mieux aux données expérimentales connues de la densité d'états [20,29,31,32,33]. De plus, pour les intensités lumineuses choisies, on a évalué la position du quasi-niveau de Fermi autour de $0.4 - 0.5 \text{ eV}$ en dessous de E_c . Dans ce domaine d'énergie, la fonction exponentielle est déjà très petite, beaucoup trop par rapport aux valeurs expérimentales de la densité d'états. Il semble donc judicieux de faire cette modification au modèle de la queue de bande. Nous y reviendrons plus tard.

Le chemin permettant de calculer $f_n(z)$ dans ce cas est le même que précédemment. La distribution prend la forme

$$N(E) = N_o \exp[-\beta_c (E_c - E)] + N_m \quad (3.32)$$

La nouvelle fonction de la queue de bande que l'on nomme $\hat{f}_n(z)$ est donnée par la précédente fonction $f_n(z)$ à laquelle on ajoute l'intégrale sur la densité constante N_m

$$\hat{f}_n(z) = f_n(z) + zb \int_{E_{Fn}}^{E_c} dE \frac{N_m}{z + nb + e_n(E)} \quad (3.33)$$

On obtient, en procédant de la même façon qu'auparavant

$$\hat{f}_n(z) = z \operatorname{Log} \frac{z + N_c b}{z + 2nb} + \frac{z}{z + nb} \frac{N_m b}{\beta} \left[\operatorname{Log} \frac{N_c}{n} - \operatorname{Log} \frac{z + N_c b}{z + 2nb} \right] \quad (3.34)$$

3.2.2 Queue de bande de valence

Pour calculer la fonction de la queue de bande de valence $f_p(z)$, on fait les mêmes considérations en changeant ce qui est nécessaire. Pour une énergie caractéristique de la distribution d'états exponentielle mesurée

$$k_B T_v = 45 - 55 \text{ meV} \quad (3.35)$$

on a choisi

$$\alpha_p = \frac{1}{2} \quad (3.36)$$

On suppose de plus que les densités effectives de porteurs dans les bandes sont identiques

$$N_c = N_v \quad (3.37)$$

La fonction à intégrer est alors

$$f_p(z) = z \sqrt{N_c b} \int_{pb}^{N_c b} du \frac{1}{\sqrt{u(z + pb + u)}} \quad (3.38)$$

La table d'intégrale Gradshteyn-Ryzhik [50] (équation n° 2.211) donne une primitive et distingue deux cas. Après quelques manipulations algébriques, on trouve:

(a) $z + pb > 0$:

$$f_p(z) = z \sqrt{\frac{N_c b}{z + pb}} \left[\pi - 2 \operatorname{arctg} \sqrt{\frac{pb}{z + pb}} \right] \quad (3.39)$$

(b) $z + pb < 0$:

$$f_p(z) = z \sqrt{\frac{N_c b}{z + pb}} \operatorname{Log} \left[\frac{z + N_c b}{z + 2pb} \frac{z - 2\sqrt{pb|z + pb|}}{z - N_c b - 2\sqrt{N_c b|z + pb|}} \right] \quad (3.40)$$

3.3 Cas du a-Si:H non-dopé

3.3.1 Simplification de la matrice $A(z)$

Nous allons maintenant essayer de trouver des conditions telles que la matrice A se simplifie afin d'obtenir une expression analytique utilisable des variations de densités de porteurs $\delta n(z)$ et $\delta p(z)$.

Regardons tout d'abord les sections efficaces de capture des liaisons pendantes. A cause de l'interaction coulombienne, les sections efficaces de capture des liaisons pendantes chargées sont plus grandes que celles des neutres. Ces valeurs ne sont malheureusement pas bien connues. Certains auteurs préconisent un rapport entre 5 et 50 [51,52,53]. D'autres estiment que ce rapport est plus élevé, entre 100 et 300 [16,32,54]. Pour notre calcul, nous avons choisi

$$\frac{\sigma_n^+}{\sigma_n^0} \approx 100 \text{ et } \frac{\sigma_p^-}{\sigma_p^0} \approx 100 \quad (3.41)$$

Les sections efficaces neutres des deux types de porteurs ne sont pas très différentes. On admet communément que leur rapport est de l'ordre de grandeur du rapport des mobilités de bande [16,17]. On a choisi

$$\sigma_n^0 \approx \sigma_p^0 \quad (3.42)$$

Connaissant les rapports de sections efficaces, on peut tracer à partir des équations (2.34) et (2.35) l'allure des fonctions d'occupation des liaisons

pendantes à l'état stationnaire en fonction du rapport électrons libres sur trous libres n/p .

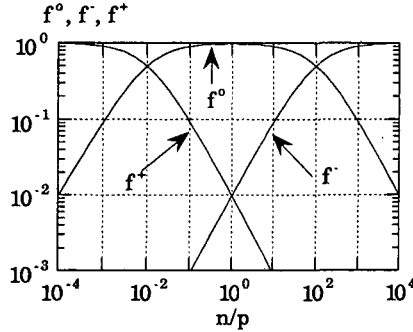


Figure 3.2: occupation des liaisons pendantes en fonction du rapport n/p à l'état stationnaire avec les hypothèses précédentes sur les sections efficaces de capture.

Différentes mesures montrent que le a-Si:H non-dopé présente un léger caractère de type $\langle n \rangle$. Ceci est dû aux impuretés non désirées, telles que l'oxygène et l'azote, qui se trouvent dans la chambre de dépôt lors de la fabrication des couches. On a donc toujours

$$n/p \gg 1 \quad (3.43)$$

De plus, en combinant des mesures stationnaires de photoconductivité et de longueur de diffusion ambipolaire (voir par exemple [16] et [47]), on peut extraire un paramètre B défini par

$$B = \frac{\mu_n^{\circ} n}{\mu_p^{\circ} p} \quad (3.44)$$

Ce paramètre a été mesuré sur différentes couches non dopées [16,47] et on constate qu'il ne dépasse pas 300. Notons que nous avons choisi la lettre B car le petit b , symbole utilisé dans les articles cités, correspond ici au coefficient de capture des pièges des queues de bande. Si on considère que le rapport des mobilités de bande $\mu_n^{\circ}/\mu_p^{\circ}$ vaut environ 3, on voit que

$$1 < \frac{n}{p} < 100 \quad (3.45)$$

On obtient donc, avec (3.10) et (3.11), la hiérarchie en fréquences

$$\omega_n^{+} > \omega_p^{-} > \omega_n^{\circ} > \omega_p^{\circ} \quad (3.46)$$

On désire une expression simple pour la variation des densités de porteurs. Une possibilité serait d'avoir la condition

$$\frac{\lambda_n}{\omega_n^+} > 1 \quad (3.47)$$

Dans ce cas, on peut négliger dans la matrice $A(z)$ les éléments A_{13} et A_{14} de la première ligne et la condition précédente s'écrit en remplaçant les expressions de λ_n et ω_n^+

$$n < \frac{\sigma_n^o}{\sigma_n^+} N^o \quad (3.48)$$

Des mesures de densité de défauts [23,24,25] donnent pour un matériau de bonne qualité dans un état recuit une valeur de la quantité totale de liaisons pendantes

$$N_{db} \approx 10^{15} \text{ cm}^{-3} \quad (3.49)$$

En regardant la figure 3.2 pour des valeurs de n/p inférieures à 100, on voit que l'occupation vaut

$$0.5 < f^o < 1 \quad (3.50)$$

On a illustré la condition limite (3.48) à la figure suivante pour une densité de liaisons pendantes de 10^{15} cm^{-3} .

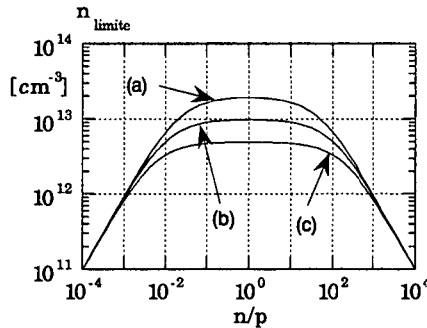


Figure 3.3: densité limite d'électrons libres n_{limite} en fonction du rapport n/p pour une densité de liaisons pendantes de $N_{db} = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ et pour un rapport de sections efficaces de: (a) 50, (b) 100 et (c) 200.

On peut raisonnablement admettre comme cas extrême ($n/p < 100$)

$$n < 5 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3} \quad (3.51)$$

Cette condition peut être satisfaite dans le cas non-dopé recuit. Néanmoins il faut la contrôler d'autant plus que l'on connaît mal le rapport des sections efficaces chargées et neutres. Elle n'est pas vérifiée lorsque l'échantillon est de très bonne qualité et totalement recuit (n grand, N° petit). En général, une très légère dégradation de celui-ci suffit à la satisfaire. Nous en reparlerons en temps voulu lorsque nous comparerons les mesures expérimentales aux résultats théoriques.

Pour la variation de densité de trous libres $\delta p(z)$, une condition similaire est donnée par

$$\frac{\lambda_p}{\omega_p} > 1 \quad (3.52)$$

Cette condition peut s'écrire
$$\frac{\lambda_p}{\omega_p} \approx \frac{N^-}{p} > 1 \quad (3.53)$$

Avec au minimum $N_{db} \geq 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ et $f^- \geq 0.01$, elle devient

$$p < 10^{13} \text{ cm}^{-3} \quad (3.54)$$

Cette condition est automatiquement satisfaite si la précédente l'est car la densité de trous libres vaut approximativement $p \approx 10^{11} - 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ (voir les mesures de longueur de diffusion ambipolaire [16,47]).

Dans le cas où la condition donnée par (3.51) est satisfaite, la matrice $A(z)$ prend la forme simplifiée

$$A(z) = \begin{pmatrix} -f_n(z) - \lambda_n & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -f_p(z) - \lambda_p & 0 & 0 \\ * & * & * & 0 \\ * & * & * & * \end{pmatrix} \quad (3.55)$$

Les éléments représentés par des astérisques (*) n'interviennent pas dans le calcul des densités de porteurs libres recherchées. Par (3.16) et (3.17), on trouve les deux expressions *découplées* des variations des densités de porteurs libres:

$$\delta n(z) = \frac{\delta G}{z} \frac{1}{z + f_n(z) + \lambda_n} \quad (3.56)$$

$$\delta p(z) = \frac{\delta G}{z} \frac{1}{z + f_p(z) + \lambda_p} \quad (3.57)$$

L'objectif est maintenant de revenir dans le domaine du temps. Nous allons présenter le calcul détaillé uniquement pour $\delta n(z)$ en utilisant la fonction $f_n(z)$ donnée par la première forme choisie de la queue de bande de conduction. Le principe du calcul est identique pour $\delta n(z)$ avec $\hat{f}_n(z)$ et pour $\delta p(z)$ avec $f_p(z)$.

3.3.2 Etude de la fonction $\delta n(z)$

La fonction $\delta n(z)$ de la variable complexe z est holomorphe dans un domaine \mathfrak{D} du plan complexe \mathcal{C} . La fonction $f_n(z)$ (voir équation (3.31)) introduit, par l'intermédiaire du logarithme, deux points de branchement $-N_c b$ et $-2nb$. On choisit la détermination principale pour l'argument du logarithme complexe afin d'assurer la continuité de la fonction. On génère ainsi une coupure entre $-N_c b$ et $-2nb$ sur l'axe réel négatif.

$$\text{Log}(z) = \text{Log}|z| + i \text{Arg}(z) \quad \text{avec} \quad -\pi < \text{Arg}(z) < \pi \quad (3.58)$$

On définit pour des raisons de commodité de calcul la fonction $\Phi_n(z)$

$$\Phi_n(z) = z \left[z + z \text{Log} \frac{z + N_c b}{z + 2nb} + \lambda_n \right] \quad (3.59)$$

ainsi
$$\delta n(z) = \frac{\delta G}{\Phi_n(z)} \quad (3.60)$$

- $\Phi_n(z)$ s'annule en trois points:
- $z_0 = 0$
 - $z_1 > -2nb$ relativement proche de $-2nb$
 - $z_2 < -N_c b$ proche de $-N_c b$.

Ces trois points sont des pôles simples de $\delta n(z)$. L'allure de $\Phi_n(z)$ pour z réel est la suivante:

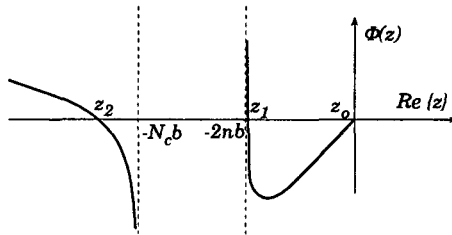


Figure 3.4 allure de la fonction $\Phi_n(\text{Re}(z))$.

Ainsi le domaine \mathfrak{D} où $\delta n(z)$ est holomorphe est donné par le plan complexe \mathcal{C} privé des trois points singuliers (pôles) z_0 , z_1 et z_2 et de l'intervalle $[-N_c b, -2nb]$ sur l'axe réel négatif:

$$\delta n(z) \in H(\mathfrak{D}) \text{ où } \mathfrak{D} \in \mathcal{C} \text{ et } \mathfrak{D} = \mathcal{C} - [-N_c b, -2nb] - \{z_0, z_1, z_2\}$$

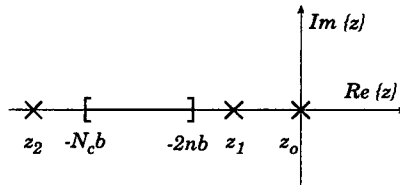


Figure 3.5 illustration des pôles et de la coupure de $\delta n(z)$ dans le plan complexe.

3.3.3 Transformation de Laplace inverse

La formule d'inversion de la transformation de Laplace est donnée par l'intégrale sur une droite verticale dans le plan complexe (chemin de Bromwich) [49, 55]

$$f(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{a-i\infty}^{a+i\infty} dz e^{zt} \tilde{f}(z) \quad (3.61)$$

$a \in \mathbb{R} > 0$ étant à droite de toutes les singularités de $\tilde{f}(z)$, c'est-à-dire où $\tilde{f}(z)$ existe continûment.

Pour évaluer $f(t)$ autrement que par intégration directe sur le chemin de Bromwich, nous allons utiliser le théorème intégral de Cauchy. Pour cela, il faut modifier de façon appropriée le chemin d'intégration. On va considérer la fonction $\tilde{f}(z)$ pour des z en dehors de son domaine de convergence, c'est-à-dire pour $\text{Re}(z) < a$. Dans notre cas, on choisit un contour fermé $\Gamma = \Gamma_o + \Gamma_R - \Gamma_C$ qui définit un domaine **ne contenant pas** la coupure (voir figure 3.6).

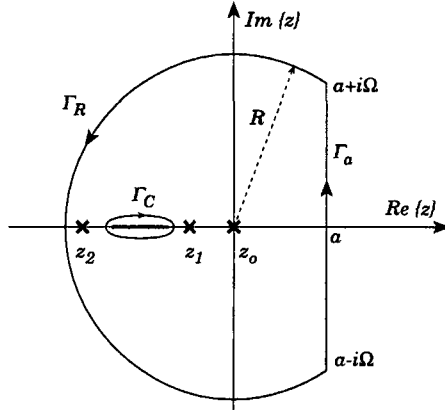


Figure 3.6: chemin d'intégration dans le plan complexe.

Le théorème des résidus nous dit que

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} dz \bar{f}(z) = \sum_{\{z_n\}} \operatorname{Res}\{\bar{f}(z)\} \quad (3.62)$$

Dans notre cas, on a l'expression

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} dz e^{zt} \delta n(z) = \sum_{\{z_n\}} \operatorname{Res}\{e^{zt} \delta n(z)\} \quad (3.63)$$

Pour les différentes portions de chemin, cela donne

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{a-i\Omega}^{a+i\Omega} dz e^{zt} \delta n(z) + \frac{1}{2\pi i} \int_{|z|=R} dz e^{zt} \delta n(z) - \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma_C} dz e^{zt} \delta n(z) = \sum_{\{z_n\}} \operatorname{Res}\{e^{zt} \delta n(z)\} \quad (3.64)$$

La première intégrale va nous donner la transformation de Laplace inverse recherchée

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{a-i\Omega}^{a+i\Omega} dz e^{zt} \delta n(z) \xrightarrow{\Omega \rightarrow \infty} \delta n(t) \quad (3.65)$$

Comme $z e^{zt} \delta n(z) \xrightarrow{|z| \rightarrow \infty} 0$, par le lemme de Jordan [56], on a que

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{|z|=R} dz e^{zt} \delta n(z) \xrightarrow{R \rightarrow \infty} 0 \quad (3.66)$$

La transformation de Laplace inverse $\delta n(t)$ est donnée par la somme des résidus des pôles de $\delta n(z)$ et de l'intégrale autour de la coupure Γ_C

$$\delta n(t) = \sum_{\{z_k\}} \operatorname{Res} \left\{ e^{zt} \delta n(z) \right\} + \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma_C} dz e^{zt} \delta n(z) \quad (3.67)$$

3.3.4 Calcul des résidus

Utilisant les propriétés du calcul des résidus, on obtient que

$$\sum_{\{z_k\}} \operatorname{Res} \left\{ e^{zt} \delta n(z) \right\} = \sum_{\{z_k\}} \frac{\delta G}{\Phi'_n(z_k)} e^{z_k t} \quad (3.68)$$

Le résidu du pôle en $z_0 = 0$ peut être calculé analytiquement

$$\operatorname{Res}_{z=z_0} \left\{ e^{zt} \delta n(z) \right\} = \frac{\delta G}{\lambda_n} \quad (3.69)$$

Il correspond à la réponse asymptotique de $\delta n(t)$; c'est la différence entre l'ancien état stationnaire et le nouveau. En effet, on voit que

$$\delta G = \frac{\delta n(t \rightarrow \infty)}{r_n^R} \quad (3.70)$$

Le pôle en z_2 , $z_2 < -N_c b$, correspond à un temps caractéristique très petit. En effet, z_2 est de l'ordre de grandeur de la fréquence d'échappement (attempt-to-escape frequency) $\nu = N_c b \sim 10^{12} \text{ s}^{-1}$. Ce temps est beaucoup plus rapide que le domaine temporel de mesures. De plus, un calcul approximatif montre que le résidu de ce pôle est extrêmement petit. On peut donc le négliger.

$$\operatorname{Res}_{z=z_2} \left\{ e^{zt} \delta n(z) \right\} \longrightarrow 0 \quad (3.71)$$

Le pôle en z_1 , $z_1 \in]-2nb, 0[$ dépend très fortement du rapport $\lambda_n/2nb$. Il peut se trouver infiniment proche de $-2nb$ et son résidu est quasiment nul ou bien, être assez éloigné de $-2nb$. Dans le dernier cas, le résidu du pôle peut être plus important que la contribution de la coupure. Par contre, il ne dépend pratiquement pas de $N_c b$. Son estimation est faite numériquement. On a représenté à la figure 3.7 la fonction $\Phi_n(z)$ pour différentes valeurs du rapport $\lambda_n/2nb$. Le résidu du pôle z_1 correspond à la pente de la fonction $\Phi_n(z)$ en z_1 ; elle est négative.

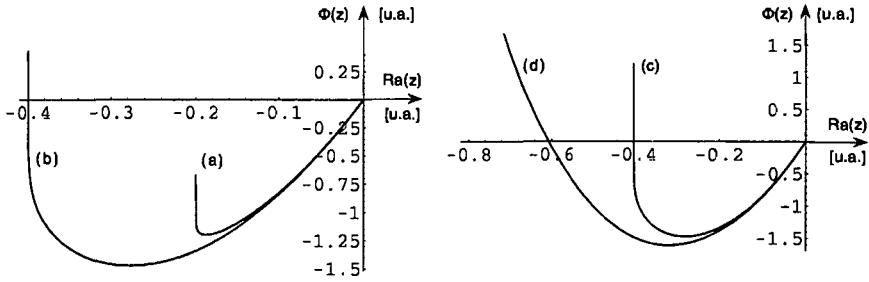


Figure 3.7: allure de $\Phi_n(z)$ pour un rapport $\lambda_n/2nb$ de: (a) 100, (b) 50 pour la figure de gauche et (c) 50, (d) 25 pour celle de droite.

3.3.5 Intégration de la coupure

L'intégrale autour de la coupure, notée $\delta n_c(t)$

$$\delta n_c(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma_c} dz e^{zt} \delta n(z) \quad (3.72)$$

est évaluée pour z juste en dessus et en dessous de la coupure sachant que la coupure produit un saut de phase de 2π dans le logarithme complexe. On pose donc

$$z = x \pm i\varepsilon, \text{ avec } x, \varepsilon \in \Re \text{ et } \varepsilon \text{ petit} \quad (3.73)$$

et on évalue

$$\delta n_c(t) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\delta G}{2\pi i} \int_{-N, b}^{-2nb} dx e^{xt} \left[\frac{1}{\Phi_n(x - i\varepsilon)} - \frac{1}{\Phi_n(x + i\varepsilon)} \right] \quad (3.74)$$

Le résultat est

$$\delta n_c(t) = -\delta G \int_{-N, b}^{-2nb} dx \frac{e^{xt}}{[x + x L_n(x) + \lambda_n]^2 + [\pi x]^2} \quad (3.75)$$

avec

$$L_n(x) = \text{Log} \left| \frac{x + N_c b}{x + 2nb} \right| \quad (3.76)$$

Finalement, on trouve l'expression de la variation de la densité d'électrons libres due à un petit saut de l'illumination

$$\delta n(t) = \frac{\delta G}{\lambda_n} + \frac{\delta G}{\Phi'_n(z_1)} e^{z_1 t} + \delta n_c(t) \quad (3.77)$$

Pour la deuxième forme de la queue de bande de conduction, l'intégration de la coupure prend la forme

$$\delta \hat{n}_c(t) = -\delta G \int_{-N_c b}^{-2nb} dx \frac{e^{x \left[1 - \frac{N_m b}{\beta} \frac{1}{x+nb} \right]}}{\left[x + x \hat{L}_n(x) + \lambda_n \right]^2 + \left[\pi x \left[1 - \frac{N_m b}{\beta} \frac{1}{x+nb} \right] \right]^2} \quad (3.78)$$

avec

$$\hat{L}_n(x) = \text{Log} \left| \frac{x + N_c b}{x + 2nb} \right| + \frac{x}{x + nb} \frac{N_m b}{\beta} \left[\text{Log} \frac{N_c}{n} - \text{Log} \left| \frac{x + N_c b}{x + 2nb} \right| \right] \quad (3.79)$$

Un calcul identique pour la queue de bande de valence donne une expression similaire.

$$\delta p(t) = \frac{\delta G}{\lambda_p} + \frac{\delta G}{\Phi'_p(z_1)} e^{z_1 t} + \delta p_c(t) \quad (3.80)$$

L'intégrale autour de la coupure prend cette fois-ci la forme

$$\delta p_c(t) = -\delta G \int_{-N_c b}^{-2pb} dx \frac{\sqrt{\frac{N_c b}{|x+pb|}} e^{x \left[\frac{N_c b}{|x+pb|} \right]}}{\left[x + x \sqrt{\frac{N_c b}{|x+pb|}} L_p(x) + \lambda_p \right]^2 + \sqrt{\frac{N_c b}{|x+pb|}} [\pi x]^2} \quad (3.81)$$

avec

$$L_p(x) = \text{Log} \left| \frac{x + N_c b}{x + 2pb} \frac{x - 2\sqrt{pb|x+pb|}}{x - N_c b - 2\sqrt{N_c b|x+pb|}} \right| \quad (3.82)$$

3.4 Cas du a-Si:H dopé de type <n>

3.4.1 Simplification de la matrice $A_n(z)$

Par adjonction volontaire d'atomes dopants donneurs d'électrons, on accroît de manière substantielle la photoconductivité. Le nombre d'électrons libres et, par conséquent, le paramètre B (équation (3.44)) augmentent considérablement. Les mesures de B effectuées sur des couches micro-dopées (0.2 – 1 ppm PH_3) recuites fabriquées à l'institut, nous ont permis d'estimer ce paramètre autour de

$$B \sim 10^4 \quad (3.83)$$

Le rapport n/p est estimé, supposant un rapport de mobilités d'environ 3,

$$\frac{n}{p} \sim 10^3 \quad (3.84)$$

La photoconductivité est donc presque entièrement due aux électrons libres

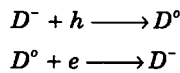
$$\delta\sigma(t) \propto \delta n(t) \quad (3.85)$$

On se bornera donc à ne calculer que $\delta n(t)$.

En regardant les fonctions d'occupation des liaisons pendantes à la figure 3.2 pour un rapport $n/p \sim 10^3$, on s'aperçoit que l'occupation des liaisons pendantes chargées positivement est très petite

$$f^+ < 10^{-4} \quad (3.86)$$

Cela nous amène tout naturellement à les négliger. Il n'y a alors qu'un seul chemin de recombinaison des porteurs libres vers les liaisons pendantes.



Pour cette raison, on choisit les variables des liaisons pendantes suivantes:

$$\delta N^- \text{ et } \delta N^0 \quad (3.87)$$

De plus, on voit que pour $n/p \sim 10^3$

$$N^- > N^0 \quad (3.88)$$

et supposant que $\sigma_p^- / \sigma_p^0 \gg 1$, alors

$$\lambda_p = \rho_p^- \quad (3.89)$$

$$\lambda_n = \rho_n^0 \quad (3.90)$$

Le système à résoudre (3.14) devient dans le cas dopé $\langle n \rangle$:

$$z \begin{pmatrix} \delta n(z) \\ \delta p(z) \\ \delta N^-(z) \\ \delta N^o(z) \end{pmatrix} = A_n(z) \begin{pmatrix} \delta n(z) \\ \delta p(z) \\ \delta N^-(z) \\ \delta N^o(z) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{\delta G}{z} \\ \frac{\delta G}{z} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.91)$$

avec

$$A_n(z) = \begin{pmatrix} -f_n(z) - \lambda_n & 0 & 0 & -\omega_n^o \\ 0 & -f_p(z) - \lambda_p & -\omega_p^- & -\omega_p^o \\ \lambda_n & -\lambda_p & -\omega_p^- & \omega_n^o \\ -\lambda_n & \lambda_p & \omega_p^- & -\omega_n^o \end{pmatrix} \quad (3.92)$$

Au niveau des fréquences caractéristiques intervenant dans la matrice $A_n(z)$ du système, on note que

$$\frac{\omega_n^o}{\omega_p^o} = \frac{n}{p} \gg 1 \quad (3.93)$$

Et

$$\frac{\omega_n^o}{\omega_p^-} = \frac{\sigma_n^o}{\sigma_p^-} \frac{n}{p} > 1 \quad (3.94)$$

On a donc la hiérarchie de fréquences suivante

$$\omega_n^o > \omega_p^- > \omega_p^o \quad (3.95)$$

On fait l'hypothèse

$$\omega_p^o \text{ et } \omega_p^- \text{ négligeables devant } \omega_n^o .$$

Notons que la deuxième condition est la plus difficile à remplir. Il faut, en effet par (3.94), que

$$\frac{n}{p} > \frac{\sigma_p^-}{\sigma_n^o} \quad (3.96)$$

Remarquons que cette condition peut ne pas être satisfaite lorsque l'échantillon se dégrade et que le rapport n/p diminue.

Par contre, si elle est remplie, alors la matrice prend la forme simplifiée

$$\mathbf{A}_n(z) = \begin{pmatrix} -f_n(z) - \lambda_n & 0 & 0 & -\omega_n^o \\ 0 & -f_p(z) - \lambda_p & 0 & 0 \\ \lambda_n & -\lambda_p & 0 & \omega_n^o \\ -\lambda_n & \lambda_p & 0 & -\omega_n^o \end{pmatrix} \quad (3.97)$$

On voit apparaître cette fois-ci un couplage entre électrons et trous par l'intermédiaire des liaisons pendantes symbolisé par le terme ω_n^o (1^{ère} ligne, 4^{ème} colonne). Ceci nécessite une résolution un peu différente de celle faite pour le cas non-dopé.

3.4.2 Transformation de Laplace inverse

En regardant la réponse transitoire mesurée sur des échantillons dopés n (voir mesures), on constate que les temps de réponse sont de l'ordre de grandeur de $10^{-4} - 10^{-3}$ s. Ils sont nettement plus longs que dans le cas non-dopé. Ceci va nous permettre de simplifier la fonction $f_n(z)$ de la queue de bande de conduction. Pour les intensités choisies, la densité d'électrons libres est évaluée à partir des mesures de photoconductivité stationnaire à

$$n \approx 10^{13} - 10^{14} \text{ cm}^{-3} \quad (3.98)$$

On sait que le coefficient de capture des pièges de la queue de bande est de l'ordre de grandeur $b \approx 10^{-8} \text{ cm}^3/\text{s}$ [43]. On estime ainsi que

$$2nb \approx 10^5 - 10^6 \text{ s}^{-1} \quad (3.99)$$

Sachant que les phénomènes expérimentaux (voir mesures) ont lieu autour de $10^{-4} - 10^{-3}$ s correspondant à la plage en fréquence de z de $10^3 - 10^4 \text{ s}^{-1}$, on peut donc admettre que, pendant le temps de la mesure

$$|z| \ll |2nb| \quad (3.100)$$

Alors, la fonction $f_n(z)$ de la queue de bande de conduction peut se simplifier

$$f_n(z) = z \text{Log} \frac{z + N_c b}{z + 2nb} = z \text{Log} \frac{N_c}{2n} = z \alpha \quad (3.101)$$

$$\text{avec} \quad \alpha \sim 13 - 14 \quad (3.102)$$

Pour la fonction $f_p(z)$ de la queue de bande de valence, on garde l'expression dérivée en (3.39) et (3.40). On arrive, par (3.16) à trouver une expression de la variation de densité d'électrons libres

$$\delta n(z) = \frac{\delta G}{z^2} \frac{1}{a} \left[\frac{z + \omega_n^o}{z + d} - \frac{\lambda_p \omega_n^o}{(z + f_p(z) + \lambda_p)(z + d)} \right] \quad (3.103)$$

avec
$$d = \omega_n^o + \frac{\lambda_n}{a} \quad (3.104)$$

et
$$a = 1 + \alpha \quad (3.105)$$

Grâce aux propriétés de la transformation de Laplace, on peut déterminer directement la transformée de Laplace inverse $\delta n_1(t)$ du premier terme

$$\delta n_1(z) = \frac{\delta G}{z^2} \frac{1}{a} \frac{z + \omega_n^o}{z + d} \quad (3.106)$$

qui est
$$\delta n_1(t) = \delta G \left[\frac{\lambda_n}{(ad)^2} + \frac{\omega_n^o}{ad} t - \frac{\lambda_n}{(ad)^2} e^{-at} \right] \quad (3.107)$$

Pour le deuxième terme $\delta n_2(z)$, le calcul est un petit peu plus compliqué. Il nécessite une intégration sur un contour dans le plan complexe de l'expression

$$\delta n_2(z) = - \frac{\lambda_p \omega_n^o \delta G}{a z^2} \frac{1}{(z + f_p(z) + \lambda_p)} \frac{1}{(z + d)} \quad (3.108)$$

On sait, après avoir analysé le cas non-dopé, que cette fonction a:

- un pôle double en $z_0 = 0$,
- un pôle simple en $z_1 > -2pb$ proche de $-2pb$,
- un pôle simple en $z_2 < -N_c b$ proche de $-N_c b$,
- une coupure entre $-N_c b$ et $-2pb$
- un pôle simple en $z_3 = -d$.

Ce dernier pôle se trouve sur la coupure. En effet, on estime que si $n/p \sim 10^3$,

$$p \approx 10^{10} - 10^{11} \text{ cm}^{-3} \quad (3.109)$$

alors
$$2pb \approx 10^2 - 10^3 \text{ s}^{-1} \quad (3.110)$$

et, on admet communément
$$N_c b = v \approx 10^{12} \text{ s}^{-1} \quad (3.111)$$

On connaît approximativement l'ordre de grandeur [6,32] de

$$v_{th} \sigma_n^o \approx 10^{-8} - 10^{-9} \text{ cm}^3/\text{s} \quad (3.112)$$

alors
$$d = \omega_n^o + \frac{\lambda_n}{a} \approx 10^4 - 10^5 \text{ s}^{-1} \quad (3.113)$$

ainsi
$$-d \in [-N_c b, -2pb] \quad (3.114)$$

On choisit le même contour d'intégration illustré à la figure 3.6 qui nous permet d'évaluer la transformée inverse $\delta n_2(t)$

$$\delta n_2(t) = \sum_{\{z_k\}} \text{Res} \left\{ e^{zt} \delta n_2(z) \right\} + \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma_c} dz e^{zt} \delta n_2(z) \quad (3.115)$$

Le résidu du pôle double en $z_0 = 0$ est calculé analytiquement en utilisant l'expression de $f_p(z)$ donnée pour $z + pb > 0$ (voir équation 3.39). On obtient

$$\text{Res}_{z=z_0} \left\{ e^{zt} \delta n_2(z) \right\} = \frac{a \omega_n^o}{\lambda_p (ad)^2} \delta G \left[\lambda_p + d \left(1 + \frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{N_c}{p}} \right) \right] - \frac{\omega_n^o}{ad} \delta G t \quad (3.116)$$

Le résidu du pôle en $z_2, z_2 < -N_c b$ est, de même qu'en (3.71), extrêmement petit et peut être négligé.

$$\text{Res}_{z=z_2} \left\{ e^{zt} \delta n_2(z) \right\} \longrightarrow 0 \quad (3.117)$$

Le résidu du pôle en $z_1, z_1 \in]-2pb, 0[$ dépend du rapport $\lambda_p/2pb$ et doit être calculé numériquement. On verra au travers d'exemples numériques quel est sa contribution. On peut l'écrire, sachant (3.68),

$$\text{Res}_{z=z_1} \left\{ e^{zt} \delta n_2(z) \right\} = -\frac{\lambda_p \omega_n^o}{a} \frac{\delta G}{\Psi'(z_1)} \frac{1}{z_1 + d} e^{z_1 t} = -C_1 e^{z_1 t} \quad (3.118)$$

avec
$$\Psi(z) = z^2 (z + f_p(z) + \lambda_p) \quad (3.119)$$

et
$$C_1 = \frac{\lambda_p \omega_n^o}{a} \frac{\delta G}{\Psi'(z_1)} \frac{1}{z_1 + d} \quad (3.120)$$

Le pôle en $z_3 = -d$ se trouve quant à lui entre $-N_c b$ et $-2pb$. On va devoir l'englober lors de l'intégration autour de la coupure

$$\delta n_c(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma_c} dz e^{zt} \delta n_2(z) \quad (3.121)$$

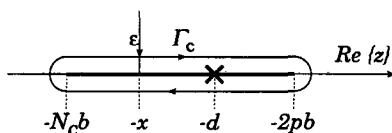


Figure 3.8: Chemin d'intégration autour de la coupure et du pôle en $z_3 = -d$.

A nouveau, on évalue $\delta n_c(t)$ pour z juste en dessus et en dessous de la coupure. On pose

$$z = x \pm i\varepsilon, \text{ avec } x, \varepsilon \in \mathbb{R} \text{ et } \varepsilon \rightarrow 0.$$

On sait que l'on peut écrire formellement, pour tenir compte du pôle en $z_3 = -d$,

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{x + d \pm i\varepsilon} = vp \frac{1}{x + d} \mp i\pi \delta(x + d) \quad (3.122)$$

où vp signifie valeur principale. La fonction delta permet de capturer la contribution du pôle en $-d$. Alors, $\delta n_2(x \pm i\varepsilon)$ s'écrit, proche de la coupure,

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \delta n_2(x \pm i\varepsilon) = -\frac{\lambda_p \omega_n^o}{a} \left[vp \frac{1}{x + d} \mp i\pi \delta(x + d) \right] \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\delta G}{\Psi(x \pm i\varepsilon)} \quad (3.123)$$

Avec ce qui précède, on trouve une expression de l'intégrale $\delta n_c(t)$. Elle est composée d'un terme exponentiel décroissant avec une fréquence caractéristique d qui provient du pôle en $z_3 = -d$ et d'un terme intégral $\delta I_c(t)$ qui provient, lui, **uniquement** de la coupure

$$\delta n_c(t) = -D_3 e^{-dt} + \delta I_c(t) \quad (3.124)$$

où D_3 est une constante indépendante du temps.

On peut donc maintenant regrouper tous les termes que l'on vient de calculer et exprimer, sachant que

$$\delta n(t) = \delta n_1(t) + \delta n_2(t), \quad (3.125)$$

la variation de la densité d'électrons libres

$$\delta n(t) = C_0 - C_1 e^{z_1 t} - C_3 e^{-dt} + \delta I_c(t) \quad (3.126)$$

avec C_0, C_1, C_3 : constantes indépendantes du temps.

Les calculs et les expressions des différents termes et constantes intervenants ici sont reportés en Annexe A.

Chapitre 4

Evaluation numérique des densités de porteurs

Au cours du chapitre précédent, nous avons dérivé des expressions évaluables analytiquement pour les variations de densité des porteurs libres $\delta n(t)$ et $\delta p(t)$. Nous allons maintenant étudier ces expressions pour des valeurs typiques des paramètres rencontrés dans le a-Si:H non dopé et dopé du type <n> et, en particulier, contrôler l'intégration numérique de la fonction induite par la coupure.

4.1 Cas non dopé recuit

4.1.1 Estimation des différents paramètres

(a) densité d'états effective au seuil de mobilité

En parcourant la littérature, on s'aperçoit que différentes mesures ont été utilisées pour déterminer la densité d'états au seuil de mobilité. On estime généralement [20,57] qu'au bord de la bande de conduction (le résultat est approximativement le même pour la bande de valence) la densité d'états vaut

$$N_o \approx 2 - 8 \cdot 10^{21} \text{ cm}^{-3} eV^{-1} \quad (4.1)$$

Nous avons choisi

$$N_o = 4 \cdot 10^{21} \text{ cm}^{-3} eV^{-1} \quad (4.2)$$

qui donne, par la relation (3.25), une densité d'états effective de

$$N_C = 1 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3} \quad (4.3)$$

(b) coefficient de capture des pièges des queues de bande

Ce paramètre est malheureusement très mal connu. Par exemple, Schiff [43] a pris comme valeur

$$b = 10^{-8} \text{ cm}^3/\text{s} \quad (4.4)$$

La plupart des auteurs se réfèrent couramment à une autre grandeur, la fréquence d'échappement ν , reliée à b par

$$\nu = N_c b \quad (4.5)$$

Le plus souvent, elle est choisie à $\nu \approx 10^{12} \text{ s}^{-1}$; mais on trouve dans la littérature une fourchette assez grande de valeurs utilisées ou dérivées expérimentalement [6,31,41].

$$\nu \approx 10^{11} - 10^{13} \text{ s}^{-1} \quad (4.6)$$

La valeur maximale correspond approximativement à la fréquence phononique dans le a-Si:H. Nous avons choisi, quant à nous (voir chapitre mesures)

$$b = 0.6 \cdot 10^{-8} \text{ cm}^3/\text{s} \quad (4.7)$$

qui correspond à une fréquence d'échappement de

$$\nu = 0.6 \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1} \quad (4.8)$$

(c) densité d'électrons libres

La densité d'électrons libres est estimée par des mesures de photoconductivité stationnaire. Si on admet une mobilité des électrons libres de l'ordre de $\mu_n^0 \approx 2 - 10 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ et pour une gamme d'illumination de $1 - 20 \text{ mW}/\text{cm}^2$, la densité d'électrons libres dans nos couches peut valoir

$$n \approx 10^{11} - 10^{13} \text{ cm}^{-3} \quad (4.9)$$

Insistons sur le fait que, d'après la condition (3.48), on ne devrait pas trop dépasser la valeur $n = 5 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ pour satisfaire les hypothèses de calcul.

(d) fréquence de recombinaison des électrons

On peut estimer grossièrement la fréquence de recombinaison des électrons à partir de la photoconductivité. La gamme de λ_n se situe aux alentours de

$$\lambda_n \approx 10^6 - 10^7 \text{ s}^{-1} \quad (4.10)$$

(e) distribution d'états constante

Il est assez délicat de donner une valeur du paramètre N_m . Néanmoins, à partir des mesures de la densité d'états sensibles aux états profonds [20,33], on peut l'estimer, pour un échantillon de bonne qualité, autour de

$$N_m \approx 10^{15} - 10^{16} \text{ cm}^{-3} eV^{-1} \quad (4.11)$$

(f) densité de trous libres

A partir des mesures de longueur de diffusion ambipolaire par SSPG [16], on estime, en supposant que la mobilité des trous libres vaut approximativement $\mu_p^0 \approx 1 \text{ cm}^2/Vs$, que

$$p \approx 10^{10} - 10^{11} \text{ cm}^{-3} \quad (4.12)$$

(g) fréquence de recombinaison des trous

De même, à partir des mesures de longueur de diffusion ambipolaire, on estime l'ordre de grandeur de la fréquence de recombinaison à

$$\lambda_p \approx 10^8 - 10^9 \text{ s}^{-1} \quad (4.13)$$

4.1.2 Variation de la densité d'électrons libres

L'expression de la variation de la densité d'électrons libres dérivée au chapitre précédent est donnée par (voir équation (3.77)):

$$\delta n(t) = \frac{\delta G}{\lambda_n} + \frac{\delta G}{\Phi'_n(z_1)} e^{z_1 t} + \delta n_C(t) \quad (4.14)$$

La contribution du pôle en z_1 est donnée par l'inverse de la pente de $\Phi_n(z)$ en ce point (zéro de $\Phi_n(z)$). Afin d'illustrer cette contribution à l'expression précédente, nous avons représenté, à la figure 4.1, la fonction $\Phi_n(z)$ entre $-2nb$ et 0 pour les valeurs des paramètres introduits précédemment en variant la densité d'électrons libres n et la fréquence de recombinaison λ_n .

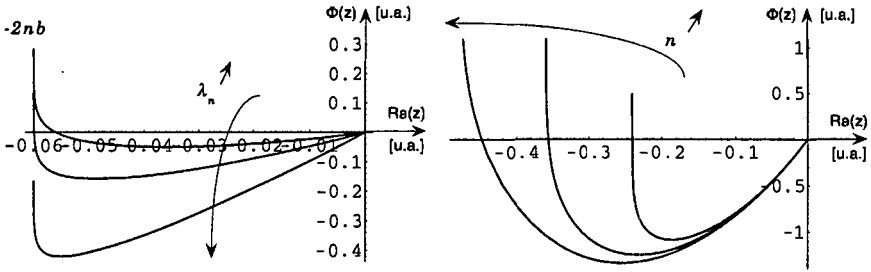


Figure 4.1: influence de la fréquence de recombinaison λ_n (figure de gauche) et de la densité d'électrons libres (figure de droite) sur la fonction $\Phi_n(z)$ pour $z \in]-2nb, 0]$.

Pour des valeurs des paramètres correspondant au a-Si:H non dopé recuit, on remarque aisément que cette contribution peut être complètement négligeable ou bien revêtir une certaine importance lorsque la densité d'électrons libres n augmente et lorsque λ_n diminue.

Nous avons visualisé la fonction $\zeta_n(x)$, définie comme l'intégrant de la fonction correspondant à l'effet de la coupure, pour deux jeux de paramètres.

$$\delta n_c(t) = \delta G \int_{-N_c b}^{-2nb} dx \zeta_n(x) \tag{4.15}$$

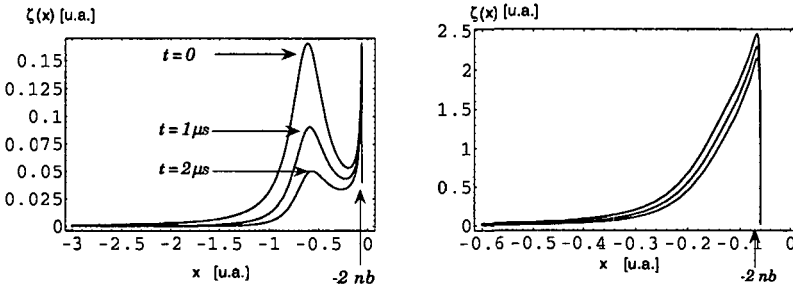


Figure 4.2: allure de l'intégrant $\zeta_n(x)$ pour deux jeux de paramètres et en fonction du temps. A gauche, la contribution du pôle est négligeable ($\lambda_n = 1 \cdot 10^7 \text{ s}^{-1}$; $n = 5 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3}$) ; à droite, elle ne l'est pas ($\lambda_n = 1 \cdot 10^6 \text{ s}^{-1}$; $n = 1 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$).

Cette fonction $\zeta_n(x)$ ne montre pas de comportement pathologique; elle est régulière et donc numériquement intégrable.

Nous avons représenté à la figure 4.3 l'évaluation numérique de la variation de la densité d'électrons libres en variant les valeurs des paramètres un à un. Un facteur deux dans la valeur du paramètre différencie chaque courbe sauf pour N_c ou le facteur est de dix. Le jeu standard de valeurs à partir duquel on augmente ou diminue chaque paramètre est le suivant:

$$b = 6 \cdot 10^{-9} \text{ cm}^3/\text{s} \quad N_c = 1 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3} \quad N_m = 2 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3} eV^{-1} \quad (4.16)$$

$$n = 5 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3} \quad \lambda_n = 1 \cdot 10^7 \text{ s}^{-1} \quad (4.17)$$

Toutes les courbes ont été calculées pour une densité d'états correspondante à une fonction exponentielle à laquelle on ajoute une constante N_m (voir §3.2.1) et pour une diminution du taux de génération ($\delta G < 0$). Sur nos graphiques (représentation logarithmique), toutes les courbes varient de 1 à 0; c'est à dire que l'on a représenté la fonction:

$$\frac{\delta n(t)}{|\delta n(\infty)|} + 1 \quad (4.18)$$

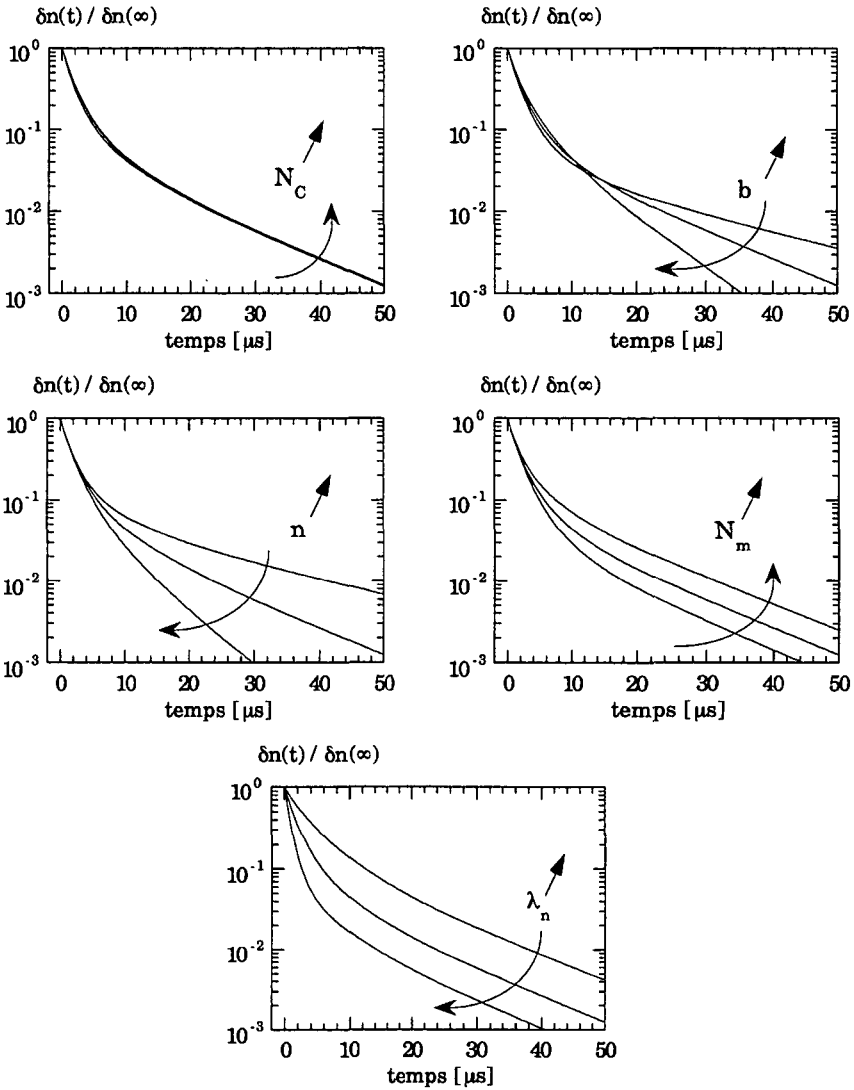


Figure 4.3: illustrations de l'influence des paramètres sur la variation de la densité d'électrons libres en fonction du temps. D'une courbe à l'autre, chaque paramètre varie d'un facteur deux sauf pour N_c où un facteur dix a été utilisé (sans que l'on voit pour autant un changement).

De plus, nous avons illustré à la figure 4.4 l'influence de l'addition de la densité constante N_m au modèle pour un jeu de fréquence de recombinaison λ_n .

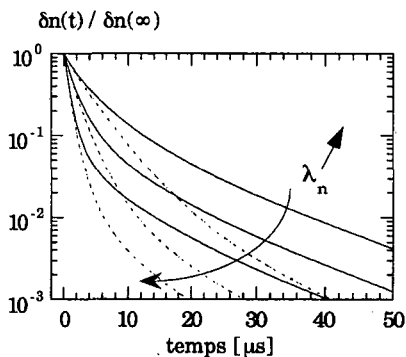


Figure 4.4: illustration de l'effet de l'adjonction d'une densité d'états profonds constante N_m pour trois fréquences de recombinaison différentes ($\lambda_n = 0.5 \cdot 10^7 - 1 \cdot 10^7 - 2 \cdot 10^7 \text{ s}^{-1}$). Les courbes en trait discontinu correspondent au cas où $N_m = 0$ et en trait plein à $N_m = 2 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$.

Quelques constatations s'imposent:

- (1) la densité effective N_c n'influence pas la réponse transitoire des électrons libres;
- (2) La valeur de la densité d'électrons libres n influence la réponse transitoire pour les derniers 10%;
- (3) N_m et b influencent assez fortement la réponse transitoire; néanmoins, la décroissance initiale n'est presque pas touchée; remarquons que si le paramètre b varie de plus d'un facteur dix, alors la décroissance initiale est sensiblement modifiée;
- (4) la fréquence de recombinaison λ_n influence très **fortement** la réponse transitoire, particulièrement la décroissance initiale.

On remarque donc, à travers ces exemples, que la décroissance initiale fournit principalement une indication sur le temps de recombinaison des porteurs libres, et ce malgré qu'elle soit rapidement influencée par d'autres paramètres tels que N_m et b .

4.1.3 Variation de la densité de trous libres

L'expression de la variation de la densité de trous libres se présente sous la même forme que celle des électrons libres (voir équation (3.80)). Une étude similaire montre les résultats qui vont suivre.

Tout d'abord, en regardant la fonction $\Phi_p(z)$, on constate que la contribution du pôle en z_1 est nettement plus importante que précédemment. Elle est en tout cas toujours présente.

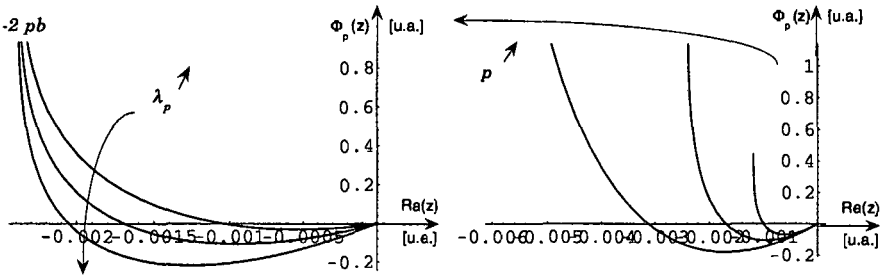


Figure 4.5: influence de la fréquence de recombinaison (figure de gauche) et de la densité de trous libres (figure de droite) sur $\Phi_p(z)$ pour $z \in]-2pb, 0]$.

L'intégrant $\zeta_p(x)$ correspondant à la contribution de la coupure est représenté à la figure 4.6. On constate à nouveau que cette fonction ne présente pas de comportement pathologique et peut être intégrée numériquement.

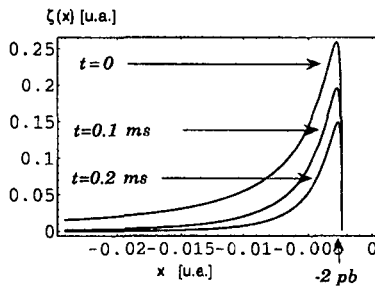


Figure 4.6: allure de l'intégrant $\zeta_p(x)$ à différents temps.

Aux figures suivantes, on a illustré l'influence des différents paramètres sur la variation de la densité de trous libres. Le jeu standard de valeurs à partir duquel on augmente ou on diminue chaque paramètre est le suivant:

$$b = 6 \cdot 10^{-9} \text{ cm}^3/\text{s} \quad N_c = 1 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3} \quad (4.19)$$

$$p = 5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-3} \quad \lambda_p = 1 \cdot 10^8 \text{ s}^{-1} \quad (4.20)$$

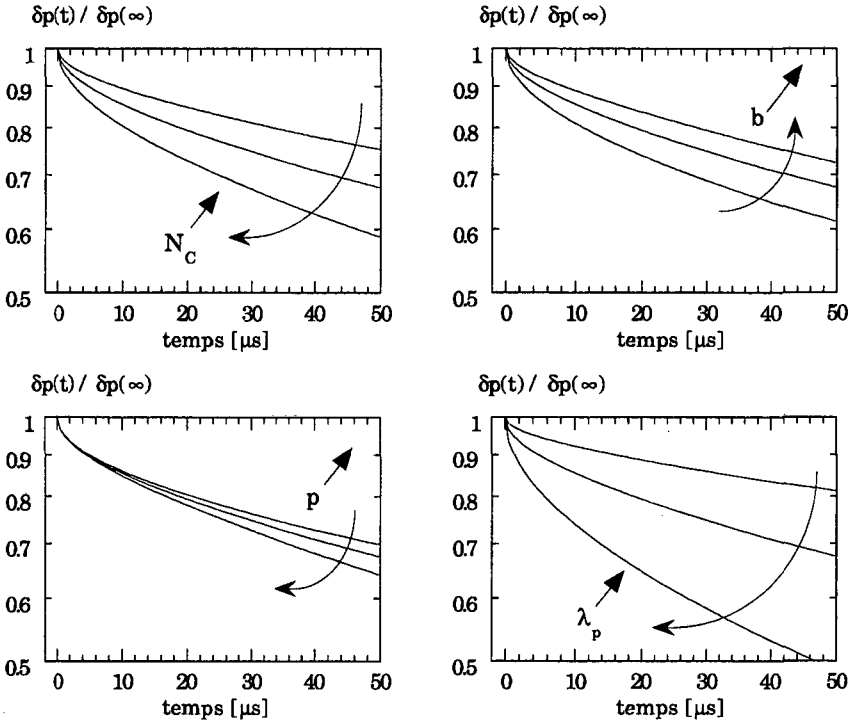


Figure 4.7: dépendance aux différents paramètres de la variation de la densité de trous libres en fonction du temps. Chaque paramètre varie d'un facteur deux d'une courbe à l'autre.

On constate par ces exemples que, malheureusement, la variation de la densité de trous libres est influencée fortement par tous les paramètres. Le plus influent est la fréquence de recombinaison et le moins important la densité de trous libres.

Nous avons aussi illustré l'influence de la pente de la queue de bande exponentielle au travers du paramètre α en représentant, pour les *mêmes*

valeurs des paramètres correspondant aux électrons, la variation de la densité de porteurs avec $\alpha_n = 1$ et $\alpha_n = 1/2$.

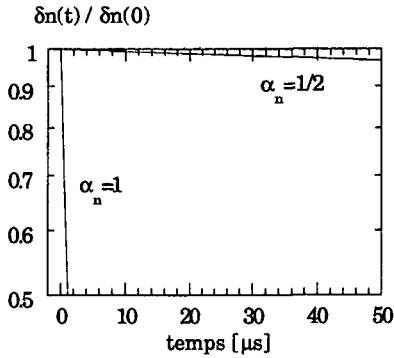


Figure 4.8: Illustration de l'influence de la pente de la queue de bande de conduction exponentielle pour les deux valeurs de α_n sur la variation de la densité d'électrons libres.

Cet exemple illustre bien la grande influence de la forme choisie de la densité d'états de la queue de bande sur la réponse transitoire.

4.1.4 Variation de la photoconductivité

Dans le a-Si:H non dopé recuit, on admet que la photoconductivité est principalement due aux électrons. Toutefois, nous avons évalué expérimentalement le paramètre B (voir équation (3.44)) autour de 20-30 pour des échantillons légèrement dégradés. Il est possible alors, lorsqu'on mesure la photoconductivité transitoire d'apercevoir la variation de la densité de trous libres. C'est pourquoi nous avons illustré à la figure suivante cette contribution pour deux intensités lumineuses différentes.

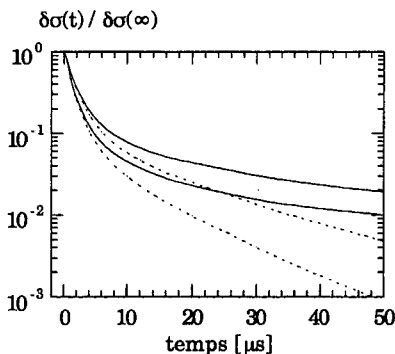


Figure 4.9: illustration de l'effet de la variation de la densité de trous libres sur la réponse transitoire pour deux intensités qui diffèrent d'un facteur deux. Les courbes en trait discontinu correspondent à la variation de la densité d'électrons libres et celles en trait plein à la somme des deux variations de densité (électrons et trous). La proportion des trous est B fois plus petite que celle des électrons ($B < 50$).

Les valeurs des paramètres sont calculées à partir de leur dépendance respective à l'intensité lumineuse [16]. On voit bien qu'il est nécessaire d'englober l'effet des trous pour décrire la photoconductivité transitoire sur des échantillons ayant un B petit lorsqu'on observe le signal à des temps suffisamment longs.

4.2 Cas dopé type <n>

Par les mêmes mesures expérimentales citées précédemment, on estime approximativement les paramètres à introduire dans les calculs. Pour nos couches légèrement dopées <n> (de l'ordre du ppm), on observe expérimentalement une augmentation de la photoconductivité. La densité d'électrons libres est évaluée dans ce cas autour de

$$n \approx 10^{13} - 10^{14} \text{ cm}^{-3} \quad (4.21)$$

selon le taux d'illumination et la qualité de l'échantillon. La fréquence de recombinaison est estimée dans une gamme de ($G = n \lambda_n$)

$$\lambda_n \approx 10^5 - 10^6 \text{ s}^{-1} \quad (4.22)$$

On évalue la densité de trous libres à

$$p \approx 10^{10} - 10^{11} \text{ cm}^{-3} \quad (4.23)$$

ainsi que la fréquence de recombinaison des trous

$$\lambda_p \approx 10^8 - 10^9 \text{ s}^{-1} \quad (4.24)$$

Le coefficient a a été estimé à (voir équations (3.101) et (3.105))

$$a = \alpha + 1 = \text{Log} \frac{N_c}{n} + 1 \approx 14 - 15 \quad (4.25)$$

Nous avons opté pour $a = 15$. (4.26)

On admet une section efficace de capture des électrons sur les liaisons pendantes neutres de l'ordre de

$$\sigma_n^o \approx 10^{-16} \text{ cm}^2 \quad (4.27)$$

(ce qui correspond, par l'équation (3.8) et les estimations de λ_n , à une densité de liaisons pendantes neutres de $N^o \approx 10^{14} - 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ dans le cas dopé $\langle n \rangle$ et de $N^o \approx 10^{15} - 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ dans le cas non dopé; valeurs tout à fait raisonnables). Le paramètre ω_n^o est alors estimé à

$$\omega_n^o = v_{th} \sigma_n^o n \approx 10^4 - 10^5 \text{ s}^{-1} \quad (4.28)$$

4.2.1 Variation de la densité d'électrons libres

La variation de la densité d'électrons libres est donnée dans ce cas par (voir équation (3.126))

$$\delta n(t) = C_0 - C_1 e^{z_1 t} - C_3 e^{-dt} + \delta I_c(t) \quad (4.29)$$

La contribution du pôle supplémentaire en $-d$ est directement calculable (voir expression de C_3 en Annexe B). La deuxième contribution due au pôle en z_1 est de nouveau déterminée par la dérivée de la fonction $\Psi(z)$ en z_1 .

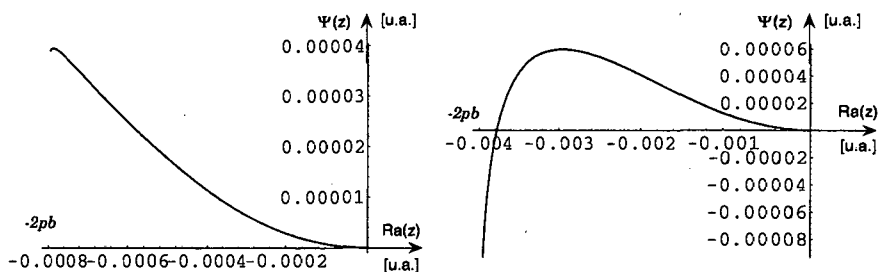


Figure 4.10: allure de la fonction $\Psi(z)$ pour deux jeux de paramètres différents.

A gauche, on voit l'allure de cette fonction pour à peu près toutes les valeurs admissibles des paramètres correspondant au cas dopé $\langle n \rangle$. On remarque donc que la contribution de ce pôle est pratiquement nulle. A droite, on a représenté un cas où ce pôle apporte une contribution non négligeable. Pour cela, il faut accroître la densité de trous libres et diminuer fortement la fréquence de recombinaison. Ces modifications ne semblent, toutefois, pas correspondre aux estimations des paramètres pour ce matériau. L'effet du pôle en z_1 est donc considéré comme négligeable.

L'intégrant $\zeta(x)$ de la fonction provenant de la coupure est visualisé à la figure suivante.

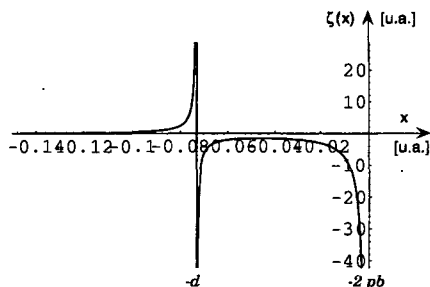


Figure 4.11: allure de l'intégrant $\zeta(x)$.

La grande différence par rapport aux cas précédents est l'apparition du pôle supplémentaire en $-d$ sur la coupure. Pour traiter numériquement ce cas, on procède comme suit: on intègre la fonction de $x = -N_c b$ jusqu'à $x = -d - \varepsilon$ et de $x = -d + \varepsilon$ à $x = -2pb$. ε est choisi suffisamment petit pour que les deux parties

d'intégrales non comprises à gauche et à droite de $x = -d$ se compensent. Le reste de l'intégration ne pose pas de problème (voir figure 4.12).

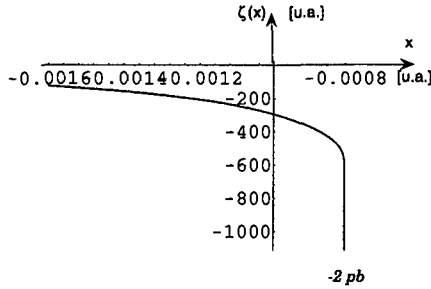


Figure 4.12: allure de l'intégrant $\zeta(x)$ avec un agrandissement pour des valeurs proche de $-2nb$.

A la figure suivante, nous montrons l'influence des divers paramètres sur la réponse transitoire calculée du cas dopé $\langle n \rangle$. Notons que dans ce cas, la photoconductivité transitoire est uniquement due aux électrons. Le jeu standard de valeurs à partir duquel on augmente ou on diminue chaque paramètre est le suivant:

$$b = 6 \cdot 10^{-9} \text{ cm}^3/\text{s} \quad N_c = 1 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3} \quad \omega_n^0 = 2 \cdot 10^4 \text{ s}^{-1} \quad (4.30)$$

$$p = 1 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-3} \quad \lambda_p = 1 \cdot 10^9 \text{ s}^{-1} \quad \lambda_n = 8 \cdot 10^6 \text{ s}^{-1} \quad (4.31)$$

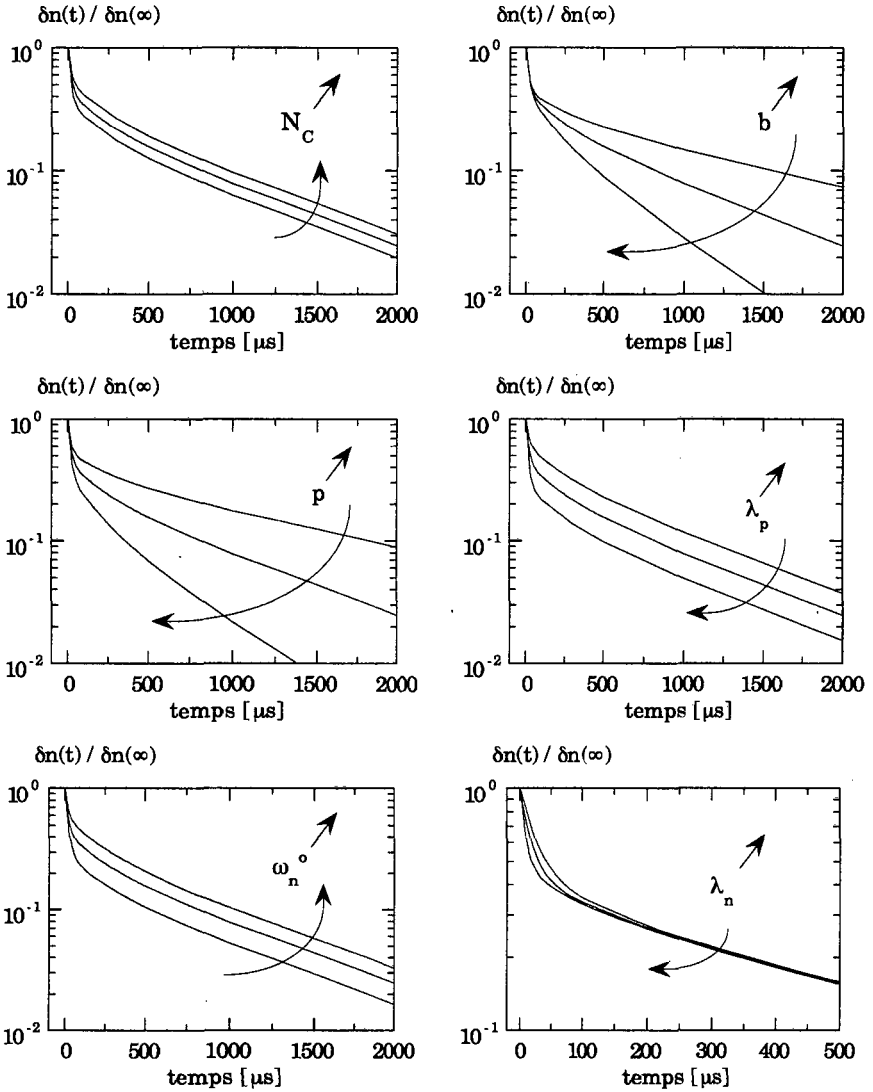


Figure 4.13: dépendance aux différents paramètres de la variation de la densité d'électrons libres en fonction du temps. Chaque paramètre varie d'un facteur deux d'une courbe à l'autre.

On distingue clairement deux intervalles de temps avec des comportements distincts. On constate que la décroissance initiale est régie par la recombinaison des électrons sur les liaisons pendantes neutres (paramètre λ_n).

La réponse aux temps longs est influencée par les paramètres p et b . L'importance relative de ces différentes portions de courbe est, quant à elle, régie par les autres paramètres N_c , λ_p et ω_n^o .

Remarque

L'intégration de $\zeta_n(x)$ ainsi que la détermination du pôle en z_1 et de son résidu ont été effectuées numériquement à l'aide du programme *Mathematica* [58]. L'intégration dans ce contexte se fait par échantillonnage de l'intégrant. Si *Mathematica* trouve que l'intégrant change rapidement dans une région particulière, il prend alors récursivement plus de points dans cette région.

Mesure de la photoconductivité transitoire

5.1 Principe

Nous allons mesurer en fonction du temps de quelle manière la photoconductivité du a-Si:H change lorsque l'on modifie légèrement l'intensité de l'illumination à laquelle il est soumis.

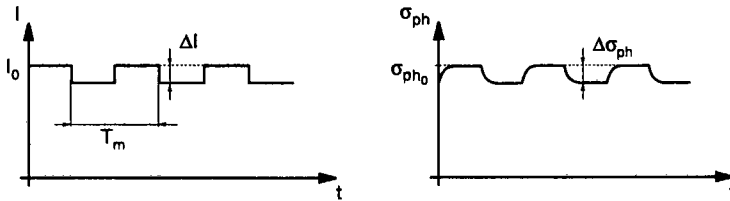


Figure 5.1: Principe de mesure de la photoconductivité transitoire avec fond continu.

On observe donc comment le photocourant dans le a-Si:H atteint son nouvel état stationnaire. Cette légère variation de l'illumination stationnaire est créée par un saut d'amplitude de l'ordre de quelques pour cent ($\Delta I \approx 5\%$). Elle doit être petite pour que l'approche théorique linéaire précédente reste valable. Comme le signal à mesurer est faible, il est nécessaire de répéter cette opération un certain nombre de fois et de prendre la moyenne de toutes les acquisitions pour obtenir des mesures précises. La période de répétition T_m doit être suffisante pour que le système atteigne le nouvel état stationnaire. Elle peut varier entre 1 ms pour un échantillon non dopé et 0.1 s pour un échantillon dopé.

5.2 Dispositif expérimental

Le système de mesure de la photoconductivité transitoire est présenté à la figure 5.2. Donnons une brève description des éléments constituant le montage.

La source lumineuse monochromatique est un laser He-Ne de longueur d'onde $\lambda = 633 \text{ nm}$. L'énergie d'un photon, $E_\lambda = hc/\lambda \approx 2 \text{ eV}$, est légèrement supérieure au gap optique du a-Si:H qui vaut $E_{gap} \approx 1.8 \text{ eV}$; la génération est donc interbande. L'absorption optique du a-Si:H à cette longueur d'onde se situe autour de $\alpha = 10^4 \text{ cm}^{-1}$. Dans des échantillons d'une épaisseur typique d'environ $2 \mu\text{m}$, environ 10% de la lumière sort à l'arrière de la couche. La génération et la recombinaison de porteurs libres ont ainsi lieu dans toute la profondeur de l'échantillon. On devrait donc dans ce cas mesurer les propriétés du volume de l'échantillon ("bulk") et non pas seulement la surface du matériau.

Un filtre gris ND placé à la sortie du laser permet d'ajuster l'intensité lumineuse de fond désirée.

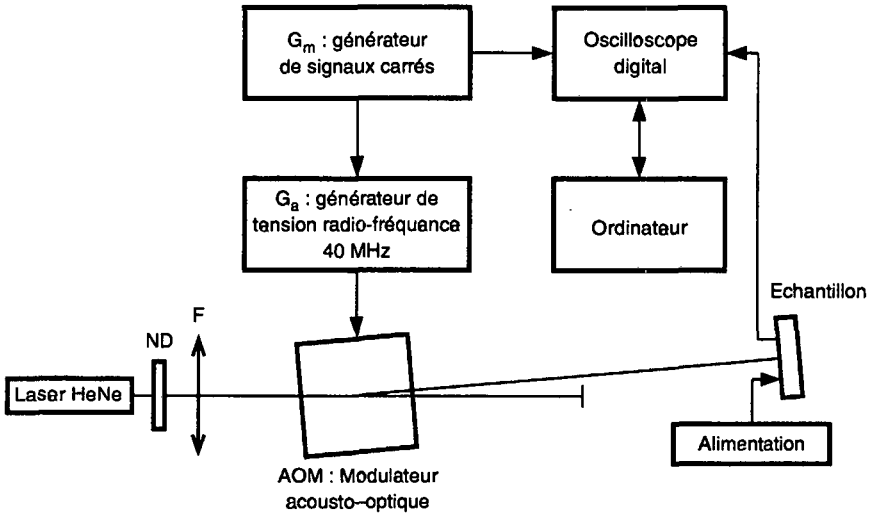


Figure 5.2: Dispositif expérimental de mesure de la photoconductivité transitoire.

La petite variation (par échelons) de l'intensité lumineuse est créée par un modulateur acousto-optique AOM [59]. Dans ce modulateur, des transducteurs piézo-électriques génèrent, sous l'influence d'une tension radiofréquence de $f_a = 40 \text{ MHz}$ due au générateur G_a , une onde acoustique dans du verre créant

une variation périodique de son indice de réfraction. Un faisceau lumineux incident à ce milieu, que l'on peut traiter comme inhomogène et périodique, sera diffracté à la manière d'un réseau. Lorsque l'angle entre le faisceau incident et la normale à l'échantillon vaut exactement l'angle de Bragg α_B , il n'y aura à la sortie que deux faisceaux: le faisceau non diffracté (ordre 0) et le faisceau diffracté d'ordre 1. L'intensité du faisceau diffracté dépend de l'intensité de l'onde acoustique. En variant cette dernière par l'intermédiaire d'un générateur de signaux carrés G_m , on va pouvoir créer une petite variation de l'intensité lumineuse du faisceau diffracté qui illumine l'échantillon.

Le temps de réponse du modulateur, lorsque l'intensité de l'onde acoustique change abruptement, dépend de la largeur du faisceau. Il est donc nécessaire, si on désire obtenir des temps de réponse assez rapides, de focaliser le faisceau sur le centre du modulateur. C'est pourquoi une lentille convergente F de focale $f = 230 \text{ mm}$ a été placée devant le modulateur. Le choix de la focale de cette lentille dépend de trois conditions:

- (1) la largeur du faisceau doit être minimale pour que le temps de réponse du modulateur soit minimum;
- (2) l'angle de divergence du faisceau sortant du modulateur doit être assez petit pour que le faisceau diffracté et le non diffracté soient séparés;
- (3) la longueur de divergence du faisceau doit être assez grande pour que la largeur du faisceau soit quasiment constante dans le modulateur.

Si (2) et (3) ne sont pas satisfaites alors la modulation du faisceau diffracté n'est pas uniforme. Le calcul des éléments optiques est reporté en Annexe B.

Pratiquement, avec le choix de la lentille F ($f = 230 \text{ mm}$), le temps de réponse du modulateur a été mesuré à $\tau_{rs} \cong 60 \text{ ns}$. Il est suffisamment petit, par rapport aux temps caractéristiques du a-Si:H, pour ne pas influencer les mesures dans le domaine que nous voulons étudier.

Le faisceau lumineux diffracté va générer des paires électrons-trous dans la couche de a-Si:H. Sous l'effet du champ électrique produit par la tension d'alimentation continue, les porteurs de charge photogénérés sont accélérés et un photocourant traverse l'échantillon.

5.3 Schéma de mesure

Deux contacts métalliques coplanaires en aluminium sont disposés, distants de 0.5 mm , sur la couche de a-Si:H. Remarquons qu'il est nécessaire de disposer d'excellents contacts ohmiques pour obtenir des mesures correctes. Si ce n'est pas le cas, on ne mesurera pas la "vraie" photoconductivité de l'échantillon (blocage ou injection de porteurs provoqué par l'interface métal/a-Si:H). Il est en général possible d'avoir une caractéristique ohmique en effectuant un traitement thermique à une température de 180°C au minimum pendant environ deux heures après déposition des contacts en Aluminium sur le a-Si:H.

La surface illuminée de l'échantillon est d'environ 0.5 mm (distance entre contacts) sur 4 mm (diamètre du faisceau laser). La tension d'alimentation ($U_{\text{alim}} \approx 100\text{ V}$) génère un champ électrique d'environ 2000 V/cm . Le photocourant traversant l'échantillon est mesuré par l'intermédiaire de la chute de tension aux bornes de la résistance $R_s = 150\text{ k}\Omega$ à l'aide d'une sonde active à grande impédance d'entrée dont la largeur de bande est de $0-100\text{ MHz}$. La tension fournie par cette sonde est détectée et enregistrée par un oscilloscope digital synchronisé par le générateur d'impulsions carrées G_m . Les données sont ensuite transférées et stockées sur ordinateur où elles sont traitées.

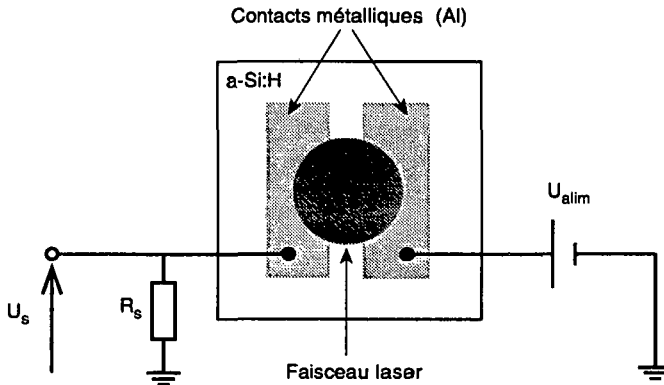


Figure 5.3: Schéma de mesure de la photoconductivité transitoire.

La valeur de la résistance de mesure R_s est négligeable en comparaison de la résistance de la couche illuminée (non-dopée ou micro-dopée) dans le domaine de travail choisi ($R_{\text{couche}} \geq 1\text{ M}\Omega$ pour $I \leq 20\text{ mW/cm}^2$).

5.4 Mesures complémentaires

En plus de la mesure transitoire, nous effectuons des mesures stationnaires afin de déterminer les caractéristiques du matériau, les produits mobilité-temps de recombinaison ($\mu\tau$) des porteurs majoritaires par la technique de la photoconductivité et minoritaires par la technique SSPG [16] (mesure de la longueur de diffusion ambipolaire) ainsi que la mesure de conductivité dans l'obscurité qui donne une indication sur la position du niveau de Fermi.

5.4.1 Mesure de la photoconductivité stationnaire

Une très petite surface de dimension bien connue ($0.5 \times 0.6 \text{ mm}^2$) de la couche est illuminée par le faisceau laser constant dans le temps. La partie illuminée étant beaucoup plus petite que la largeur du faisceau, l'intensité lumineuse à laquelle est soumis le a-Si:H est homogènement répartie. Le taux de génération *moyen* dans la couche G peut être déterminé connaissant la surface illuminée et l'intensité lumineuse

$$G = \frac{(1-r)(1-e^{-\alpha d})}{E_\lambda d} I_{inc} \quad (5.1)$$

où r est le coefficient de réflexion de la couche, d son épaisseur, α le coefficient d'absorption du a-Si:H, E_λ l'énergie du photon incident et I_{inc} l'intensité lumineuse incidente.

Un électromètre mesure la résistance R de l'échantillon à partir de laquelle on en déduit la photoconductivité σ_{ph} . Mesurant la génération et la photoconductivité, on en déduit le produit $\mu\tau$ des porteurs majoritaires.

$$\sigma_{ph} = e(\mu_n^\circ \tau_n^R + \mu_p^\circ \tau_p^R)G \quad (5.2)$$

5.4.2 Mesure de la longueur de diffusion ambipolaire par SSPG

Avec la même configuration que précédemment, on mesure par la technique du réseau de franges d'interférences (SSPG) la longueur de diffusion ambipolaire [16] qui va nous permettre de déduire le produit $\mu\tau$ des porteurs minoritaires

$$L_{amb}^2 = \frac{k_B T}{e} \frac{C^{te}}{\frac{1}{\mu_n^\circ \tau_n^R} + \frac{1}{\mu_p^\circ \tau_p^R}} \quad (5.3)$$

où C^{te} est une constante de correction dépendante de la couche mesurée [16]. Sa valeur est comprise entre 1 et 2.

Avec la mesure de σ_{ph} et de L_{amb}^2 , on peut estimer le paramètre B (voir (3.44)).

$$\frac{B}{(B+1)^2} = \frac{e^2}{k_B T} \frac{L_{amb}^2}{\sigma_{ph}} \frac{G}{C^{te}} \quad (5.4)$$

5.4.3 Mesure de conductivité dans l'obscurité

Dans le cadre du modèle standard [4,8], la conductivité dans l'obscurité est donnée, pour un échantillon non-dopé ou de type <n>, par:

$$\sigma_o(T) = \sigma_o \exp[-\beta(E_c - E_F)] \quad (5.5)$$

et, pour un échantillon de type <p>, par

$$\sigma_o(T) = \sigma_o \exp[-\beta(E_F - E_v)] \quad (5.6)$$

où σ_o est le préfacteur de la conductivité. On emploie couramment la valeur estimée par Overhof et Thomas [4].

$$\sigma_o = 150 \Omega^{-1} cm^{-1} \quad (5.7)$$

La mesure de la conductivité donne une information sur la position du niveau de Fermi E_F relative à E_c . Dans le a-Si:H, la loi précédente (équation (5.5)) n'est, en général pas vérifiée expérimentalement, surtout pour des échantillons dopés. Ceci serait dû, d'après Overhof et Thomas [4], à la dépendance du niveau de Fermi avec la température. Ces auteurs proposent donc d'évaluer la position du niveau de Fermi à partir de la conductivité mesurée à température ambiante en utilisant le préfacteur de $\sigma_o = 150 \Omega^{-1} cm^{-1}$. C'est cette dernière procédure que nous avons utilisée pour déterminer l'énergie d'activation $E_{act} = E_c - E_F$ des échantillons non dopés et dopés type <n> ($E_{act} = E_F - E_v$ pour le type <p>).

Chapitre 6

Résultats des mesures de la photoconductivité transitoire

6.1 Cas non dopé

La première partie des résultats expérimentaux concerne les échantillons de a-Si:H non intentionnellement dopés. Ces échantillons ont été fabriqués dans notre laboratoire. Le a-Si:H a été déposé sur un substrat de verre à une température oscillant entre 200°C et 220°C par la technique de déposition VHF-GD ($f = 70 \text{ MHz}$) [3]. L'épaisseur de ces couches varie entre 1.6 μm et 3.2 μm . Après la déposition de contacts coplanaires en aluminium, les échantillons ont été recuits à une température de 180°C pendant deux heures afin d'assurer une bonne ohmicité des contacts. Toutes les mesures, rappelons-le, ont été effectuées à température ambiante. L'intensité lumineuse varie de 1 mW/cm^2 à 20 mW/cm^2 . La réponse transitoire de la photoconductivité a été étudiée en fonction de l'intensité lumineuse du fond continu et en fonction de la dégradation.

Nous allons illustrer les résultats en regardant dans ce chapitre le comportement typique d'un échantillon (C220192). La gamme d'intensités choisies correspond à des taux de génération allant de $6.7 \cdot 10^{18}$ à $1.3 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ (épaisseur $d = 3.2 \mu\text{m}$). Les mesures pour d'autres échantillons sont reportées en Annexe C. La figure 6.1 montre la réponse transitoire de la photoconductivité pour différentes intensités lumineuses du fond continu. Notons que l'échantillon a été soumis pendant une dizaine de minutes à une intensité lumineuse de 20 mW/cm^2 pour satisfaire la condition donnée par l'équation (3.48). On observe clairement que la décroissance de la photoconductivité dépend fortement de l'intensité du fond continu: plus l'intensité est élevée, plus la pente initiale est raide.

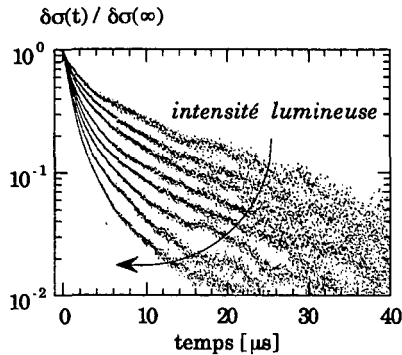


Figure 6.1: mesures de la photoconductivité transitoire pour les intensités lumineuses du fond continu suivantes: 1, 2, 3, 5, 7, 10, 14 et 20 mW/cm^2 .

La figure 6.2 illustre l'effet de la dégradation sur la réponse transitoire. A cet effet, l'échantillon a été soumis à une intensité lumineuse laser de $100 mW/cm^2$ et mesuré après différents temps d'exposition à une intensité de $20 mW/cm^2$. On observe clairement que la décroissance initiale de la photoconductivité devient plus rapide au fur et à mesure que l'échantillon se dégrade.

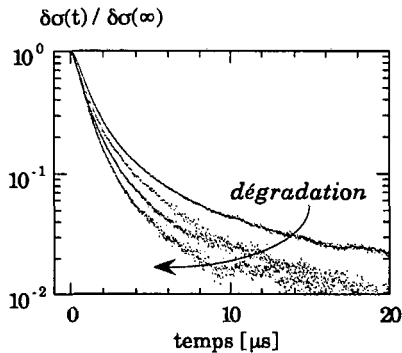


Figure 6.2: effet du processus de dégradation sur la réponse transitoire de la photoconductivité mesurée à une intensité lumineuse de $20 mW/cm^2$ après une exposition de 5 min, 30 min et 140 min à une lumière laser de $100 mW/cm^2$.

Nous allons essayer maintenant de comprendre ces observations au travers des prédictions de notre modèle de calcul. La décroissance rapide de la photoconductivité est, comme nous l'avons vu, principalement tributaire de la fréquence de recombinaison des électrons λ_n . On peut donc attribuer la modification de la décroissance initiale mesurée expérimentalement au changement de cette fréquence de recombinaison λ_n .

Lors de la dégradation, on observe un accroissement de la densité des liaisons pendantes neutres N^o soit par augmentation de leur occupation soit par la création de défauts supplémentaires causée par la forte illumination. La fréquence de recombinaison, proportionnelle à N^o (équation 3.8), va donc aussi augmenter.

Regardons comment se comporte la fréquence de recombinaison λ_n lorsque l'intensité lumineuse varie. On sait que la densité d'électrons libres est une fonction non linéaire de la génération. En effet, si $n > p$, on a approximativement

$$n \propto G^\gamma \quad (6.1)$$

Sachant par (2.23) que $G = n\lambda_n$ (6.2)

alors $\lambda_n \propto G^{1-\gamma}$ (6.3)

En mesurant la photoconductivité stationnaire en fonction de l'intensité lumineuse, on a trouvé, pour cet échantillon, que l'exposant γ vaut approximativement $\gamma \approx 0.75$. La fréquence de recombinaison dépend donc de la génération de la manière suivante:

$$\lambda_n \propto G^{0.25} \quad (6.4)$$

On voit bien par (6.4) que, si l'intensité lumineuse augmente, la fréquence de recombinaison doit augmenter et la décroissance initiale de la photoconductivité devient plus rapide.

Regardons à la figure 6.3 comment, au vu de la dépendance de n et λ_n à la génération (avec $\gamma \approx 0.75$), notre modèle prédit le comportement de la variation de densités d'électrons libres en fonction du temps pour différentes intensités lumineuses.

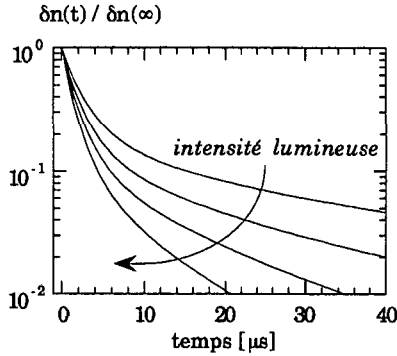


Figure 6.3: variation de la densité d'électrons libres prédite par le modèle pour différentes intensités lumineuses en supposant que $\gamma = 0.75$. La densité de défauts constante a été choisie à $N_m = 2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$. D'une courbe à l'autre, l'intensité lumineuse varie d'un facteur deux.

On peut voir, sur cette figure, que notre modèle prédit qualitativement les mêmes comportements que ceux observés expérimentalement (figure 6.1).

Nous avons essayé d'ajuster "à la main" les courbes théoriques aux mesures pour différentes intensités lumineuses en mettant l'accent sur la première partie de la décroissance de la photoconductivité, c'est-à-dire sur l'ajustement du paramètre λ_n . Pratiquement, on cherche les paramètres λ_n , n et N_m qui permettent d'ajuster une courbe théorique à une mesure. On procède de même pour les courbes correspondantes aux autres intensités en gardant la même valeur de N_m mais en changeant λ_n et n . Comme contrôle on regarde, premièrement, si la dépendance des paramètres d'ajustement trouvés (λ_n et n) à l'intensité est compatible à la valeur de l'exposant γ que l'on a déterminée par des mesures de photoconductivité stationnaire ($n \propto G^\gamma$ et $\lambda_n \propto G^{1-\gamma}$) et, deuxièmement, si le taux de génération déduit des paramètres d'ajustement par $G_{fit} = n \lambda_n$ correspond à la valeur déterminée par la mesure de l'intensité lumineuse G_{mesure} (équation (5.1)) et ce pour chaque intensité lumineuse. Un tel ajustement est présenté à la figure 6.4. D'autres ajustements pour des échantillons différents sont reportés en Annexe C.

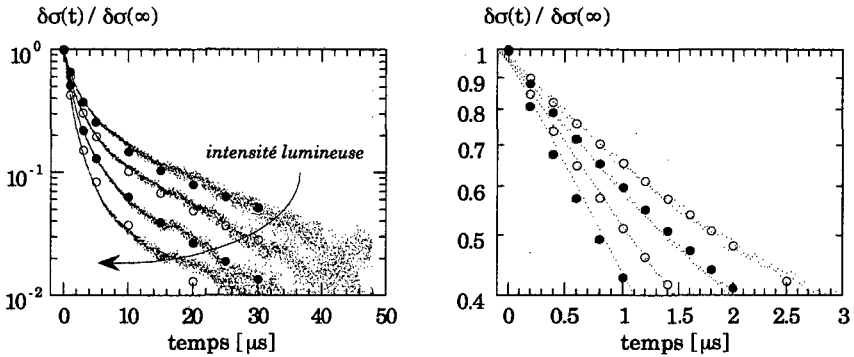


Figure 6.4: Mesures et ajustements de la photoconductivité transitoire pour quatre intensités lumineuses. Les valeurs des paramètres n et λ_n choisies sont reportées au tableau 6.1 et $N_m = 4 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$. La figure de droite est un agrandissement du début de la décroissance.

On remarque qu'il y a une bonne correspondance entre la décroissance de la photoconductivité et les courbes théoriques de la variation de la densité d'électrons libres pour les différentes intensités lumineuses. La fréquence de recombinaison suit bien la dépendance attendue à la génération ($\lambda_n \sim G^{0.3}$ pour les courbes ajustées). La dépendance de la densité d'électrons libres à l'intensité n est aussi convenable ($n \sim G^{0.73}$). Toutefois, comme l'influence de la valeur de n est beaucoup plus marquée pour des temps $t > 10 \mu\text{s}$ (voir figure 4.3) et comme le signal à mesurer devient faible, la correspondance devient moins bonne. En comparant le taux de génération estimé à partir de la mesure de l'intensité lumineuse (G_{mesure}) et celui obtenu par les valeurs de l'ajustement (G_{fit}), on constate une assez bonne compatibilité (voir le tableau 6.1) sachant que la mesure du taux de génération n'est pas très précise.

$G_{\text{mesure}} \left[\text{cm}^{-3} \text{ s}^{-1} \right]$	$(\lambda_n)_{\text{fit}} \left[\text{s}^{-1} \right]$	$n_{\text{fit}} \left[\text{cm}^{-3} \right]$	$G_{\text{fit}} \left[\text{cm}^{-3} \text{ s}^{-1} \right]$
$1.3 \cdot 10^{20}$	$13 \cdot 10^6$	$6 \cdot 10^{12}$	$7.8 \cdot 10^{19}$
$6.7 \cdot 10^{19}$	$10.5 \cdot 10^6$	$3.7 \cdot 10^{12}$	$3.9 \cdot 10^{19}$
$3.3 \cdot 10^{19}$	$8.5 \cdot 10^6$	$2.2 \cdot 10^{12}$	$1.9 \cdot 10^{19}$
$1.3 \cdot 10^{19}$	$6.5 \cdot 10^6$	$1.3 \cdot 10^{12}$	$0.8 \cdot 10^{19}$

Table 6.1: valeurs des paramètres n et λ_n pour l'ajustement des courbes de la figure 6.4 et comparaison entre le taux de génération évalué à partir des mesures et celui déduit des paramètres précédents.

Comme nous l'avons illustré à la figure 4.3, la valeur de la densité d'états constante N_m peut influencer fortement les courbes. Nous avons remarqué que cette valeur modifie l'allure générale de la variation de la densité d'électrons libres. On a pu, ainsi, raisonnablement écarter les valeurs excessives ou trop faibles de N_m . N'oublions pas le caractère quelque peu "artificiel" de ce paramètre. Il a été introduit pour rendre compte le plus simplement possible de l'allure de la densité d'états. Un paramètre N_m constant en énergie a été choisi car il correspond relativement bien aux mesures qui ont été faites de la densité d'états [29, 31, 32] et parce qu'il permet un traitement analytique du piégeage dans la queue de bande de conduction. Il est clair qu'une différence substantielle entre la densité d'états choisie dans le modèle et la "vraie" densité du a-Si:H va induire un écart important entre les mesures et les courbes théoriques. Cependant, la valeur de N_m choisie pour les ajustements entre $4 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$ et $1 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$ correspond aux résultats expérimentaux publiés aux références [31] et [32]. Elle ne semble donc pas irréaliste. Cette valeur dépend en plus de l'état dans lequel se trouve l'échantillon (dégradation).

Rappelons que la valeur de la densité effective N_c n'a pratiquement pas d'influence sur la variation de la densité d'électrons libres dans les échantillons non dopés. Par contre, la valeur du coefficient de capture des pièges de la queue de bande b peut influencer la décroissance de la courbe. On a écarté, cependant, les valeurs trop grandes et trop petites car elles conduisent à des incompatibilités pour la dépendance de λ_n à l'intensité lumineuse et pour l'estimation du taux de génération G . C'est pourquoi nous avons choisi une valeur de $b = 6 \cdot 10^{-9} \text{ cm}^3/\text{s}$ qui nous permet de bien rendre compte de la dépendance de λ_n à l'intensité lumineuse et qui est aussi adaptée pour l'ajustement des courbes dans le cas du a-Si:H dopé $\langle n \rangle$ comme nous le verrons par la suite. Cette valeur, de plus, est tout à fait comparable à celle fréquemment utilisée ou dérivée expérimentalement par d'autres auteurs [6,32,41].

Remarquons encore que le paramètre qui nous importe le plus de connaître est la fréquence de recombinaison λ_n et que la décroissance initiale de photoconductivité est pratiquement dictée par celui-ci. Aussi, on sera principalement attentif à bien ajuster le début de la décroissance ($t < 10 \mu\text{s}$).

Nous avons mentionné au chapitre IV que les trous libres pouvaient influencer la photoconductivité transitoire lorsque le rapport B (voir équation (3.44)) est relativement petit ($B < 50$). En effet, comme les trous libres, en nombre inférieur, recombinaient plus lentement que les électrons, il se pourrait, lorsque la photoconductivité a déjà bien diminuée (pour $t > 10 \mu\text{s}$), qu'on puisse les observer. Néanmoins, il ne nous a pas été possible de trancher clairement si

les différences entre les courbes mesurées et les courbes ajustées étaient dues à la contribution des trous ou si elles étaient dues, soit au choix de la densité d'états du modèle soit à des imprécisions de mesures. Il convient encore de faire une remarque sur la condition donnée par l'équation (3.47). Cette condition, nécessaire dans notre modèle pour obtenir l'expression analytique de la variation de la densité d'électrons libres $\delta n(t)$, implique que la densité d'électrons libres n ne doit pas être plus élevée qu'une certaine valeur que nous avons évaluée à $n = 5 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3}$. Effectivement, nous avons remarqué que, lorsque la photoconductivité de l'échantillon est très élevée, il nous est impossible d'ajuster les mesures pour différentes intensités. Bien que la limite n'a pas pu être clairement établie, on a donc bien constaté qu'une telle condition existe. Comme nous l'avons déjà dit, une légère dégradation de la couche suffit à satisfaire cette condition.

Nous avons mesuré un échantillon dégradé (il ne l'est pas complètement) possédant un $B \approx 20$ [16] où une influence des trous peut être envisagée. C'est ce que nous avons illustré à la figure 6.5. L'ajustement dans ce cas devient très fastidieux car le nombre de paramètres fait plus que doubler. Il est donc clair que ce cas, même s'il peut être expliqué qualitativement, ne nous apporte pas une information fiable sur le temps de recombinaison des trous λ_p , car les paramètres à ajuster sont trop nombreux.

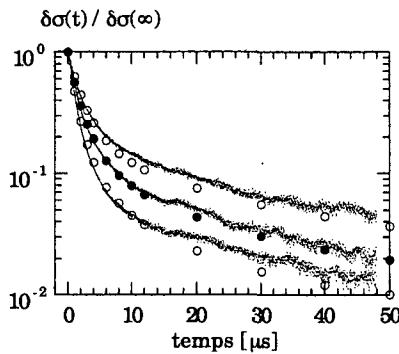


Figure 6.5: mesures et ajustements de la photoconductivité transitoire pour un échantillon dégradé en tenant compte des trous dans le calcul de la photoconductivité ($B \approx 20$).

6.1.1 Détermination de la mobilité de bande des électrons

Après avoir constaté que notre modèle nous permet de prédire correctement le comportement de la photoconductivité transitoire observée expérimentalement, il nous reste à essayer d'en extraire une information quantitative sur la mobilité de bande (microscopique) des électrons dans le a-Si:H.

Par ajustement des courbes théoriques aux mesures expérimentales, on trouve la fréquence de recombinaison des électrons λ_n . Cette fréquence est, rappelons-le, l'inverse du temps de recombinaison qui intervient dans l'expression de la photoconductivité stationnaire (voir équation (5.2) et qui peut être approximée dans le cas du a-Si:H non dopé par

$$\sigma_{ph} = e\mu_n^o \tau_n^R G \quad (6.5)$$

Ainsi, à partir de la mesure de la photoconductivité stationnaire et de l'estimation de λ_n à partir de la variation de la photoconductivité, on peut en extraire la mobilité de bande des électrons libres par

$$\mu_n^o = \left(\frac{\sigma_{ph}}{eG} \right) \cdot \lambda_n \quad (6.6)$$

Si on regarde les résultats obtenus pour tous les échantillons mesurés, déposés de façon standard à une température comprise entre 200°C et 220°C, on a trouvé que la mobilité des électrons est comprise dans la fourchette suivante (voir autres mesures en Annexe C):

$$\mu_n^o = 4 - 7 \text{ cm}^2/\text{Vs} \quad (6.7)$$

Le taux de génération G est une source d'erreurs importante dans la détermination de la mobilité. En effet, dans l'évaluation de G , se trouve la valeur de l'intensité lumineuse et du coefficient d'absorption α ; une erreur de 25% est tout à fait possible (erreur systématique induite par le dispositif de mesure de l'intensité lumineuse). De plus, la valeur trouvée de la mobilité dépend intimement de la validité du modèle choisi de la densité d'états, en particulier de l'énergie caractéristique ($\alpha = 1$) de la décroissance exponentielle de la queue de bande de conduction et de l'estimation du coefficient de capture des états de cette queue de bande b qui reste, à ce jour, imprécise.

En confrontant nos estimations de la mobilité des électrons à celles publiées par d'autres auteurs et par diverses techniques (voir le tableau suivant), on remarque que nos résultats sont tout à fait comparables.

μ_n^o [cm^2/Vs]	auteurs	année
13	Tiedge [41]	1980
9	Chen et al. [60]	1983
7-26	Spear [61]	1984
20	Marshall et al. [62]	1986
7	Devlen et al. [63]	1989
3-11	Juska et al. [64]	1990
5-7	Fauchet et al. [65]	1992

Table 6.2: *mobilité de bandes des électrons estimée par différents auteurs selon différentes techniques.*

6.1.2 Mobilité de bandes des électrons en fonction de la température de dépôt

La possibilité, que nous venons de voir, d'évaluer la mobilité de bande des électrons dans le a-Si:H non dopé par la mesure de la photoconductivité transitoire a été appliquée à des échantillons déposés à différentes températures. Pour cette série d'échantillons, la température du substrat varie de $100^{\circ}C$ à $320^{\circ}C$. Rappelons que la température de dépôt pour les échantillons "standards" étudiés précédemment est de $200-220^{\circ}C$. Le comportement de la mobilité de bande des électrons en fonction de la température de dépôt est présenté à la figure 6.6.

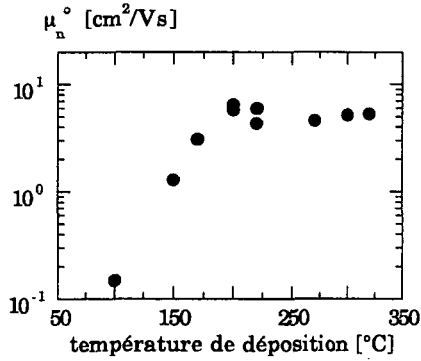


Figure 6.6: variation de la mobilité de bande des électrons en fonction de la température de déposition.

On remarque clairement que la mobilité chute lorsque la température de déposition est inférieure à $T_{dep} = 200^\circ\text{C}$. Pour des températures de 200°C à 320°C , la mobilité reste approximativement la même. Ce comportement peut être relié à un changement de la microstructure. En effet, Kroll et al. [66,67,68] ont détecté une augmentation substantielle du paramètre de microstructure R par des mesures infrarouges lorsque la température de déposition est inférieure à 200°C . Ce paramètre mesure grossièrement la proportion de liaisons Si-H sur les surfaces internes des microvides (voids). Une augmentation de la quantité de ces liaisons est le signe d'une augmentation de la porosité du matériau. Il faut ajouter que, même si la valeur absolue de la mobilité obtenue dépend du modèle choisi de la densité d'états de la queue de bande de conduction ($\alpha_n = 1$, valeur de b), le comportement observé en fonction de la température de déposition (μ_n^o diminue si $T_{dep} < 200^\circ\text{C}$) est toujours présent.

On peut donc raisonnablement penser que la mobilité des électrons dépend de la microstructure et qu'elle diminue lorsque la porosité du matériau augmente.

6.2 Cas dopé <n>

Les échantillons légèrement dopés du type <n> étudiés dans ce paragraphe ont été obtenus par addition, lors de la déposition, de phosphine au gaz de silane. La figure 6.7 montre la photoconductivité transitoire d'un

échantillon dopé à 0.2 ppm pour différentes intensités lumineuses et la figure 6.8 celle d'une couche dopée à 1 ppm.

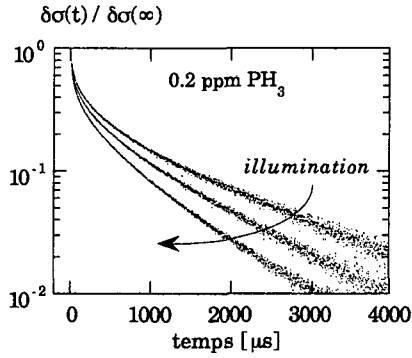


Figure 6.7: mesure de la photoconductivité transitoire d'un échantillon dopé $\langle n \rangle$ à 0.2 ppm pour des intensités lumineuses de 2 - 5 - 10 mW/cm^2 .

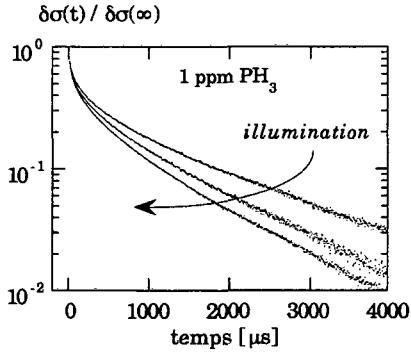


Figure 6.8: mesure de la photoconductivité transitoire d'un échantillon dopé $\langle n \rangle$ à 1 ppm pour des intensités lumineuses de 2 - 5 - 10 mW/cm^2 .

On remarque que le dopage, même léger, modifie fortement la variation de la photoconductivité: la réponse est beaucoup plus lente que pour un échantillon non dopé. Une décroissance de l'ordre de 99% a lieu pendant environ 100 μs dans les échantillons non dopés alors qu'il faut environ 5 ms pour un échantillon dopé. On observe distinctement deux intervalles de temps avec des

comportements différents: une décroissance rapide pour $t < 100 \mu\text{s}$ et une beaucoup plus lente à partir de $t > 100 \mu\text{s}$.

L'effet du processus de dégradation est présenté à la figure 6.9. On remarque que la décroissance initiale devient plus rapide lorsque l'échantillon se dégrade. Les deux intervalles de temps sont également bien visibles.

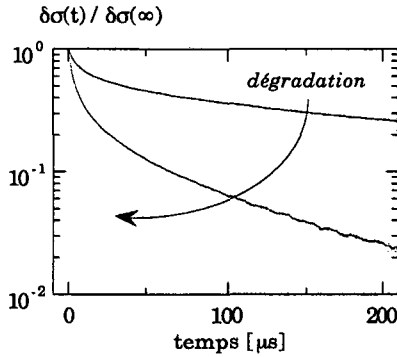


Figure 6.9: photoconductivité transitoire pour un échantillon non dégradé et dégradé (pendant dix heures à 100 mW/cm^2) mesurée à une même intensité lumineuse de 10 mW/cm^2 .

Regardons comment notre modèle peut prédire la dépendance en intensité de la variation de la photoconductivité. Comme dans les échantillons dopés de type $\langle n \rangle$ les électrons libres sont nettement plus nombreux que les trous libres, la variation de la photoconductivité est dictée uniquement par la variation de la densité des électrons libres. On a déjà vu que

$$n \sim G^\gamma \quad \text{et} \quad \lambda_n \sim G^{1-\gamma} \quad (6.8)$$

$$\text{et comme } \omega_n^o = v_{th} \sigma_n^o n, \text{ alors } \omega_n^o \sim G^\gamma \quad (6.9)$$

De plus, la dépendance à la génération de la longueur de diffusion ambipolaire est donnée par

$$L_{amb}^2 \sim G^p \quad (6.10)$$

Comme pour un échantillon de type $\langle n \rangle$ [16],

$$L_{amb}^2 \sim p/G \quad (6.11)$$

$$\text{alors } p \sim G^{1+p} \quad \text{et} \quad \lambda_p \sim G^{-p} \quad (6.12)$$

Pour les échantillons mentionnés auparavant, on a mesuré que $\gamma \approx 0.5$ et, très approximativement, que $\rho \approx -0.1$ (la dispersion des points de mesures de la

longueur de diffusion en fonction de l'intensité est grande [16]). La figure 6.10 montre le comportement prédit de la densité d'électrons libres pour différentes intensités du fond continu.

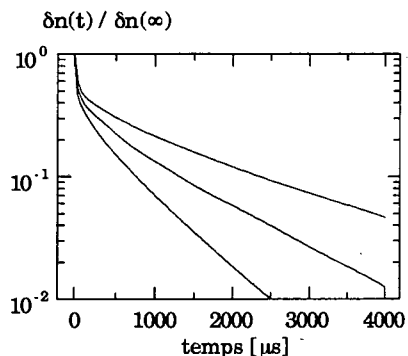


Figure 6.10: variation de la densité d'électrons libres prédite par le modèle pour différentes intensités lumineuses en supposant que $\gamma \approx 0.5$ et $\rho \approx -0.1$. D'une courbe à l'autre, l'intensité varie d'un facteur deux.

On voit que nos courbes théoriques prédisent qualitativement les mêmes comportements que ceux observés expérimentalement. En effet, on remarque clairement les deux intervalles de temps avec des décroissances différentes et la dépendance de la photoconductivité transitoire à l'intensité lumineuse.

A l'aide de notre modèle, on peut comprendre la décroissance lente de la photoconductivité et en particulier ses deux comportements différents. La première décroissance ($t < 100 \mu s$) correspond au processus de capture, par les liaisons pendantes neutres, des électrons de la bande de conduction modifiée par l'effet du trafic entre la bande et la queue de bande. Comme la disponibilité en centres de recombinaison pour les électrons (D^0) est limitée (voir figure 3.2), les électrons doivent "attendre" qu'il s'en crée. Ceci s'effectue grâce à la capture, par les liaisons pendantes chargées négativement ($f^- \approx 1$), des trous de la bande de valence transformant les liaisons pendantes négatives en neutres. Comme ce processus est plus lent à cause de la grande largeur de la queue de bande de valence, la décroissance de la photoconductivité sera ralentie. C'est ce que nous voyons pour des temps $t > 100 \mu s$.

Pour ajuster les courbes théoriques aux mesures, nous avons choisi la valeur du coefficient de capture b utilisée dans le cas non dopé, c'est-à-dire $b = 6 \cdot 10^{-9} \text{ cm}^3/\text{s}$. On peut se rendre compte en regardant la dépendance aux différents paramètres de la variation de la densité d'électrons libres (voir

figure 4.13) que la tâche est nettement plus fastidieuse que dans le cas non dopé. Un ajustement pour l'échantillon dopé à 0.2 ppm est présenté à la figure 6.11.

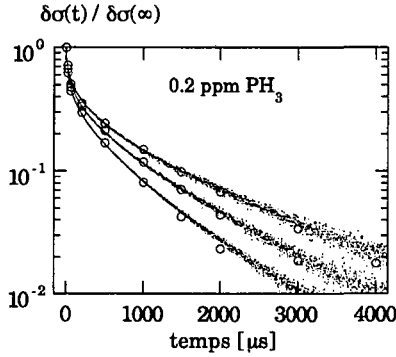


Figure 6.11: ajustement de la variation de la densité d'électrons libres aux mesures de la photoconductivité transitoire d'un échantillon dopé à 0.2 ppm pour trois intensités lumineuses différentes.

Les valeurs des paramètres choisies pour les différentes intensités lumineuses, dans l'ordre croissant, sont les suivantes:

$$\begin{aligned}
 p &= 5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}; & \lambda_p &= 6.8 \cdot 10^8 \text{ s}^{-1}; & \lambda_n &= 4.5 \cdot 10^5 \text{ s}^{-1}; & \omega_n^o &= 1.2 \cdot 10^4 \text{ cm}^3/\text{s} \\
 p &= 8 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}; & \lambda_p &= 7 \cdot 10^8 \text{ s}^{-1}; & \lambda_n &= 6 \cdot 10^5 \text{ s}^{-1}; & \omega_n^o &= 1.6 \cdot 10^4 \text{ cm}^3/\text{s} \\
 p &= 1.1 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}; & \lambda_p &= 7.5 \cdot 10^8 \text{ s}^{-1}; & \lambda_n &= 8 \cdot 10^5 \text{ s}^{-1}; & \omega_n^o &= 2.2 \cdot 10^4 \text{ cm}^3/\text{s}
 \end{aligned}$$

Ce choix de valeurs dépend fortement du coefficient de capture b . Une connaissance plus précise de celui-ci serait donc très utile. Néanmoins, le taux de génération déterminé par $G = p \lambda_p$ est tout à fait comparable à celui mesuré et la dépendance des courbes théoriques à l'intensité lumineuse est assez satisfaisante.

6.2.1 Détermination de la mobilité de bande des trous

La grandeur qui nous intéresse tout particulièrement est la fréquence de recombinaison des trous λ_p . Dans notre modèle, elle "fixe" en quelque sorte l'amplitude de la décroissance la plus lente. Expérimentalement, on voit que celle-ci ne dépend pas trop de l'intensité lumineuse et c'est aussi ce que nous constatons sur les courbes ajustées: λ_p varie peu avec l'intensité lumineuse. C'est pourquoi on peut dire que la fréquence de recombinaison des trous, déterminée

par ajustement pour le domaine d'intensité lumineuse considéré ($2-10 \text{ mW/cm}^2$), vaut approximativement (ρ étant très petit):

$$\lambda_p = (6 \cdot 10^8 - 8 \cdot 10^8) \text{ s}^{-1} \quad (6.13)$$

La longueur de diffusion ambipolaire dans le cas dopé $\langle n \rangle$ s'exprime par [16,69]

$$L_{amb}^2 = C \frac{k_B T}{e} \mu_p^o \tau_p^R \quad (6.14)$$

avec

$$C = \gamma + 1 + \rho \quad (6.15)$$

qui vaut pour cet échantillon dopé à 0.2 ppm

$$C \approx 1.4 \quad (6.16)$$

La longueur de diffusion ambipolaire est évaluée par la technique SSPG

$$L_{amb}^2 \approx (6 \cdot 10^{-11} - 9 \cdot 10^{-11}) \text{ cm}^2 \quad (6.17)$$

On a donné ici une fourchette de valeurs car les mesures de la longueur de diffusion sont assez dispersées (petites valeurs) et il n'est pas possible de mettre en évidence une tendance claire vis à vis de l'intensité lumineuse et du processus de dégradation [16,47,69].

A partir de la mesure de la longueur de diffusion et de la fréquence de recombinaison des trous déterminée par ajustement, on peut extraire la mobilité de bande des trous:

$$\mu_p^o = \left(\frac{e}{k_B T} \frac{L_{amb}^2}{C} \right) \lambda_p \quad (6.18)$$

On trouve que la mobilité pour des échantillons micro-dopés (0.2-1 ppm) déposés à $T_{dep} = 220^\circ \text{C}$ est comprise dans la fourchette suivante:

$$\mu_p^o = (1-3) \text{ cm}^2/\text{Vs} \quad (6.19)$$

C'est une valeur tout à fait raisonnable car la mobilité des trous est, en général, estimée autour de l'unité [6,38,52]. Il faut bien évidemment rappeler toute l'importance du choix des paramètres pour les ajustements et en particulier du coefficient de capture b qui peut modifier sensiblement l'estimation de la mobilité. La valeur du paramètre de l'exponentielle de la queue de bande de valence $\alpha_p = 1/2$ dans le modèle de la densité d'états a aussi son importance. Il semble par contre que l'hypothèse (voir équation (3.101)) que nous avons faite

pour le calcul concernant le trafic dans la queue de bande de conduction ne soit pas prépondérante pour la détermination de λ_p , la fréquence de recombinaison des électrons influençant la réponse transitoire dans le premier intervalle de temps $t < 100 \mu s$.

Conclusions

Au cours de ce travail, nous avons examiné la variation de la photoconductivité du a-Si:H à température ambiante causée par un léger changement d'un état stationnaire.

Les mécanismes de transport de charges ont été étudiés dans le cadre du modèle standard. La conduction s'effectue uniquement dans les états étendus (bande de conduction et bande de valence) par des électrons et des trous libres ayant une mobilité microscopique μ_n^o et μ_p^o , respectivement. Les porteurs localisés dans les états du gap ne participent pas à la conduction. Des processus de piégeage multiple (capture et émission thermique) des porteurs ont lieu entre les bandes et leur queue de bande respective. La recombinaison monomoléculaire s'effectue par capture des porteurs libres sur un état énergétique discret des liaisons pendantes. Les émissions thermiques depuis celles-ci vers les bandes ont été négligées.

La queue de bande de conduction est formée d'une exponentielle décroissante prolongée par une densité d'états constante jusqu'au quasi-niveau de Fermi des électrons. Le paramètre caractérisant la décroissance exponentielle a été choisi à $\alpha_n = 1$. La queue de bande de valence est formée d'une exponentielle décroissante également mais dont le paramètre caractéristique vaut $\alpha_p = 1/2$.

En utilisant la transformation de Laplace et en linéarisant les équations du piégeage multiple, nous avons obtenu un système d'équations linéaires inhomogènes couplées décrivant la variation temporelle des densités de porteurs libres (électrons et trous) et des densités des liaisons pendantes.

Une hypothèse concernant l'occupation des états des queues de bande nous a permis de trouver une fonction analytique contenant tout l'effet du trafic entre les bandes et leur queue de bande respective.

Nous avons, ensuite, recherché une solution à ce système d'équations pour deux cas particuliers: le a-Si:H non intentionnellement dopé et légèrement dopé <n>.

Dans le cas du a-Si:H non dopé, nous avons trouvé une condition sur la densité d'électrons libres nous permettant de découpler les équations et d'obtenir une expression simple pour la variation de la densité des électrons libres et des trous libres. Le résultat montre que la variation de la photoconductivité est principalement due à la variation de la densité d'électrons libres et qu'elle est dictée par la recombinaison des électrons sur les liaisons pendantes neutres. Toutefois, la recombinaison est fortement modifiée et ralentie par l'effet du trafic entre la bande et la queue de bande de conduction.

La forme de la décroissance que notre modèle prédit s'apparente à une exponentielle étirée (stretched exponential) finissant, pour des temps longs, en exponentielle correspondant à la ré-émission thermique vers la bande des électrons piégés dans les états proches du quasi-niveau de Fermi.

Ce comportement a pu être vérifié expérimentalement lorsque les conditions de mesures satisfont aux hypothèses de calcul.

Par ajustement des courbes théoriques obtenues aux mesures de la variation de la photoconductivité, nous avons pu déduire le temps de recombinaison des électrons sur les liaisons pendantes neutres. Une comparaison avec des mesures de photoconductivité stationnaire effectuée dans les mêmes conditions expérimentales nous a permis d'extraire la mobilité de bande (microscopique) des électrons.

Pour des échantillons non dopés déposés dans des conditions standards à une température oscillant entre 200°C et 220°C, nous avons trouvé que la mobilité des électrons vaut

$$\mu_n^o = (4-7) \text{ cm}^2/\text{Vs}$$

Ce résultat est tout à fait comparable aux valeurs publiées par d'autres auteurs.

En étudiant des échantillons déposés à différentes températures, nous avons remarqué que la mobilité des électrons diminue de manière significative lorsque la température de déposition est inférieure à 200°C. On peut donc raisonnablement penser que la mobilité des électrons dépend de la microstructure et qu'elle diminue lorsque la porosité du matériau augmente.

Dans le cas du a-Si:H légèrement dopé du type <n>, la situation a été un peu plus compliquée à traiter. En effet, la quantité importante d'électrons libres et la faible proportion de liaisons pendantes neutres (centres de recombinaison pour les électrons) va induire un couplage entre les électrons et les trous à travers

les liaisons pendantes. Le comportement des trous va donc influencer celui des électrons. Néanmoins, en faisant une hypothèse basée sur les temps de réponse très différents des électrons et des trous, nous avons trouvé une expression analytique de la variation de la densité d'électrons libres contenant, cependant, l'effet de la capture des trous par les liaisons pendantes chargées négativement. C'est, en effet, par conversion des liaisons pendantes négatives, après capture d'un trou, en liaisons pendantes neutres que la recombinaison des électrons peut avoir lieu.

On a ainsi trouvé que le modèle prédit deux comportements distincts de la photoconductivité pour des intervalles de temps différents. Dans un premier intervalle de temps ($t < 100 \mu s$), la décroissance de la photoconductivité est dictée par la recombinaison des électrons sur les liaisons pendantes neutres modifiée par l'effet du trafic entre la bande et sa queue de bande. Ce processus est rapide.

Dans un deuxième intervalle de temps ($t > 100 \mu s$), vu l'insuffisance en centres de recombinaison pour électrons, ceux-ci doivent "attendre" la transformation des liaisons pendantes négatives en neutres qui a lieu lors de la capture d'un trou libre. Ce processus étant beaucoup plus lent que la recombinaison des électrons à cause du grand effet de retard généré par le trafic entre la bande de valence et la large queue de bande de valence, la variation de la densité des électrons devient extrêmement plus lente.

Dans notre modèle, le premier processus correspond approximativement à une décroissance exponentielle et le deuxième à une exponentielle étirée devenant, cependant, rapidement une seule exponentielle correspondant à la ré-émission thermique des trous piégés dans les états proches du quasi-niveau de Fermi.

On a donc remarqué que le processus limitant la décroissance de la photoconductivité dans les échantillons dopés $\langle n \rangle$ est la recombinaison des trous qui a lieu lentement à cause de la grande largeur de la queue de bande de valence. Ce comportement a été vérifié expérimentalement. On a constaté que le temps de décroissance de la photoconductivité des échantillons non dopés estimé autour de $100 \mu s$ passe à environ $5 ms$ pour les échantillons dopés.

Par ajustement des courbes théoriques aux mesures et par comparaison à des mesures de la longueur de diffusion ambipolaire, nous avons pu évaluer la mobilité de bande des trous dans des échantillons dopés de type $\langle n \rangle$ déposés à $220^\circ C$.

$$\mu_p^o = (1-3) \text{ cm}^2/Vs$$

Ce résultat est comparable à ceux observés dans la littérature.

Nous avons ainsi remarqué que notre modèle simple de recombinaison par les liaisons pendantes et de piégeage dans les queues de bande décrit remarquablement bien le comportement de la photoconductivité transitoire que nous avons observé expérimentalement. Il nous éclaire ainsi sur les mécanismes qui s'y produisent.

Il faut cependant remarquer que l'ajustement des courbes théoriques aux mesures effectuées est tributaire du choix des paramètres du modèle et ce surtout pour le cas dopé $\langle n \rangle$. Il faut tout d'abord signaler l'approximation induite par le choix de la densité d'état dans le gap et spécialement le paramètre caractéristique de la décroissance α_n . Il se peut que la queue de bande de conduction ait une forme différente (par exemple, deux exponentielles, une lente au début et une plus rapide ensuite). La densité d'états pour des énergies proches du quasi-niveau de Fermi n'est pas non plus une donnée bien connue.

Le paramètre le plus influent dans notre modèle et évidemment mal connu actuellement, est le coefficient de capture des pièges des queues de bande b que nous avons, en plus, supposé identique pour tous les niveaux de pièges. Nous avons constaté qu'une variation de sa valeur modifie la mobilité obtenue. Toutefois, il faut signaler que, même si les valeurs absolues de la mobilité sont entachées d'une erreur, la tendance à la diminution de la mobilité des électrons lorsque la température de déposition est inférieure à 200°C est toujours clairement observée.

La valeur trouvée de la mobilité des électrons nous semble plus fiable que celle des trous car les paramètres qui agissent sur la détermination de cette dernière sont plus nombreux et leur influence est plus forte. Une meilleure connaissance des paramètres intervenant dans notre modèle serait donc d'une grande utilité.

D'un autre côté, il serait souhaitable, surtout pour les échantillons non dopés, de disposer de mesures plus précises. En effet, le signal à détecter peut être très faible. De plus, l'évaluation du taux de génération peut produire directement une erreur significative dans la mobilité. Une mesure plus précise de l'intensité lumineuse serait donc aussi souhaitable.

Pour conclure, nous avons été frappés que, malgré la relative simplicité du modèle de la densité d'états et des mécanismes qui s'y produisent, les comportements observés expérimentalement ont pu être prédit de manière satisfaisante nous donnant une idée peut-être un peu plus convaincante, du moins nous le pensons, des phénomènes physiques que des simulations purement numériques.

Références

1. N.W. Ashcroft and N.D. Mermin, *Solid State Physics*, (Saunders College, 1976).
2. P. Kiréev, *La physique des semiconducteurs*, (éditions MIR, Moscou, 1975).
3. H. Curtins, N. Wyrsh, M. Favre and A.V. Shah, *Plasma Chem. & Plasma Proc.* **7**, (1987) 267.
4. H. Overhof and P. Thomas, *Electronic Transport in Hydrogenated Amorphous Semiconductors*, Springer Tracts in Modern Physics, vol. 114, (Springer Verlag, Berlin, 1989).
5. S.R. Elliott, *Physics of Amorphous Materials*, (Longman, London & New York, 1983).
6. R.A. Street, *Hydrogenated amorphous silicon*, (Cambridge University Press, 1991).
7. P.W. Anderson, *Phys. Rev.* **109**, (1958) 1492.
8. N.F. Mott and E.A. Davis, *Electronic processes in non-crystalline materials*, (Oxford University Press, 1979).
9. H. Scher and E.W. Montroll, *Phys. Rev. B* **12**, (1975) 2455.
10. F.W. Schmidlin, *Phys. Rev. B* **16**, (1977) 2362.
11. D. Monroe, *Phys. Rev. Lett.* **54**, (1985) 146.
12. J.H. Zhou and S.R. Elliot, *Phil. Mag. B* **66** (6), (1992) 801.
13. W.E. Spear and P.G. LeComber, *Sol. St. Comm.* **17**, (1975) 1193.
14. R.A. Street, *Phys. Rev. Lett.* **49**, (1982) 1187.
15. M. Stutzmann, W.B. Jackson and C.C. Tsai, *Phys. Rev. B* **32**, (1985) 23.

16. E. Sauvain, thèse de doctorat, Université de Neuchâtel, (1992).
17. J. Hubin, thèse de doctorat, Université de Neuchâtel, (1994).
18. D.L. Staebler and C.R. Wronski, *Appl. Phys. Lett* **31**, (1977) 292.
19. H. Fritzsche, *AIP Conf. Proc.* **157**, (1987) 366.
20. K. Winer and L. Ley, in *Amorphous silicon and related materials*, edited by H. Fritzsche, World Scientific Publishing Company, (1988) 365.
21. M. Favre, thèse de doctorat, Université de Neuchâtel, (1993).
22. H. Curtins and M. Favre, in *Amorphous silicon and related materials*, edited by H. Fritzsche, World Scientific Publishing Company, (1988) 329.
23. A. Mettler, thèse de doctorat, Université de Neuchâtel, (1994).
24. J. Kocka, M. Vanecek and A. Triska, in *Amorphous silicon and related materials*, edited by H. Fritzsche, World Scientific Publishing Company, (1988) 297.
25. N. Wyrsh, thèse de doctorat, Université de Neuchâtel, (1993).
26. J.M. Marshall, in *Amorphous silicon and related materials*, edited by H. Fritzsche, World Scientific Publishing Company, (1988) 799.
27. C.E. Nebel, H.C. Weller and G.H. Bauer, in *Amorphous Silicon Technology*, edited by P.C. Taylor, M.J. Thompson, P.G. LeComber, Y. Hamakawa and A. Madan, Materials Research Society Symposia Proceedings, vol. 192, (Materials Research Society, Pittsburgh, 1990), 151.
28. C. Main, R. Russell, J. Berkin and J.M. Marshall, *Phil. Mag. Lett.* **55** (4), (1987) 189.
29. C. Main, R. Brüggemann, D.P. Webb and S. Reynolds, *J. Non-Cryst. Solids* **164-166**, (1993) 481.
30. R. Brüggemann, C. Main, J. Berkin and S. Reynolds, *Phil. Mag. B* **62** (1), (1990) 29.
31. C. Longeaud and J.P. Kleider, in *12th European Photovoltaic Solar Energy Conference*, edited by R. Hill, W. Palz and P. Helm, Commission of the European Communities, (H.S. Stephens & Associates, Amsterdam, 1994), 92.
32. K. Hattori, Y. Adachi, M. Anzai, H. Okamoto and Y. Hamakawa, *J. Appl. Phys.* **76** (5), (1994) 2841.
33. D.V. Lang, J.D. Cohen and J.P. Harbison, *Phys. Rev. B* **25** (8), (1982) 5285.

34. K.D. Mackenzie, P.G. LeComber and W.E. Spear, *Philos. Mag.* **46**, (1982) 377.
35. D.K. Biegelsen and M. Stutzmann, *Phys. Rev. B* **33**, (1986) 3006.
36. K. Winer, *Phys. Rev. B* **41** (17), (1990) 12150.
37. G. Schumm, *J. Non-Cryst. Solids* **164-166**, (1993) 317.
38. T. Tiedge, in *Semiconductors and Semimetals*, edited by J.I. Pankove, Academic Press, (1984) 207.
39. M. Silver and L. Cohen, *Phys. Rev. B* **15**, (1977) 3276.
40. J.M. Marshall, *Phil. Mag.* **36**, (1977) 959.
41. T. Tiedge and A. Rose, *Sol. St. Comm.* **37**, (1980) 49.
42. J. Orenstein, M.A. Kastner and V. Vaninov, *Phil. Mag. B* **46** (1), (1982) 23.
43. R. Pandya and E.A. Schiff, *Phil. Mag. B* **52** (6), (1985) 1075.
44. P. Pipoz, N. Wälchli, H. Beck and A.V. Shah, *J. Non-Cryst. Solids* **164-166**, (1993) 525.
45. N. Beck, N. Wyrsh, E. Sauvain and A.V. Shah, in *Amorphous Silicon Technology*, edited by E.A. Schiff, M.J. Thompson, A. Madan, K. Tanaka and P.G. LeComber, Materials Research Society Symposia Proceedings, vol. 297, (Materials Research Society, Pittsburgh, 1993), 479.
46. R.A. Street, *Philos. Mag. B* **49** (L15), (1984).
47. P. Pipoz, E. Sauvain, J. Hubin and A.V. Shah, in *Amorphous Silicon Technology*, edited by M.J. Thompson, Y. Hamakawa, P.G. LeComber, A. Madan and E.A. Schiff, Materials Research Society Symposia Proceedings, vol. 258, (Materials Research Society, Pittsburgh, 1992), 777.
48. G.W. Taylor and J.G. Simmons, *J. Non-Cryst. Solids* **8-10**, (1972) 940.
49. G. Doetsch, *Guide to the applications of the Laplace and z transforms*, (Van Nostrand Reinhold Company, 1971).
50. I.S. Gradshteyn and I.M. Ryzhik, *Table of integrals, series and products*, (Academic Press, 1980).
51. F. Vaillant and D. Jousse, *Phys. Rev. B* **34**, (1986) 4088.
52. J. Kocka, C.E. Nebel and C.D. Abel, *Phil. Mag. B* **63**, (1991) 221.
53. J. Abelson, *J. Non-Cryst. Solids* **114**, (1989) 450.
54. N. Wyrsh and A.V. Shah, *J. Non-Cryst. Solids* **137&138**, (1991) 431.

55. A. Papoulis, *The Fourier integral and its applications*, (McGraw-Hill, 1962).
56. H. Cartan, *Théorie élémentaire des fonctions analytiques d'une ou plusieurs variables complexes*, (Hermann, Paris, 1985).
57. W.B. Jackson, S.M. Kelso, C.C. Tsai, J.W. Allen and S.J. Oh, *Phys. Rev. B* **31** (8), (1985) 5187.
58. S. Wolfram, *Mathematica: a system for doing Mathematics by computer*, (Addison-Wesley, 1991).
59. B. Saleh and M. Teich, *Fundamentals of photonics*, (Wiley, 1991).
60. K.J. Chen and H. Fritzsche, *J. Non-Cryst. Solids* **59&60**, (1983) 441.
61. W.E. Spear, H.L. Steemers, P.G. LeComber and R.A. Gibson, *Phil. Mag.* **50**, (1984) L33.
62. J.M. Marshall, R.A. Street and M.J. Thompson, *Philos. Mag. B* **54** (1), (1986) 51.
63. R.I. Devlen and J. Tauc, *J. Non-Cryst. Solids* **114**, (1989) 567.
64. G. Juska, J. Kocka, K. Arlauskas and G. Jukonis, *Sol. St. Comm* **75** (6), (1990) 531.
65. P.M. Fauchet, R. Vanderhagen, A. Mourchid and D. Hulin, in *Amorphous Silicon Technology*, edited by M.J. Thompson, Y. Hamakawa, P.G. LeComber, A. Madan and E.A. Schiff, *Materials Research Society Symposia Proceedings*, vol. 258, (Materials Research Society, Pittsburgh, 1992), 711.
66. U. Kroll, J. Meier, M. Goetz, A. Howling, J.L. Dorier, J. Dutta, A.V. Shah and C. Hollenstein, *J. Non-Cryst. Sol.* **164-166**, (1993) 59.
67. U. Kroll, communication privée, (1995).
68. F. Finger, U. Kroll, V. Viret, A.V. Shah, W. Beyer, X.M. Tang, J. Weber, A. Howling and C. Hollenstein, *J. Appl. Phys.* **71** (11), (1992) 5665.
69. E. Sauvain, P. Pipoz, A.V. Shah and J. Hubin, *J. Appl. Phys.* **75** (3), (1994) 1722.

Remerciements

Je tiens à exprimer mes plus chaleureux remerciements:

- au Professeur Arvind Shah, mon directeur de thèse, et au Professeur Hans Beck qui ont été les initiateurs et les acteurs de ce travail de recherche, pour leur engagement, leurs suggestions pertinentes, leur aide et leur disponibilité tout au long de ces années;
- à Magali Goerlitzer avec qui se fut un plaisir de collaborer, pour sa contribution aux mesures et sa lecture critique du manuscrit;
- à Evelyne Sauvain, Jacques Hubin, Ulli Kroll, Andreas Mettler et Nicolas Wyrsh, pour leur apport scientifique et amical;
- à Nicolas Wälchli qui a donné, lors de son travail de diplôme, un excellent départ à ce projet;
- à tous les membres de l'équipe du Professeur Shah que je n'ai pas nommés, qu'ils ne m'en tiennent pas rigueur, et qui ont participé, d'une façon ou d'une autre, à mon travail et à la bonne ambiance qui régnait dans ce groupe;
- à toutes les personnes de l'Institut de Microtechnique qui m'ont aidé de diverses manières;
- à Carole pour son soutien quotidien, sa compréhension pendant les jours de découragement et son aide précieuse lors de la rédaction de ce manuscrit.

Annexes

A. Transformation de Laplace inverse pour le cas dopé <n>

Nous allons présenter ici le calcul détaillé de la transformation de Laplace inverse dans le cas dopé <n>. Nous allons, pour plus de clarté, répéter quelques résultats déjà donnés dans le chapitre 3.

On a vu que dans le cas dopé <n>, la matrice du système a la forme simplifiée (3.97)

$$\mathbf{A}_n(z) = \begin{pmatrix} -f_n(z) - \lambda_n & 0 & 0 & -\omega_n^o \\ 0 & -f_p(z) - \lambda_p & 0 & 0 \\ \lambda_n & -\lambda_p & 0 & \omega_n^o \\ -\lambda_n & \lambda_p & 0 & -\omega_n^o \end{pmatrix} \quad (\text{A.1})$$

et que la fonction $f_n(z)$ de la queue de bande de conduction peut être approximée par (3.101)

$$f_n(z) = z \text{Log} \frac{z + N_c b}{z + 2nb} = z \text{Log} \frac{N_c}{2n} = z \alpha \quad (\text{A.2})$$

avec

$$\alpha \sim 13 - 14 \quad (\text{A.3})$$

Pour la fonction $f_p(z)$ de la queue de bande de valence, on garde l'expression dérivée en (3.39) et (3.40). Par (3.16) la variation de densité d'électrons libres s'écrit (3.103)

$$\delta n(z) = \frac{\delta G}{z^2} \frac{1}{a} \left[\frac{z + \omega_n^o}{z + d} - \frac{\lambda_p \omega_n^o}{(z + f_p(z) + \lambda_p)(z + d)} \right] \quad (\text{A.4})$$

avec

$$d = \omega_n^o + \frac{\lambda_n}{a} \quad (\text{A.5})$$

et

$$a = 1 + \alpha \quad (\text{A.6})$$

Le premier terme de cette expression (3.106)

$$\delta n_1(z) = \frac{\delta G}{z^2} \frac{1}{a} \frac{z + \omega_n^0}{z + d} \quad (\text{A.7})$$

possède la transformation de Laplace inverse suivante (3.107)

$$\delta n_1(t) = \delta G \left[\frac{\lambda_n}{(ad)^2} + \frac{\omega_n^0}{ad} t - \frac{\lambda_n}{(ad)^2} e^{-dt} \right] \quad (\text{A.8})$$

Pour le deuxième terme (3.108)

$$\delta n_2(z) = -\frac{\lambda_p \omega_n^0 \delta G}{a} \frac{1}{z^2} \frac{1}{(z + f_p(z) + \lambda_p)} \frac{1}{(z + d)} \quad (\text{A.9})$$

on choisit le contour d'intégration illustré à la figure 3.6 pour déterminer sa transformation de Laplace inverse

$$\delta n_2(t) = \sum_{\{z_n\}} \text{Res}_{z=z_n} \left\{ e^{zt} \delta n_2(z) \right\} + \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma_c} dz e^{zt} \delta n_2(z) \quad (\text{A.10})$$

Le résidu du pôle **double** en $z_0 = 0$ est calculé analytiquement en utilisant l'expression de $f_p(z)$ donnée pour $z + pb > 0$ (voir équation (3.39)). Son expression est donnée par [56]

$$\text{Res}_{z=z_0} \left\{ e^{zt} \delta n_2(z) \right\} = \frac{d}{dz} \left[(z - z_0)^2 e^{zt} \delta n_2(z) \right]_{z=z_0} \quad (\text{A.11})$$

avec l'expression de $\delta n_2(z)$ en (A.9) et où

$$f_p(z) = z \sqrt{\frac{N_c b}{z + pb}} \left[\pi - 2 \arctg \sqrt{\frac{pb}{z + pb}} \right] \quad (\text{A.12})$$

On obtient (3.68)

$$\text{Res}_{z=z_0} \left\{ e^{zt} \delta n_2(z) \right\} = \frac{a \omega_n^0}{\lambda_p (ad)^2} \delta G \left[\lambda_p + d \left(1 + \frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{N_c}{p}} \right) \right] - \frac{\omega_n^0}{ad} \delta G t \quad (\text{A.13})$$

Le résidu du pôle en $z_1, z_1 \in]-2pb, 0[$ doit être calculé numériquement. On peut l'écrire, sachant (3.68)

$$\text{Res}_{z=z_1} \left\{ e^{zt} \delta n_2(z) \right\} = -\frac{\lambda_p \omega_n^0}{a} \frac{\delta G}{\Psi''(z_1)} \frac{1}{z_1 + d} e^{z_1 t} = -C_1 e^{z_1 t} \quad (\text{A.14})$$

avec
$$\Psi(z) = z^2(z + f_p(z) + \lambda_p) \quad (\text{A.15})$$

et
$$C_1 = \frac{\lambda_p \omega_n^o}{a} \frac{\delta G}{\Psi''(z_1)} \frac{1}{z_1 + d} \quad (\text{A.16})$$

Le résidu du pôle en $z_2, z_2 < -N_c b$ est extrêmement petit et peut être négligé.

$$\text{Res}_{z=z_2} \{ e^{zt} \delta n_2(z) \} \longrightarrow 0 \quad (\text{A.17})$$

Le pôle en $z_3 = -d$ se trouve quant à lui entre $-N_c b$ et $-2pb$. On va devoir l'englober lors de l'intégration autour de la coupure

Coupure

Le chemin d'intégration autour de la coupure est illustré à la figure A.1. L'intégrale à effectuer est la suivante (3.121)

$$\delta n_c(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma_c} dz e^{zt} \delta n_2(z) \quad (\text{A.18})$$

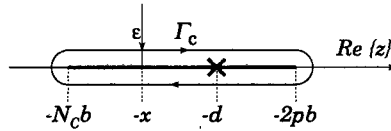


Figure A.1: Chemin d'intégration autour de la coupure et du pôle en $z_3 = -d$.

On évalue $\delta n_c(t)$ pour z juste en dessus et en dessous de la coupure. On pose

$$z = x \pm i\epsilon, \text{ avec } x, \epsilon \in \mathfrak{R} \text{ et } \epsilon \rightarrow 0 \quad (\text{A.19})$$

On sait que l'on peut écrire formellement, pour tenir compte du pôle en $z_3 = -d$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{x + d \pm i\epsilon} = vp \frac{1}{x + d} \mp i\pi \delta(x + d) \quad (\text{A.20})$$

où vp signifie valeur principale. La fonction delta permet de capter la contribution du pôle en $-d$. Alors, $\delta n_2(x \pm i\epsilon)$ s'écrit (3.123)

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \delta n_2(x \pm i\epsilon) = -\frac{\lambda_p \omega_n^o}{a} \left[vp \frac{1}{x + d} \mp i\pi \delta(x + d) \right] \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\delta G}{\Psi(x \pm i\epsilon)} \quad (\text{A.21})$$

On choisit la détermination principale de la fonction logarithme

$$\text{Log}(z) = \text{Log}|z| + i \text{Arg}(z) \quad \text{avec} \quad -\pi < \text{Arg}(z) < \pi \quad (\text{A.22})$$

La fonction de la queue de bande de valence $f_p(z)$ donnée pour $z + pb < 0$ (voir équation (3.40))

$$f_p(z) = z \sqrt{\frac{N_c b}{z + pb}} \text{Log} \left[\frac{z + N_c b}{z + 2pb} \frac{z - 2\sqrt{pb|z + pb|}}{z - N_c b - 2\sqrt{N_c b|z + pb|}} \right] \quad (\text{A.23})$$

Proche de la coupure, elle devient

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} f_p(x \pm i\varepsilon) = x s(x) L_p(x) \mp i \pi x s(x) \quad (\text{A.24})$$

avec
$$s(x) = \sqrt{\frac{N_c b}{x + pb}} \quad (\text{A.25})$$

et
$$L_p(x) = \text{Log} \left| \frac{x + N_c b}{x + 2pb} \frac{x - 2\sqrt{pb|x + pb|}}{x - N_c b - 2\sqrt{N_c b|x + pb|}} \right| \quad (\text{A.26})$$

Ainsi

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \Psi(x \pm i\varepsilon) = x^2 [x + x s(x) L_p(x) + \lambda_p \mp i \pi x s(x)] \quad (\text{A.27})$$

L'intégrale autour de la coupure est donnée par

$$\begin{aligned} \delta n_c(t) &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma_c} dz e^{zt} \delta n_2(z) \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi i} \int_{-N_c b}^{-2pb} dx \left[e^{(x+i\varepsilon)t} \delta n_2(x+i\varepsilon) - e^{(x-i\varepsilon)t} \delta n_2(x-i\varepsilon) \right] \end{aligned} \quad (\text{A.28})$$

Comme

$$\begin{aligned} \delta n_2(x+i\varepsilon) - \delta n_2(x-i\varepsilon) &= \frac{\lambda_p \omega_n^0}{a} \delta G \left[\left(\frac{1}{\Psi(x+i\varepsilon)} - \frac{1}{\Psi(x-i\varepsilon)} \right) v p \frac{1}{x+d} \right. \\ &\quad \left. - \left(\frac{1}{\Psi(x+i\varepsilon)} + \frac{1}{\Psi(x-i\varepsilon)} \right) i \pi \delta(x+d) \right] \end{aligned} \quad (\text{A.29})$$

alors

$$\delta n_c(t) = \frac{\lambda_p \omega_n^o}{a} \delta G \int_{-N_c b}^{-2pb} dx \frac{e^{xt}}{x} \frac{s(x)}{[x + x s(x) L_p(x) + \lambda_p]^2 + [x s(x) \pi]^2} v p \frac{1}{x+d} \quad (\text{A.30})$$

$$- \frac{\lambda_p \omega_n^o}{a} \frac{\delta G}{d^2} \frac{[-d - d s(-d) L_p(-d) + \lambda_p]}{[-d - d s(-d) L_p(-d) + \lambda_p]^2 + [-d s(-d) \pi]^2} e^{-dt}$$

que l'on a écrit formellement (3.124)

$$\delta n_c(t) = -D_3 e^{-dt} + \delta I_c(t) \quad (\text{A.31})$$

On peut donc maintenant regrouper tous les termes que l'on vient de calculer et, sachant que

$$\delta n(t) = \delta n_1(t) + \delta n_2(t), \quad (\text{A.32})$$

et

$$\delta n_2(t) = \sum_{\{z_k\}} \text{Res} \left\{ e^{zt} \delta n_2(z) \right\} + \delta n_c(t) \quad (\text{A.33})$$

exprimer la variation de la densité d'électrons libres

$$\delta n(t) = C_0 - C_1 e^{z_1 t} - C_3 e^{-dt} + \delta I_c(t) \quad (\text{A.34})$$

avec

$$C_0 = \left[\frac{1}{ad} + \frac{\omega_n^o}{\lambda_p ad} \left(1 + \frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{N_c}{p}} \right) \right] \delta G \quad (\text{A.35})$$

$$C_1 = \left[-\frac{\lambda_p \omega_n^o}{a} \frac{1}{\Psi'(z_1)} \frac{1}{z_1 + d} \right] \delta G \quad (\text{A.36})$$

$$C_3 = \left[\frac{a \omega_n^o \lambda_p}{(ad)^2} \frac{[-d - d s(-d) L_p(-d) + \lambda_p]}{[-d - d s(-d) L_p(-d) + \lambda_p]^2 + [-d s(-d) \pi]^2} + \frac{\lambda_n}{(ad)^2} \right] \delta G \quad (\text{A.37})$$

$$\delta I_c(t) = \left[\frac{\lambda_p \omega_n^o}{a} \int_{-N_c b}^{-2pb} dx \frac{e^{xt}}{x} \frac{s(x)}{[x + x s(x) L_p(x) + \lambda_p]^2 + [x s(x) \pi]^2} v p \frac{1}{x+d} \right] \delta G \quad (\text{A.38})$$

B. Calcul des éléments optiques

L'intensité $I(r, z)$ d'un faisceau laser gaussien est donnée par

$$I(r, z) = I(0, z) \exp \left[-2 \left(\frac{r}{w(z)} \right)^2 \right] \quad (\text{B.1})$$

où z : axe de propagation du faisceau;

r : coordonnées dans le plan perpendiculaire à l'axe de propagation

$$r = \sqrt{x^2 + y^2};$$

$I(0, z)$: intensité au centre du faisceau à une distance z sur l'axe de propagation.

A une distance $r = w(z)$ du centre du faisceau, l'intensité diminue d'un facteur $e^{-2} \approx 0.14$. La largeur visuelle apparente du faisceau est estimée à $2w(z)$.

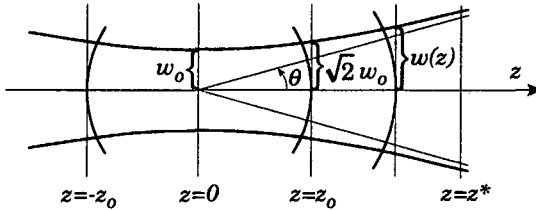


Figure B.1: propagation d'un faisceau gaussien généré par un laser. La sortie du tube laser est en z^* .

En se propageant selon l'axe z , l'intensité du faisceau gaussien diminue

$$I(0, z) = I(0, 0) \left(\frac{w_0}{w(z)} \right)^2 \quad (\text{B.2})$$

et la largeur du faisceau augmente

$$w(z) = w_0 \sqrt{\left(\frac{z}{z_0} \right)^2 + 1} \quad (\text{B.3})$$

où $w_0 = w(z=0)$ est la largeur minimale du faisceau. On parle aussi d'angle de divergence θ lorsque $z \gg z_0$,

$$w(z) = z\theta \quad \text{avec} \quad \theta = \frac{w_0}{z_0} \quad (\text{B.4})$$

Pour un faisceau laser de longueur d'onde λ , on a

$$w_0 = \frac{\lambda}{\pi \theta} \quad (\text{B.5})$$

et donc

$$z_0 = \frac{\lambda}{\pi \theta^2} \quad (\text{B.6})$$

Les caractéristiques de notre laser He-Ne données par le fabricant sont

$$\lambda = 633 \text{ nm}, \theta = 0.55 \text{ mrad} \quad (\text{B.7})$$

et, à la sortie du tube laser, la largeur du faisceau est donnée

$$w(z^*) = 0.4 \text{ mm} \quad (\text{B.8})$$

On trouve ainsi que

$$w_0 = 0.37 \text{ mm} \quad (\text{B.9})$$

$$z_0 = 666 \text{ mm} \quad (\text{B.10})$$

et la sortie du tube laser est à

$$z^* = z_0 \sqrt{\left(\frac{w(z^*)}{w_0}\right)^2 - 1} = 292 \text{ mm} \quad (\text{B.11})$$

Après le laser, une lentille convexe de focale $f = 230 \text{ mm}$ focalise le faisceau sur le centre du modulateur acousto-optique. On place alors le centre du modulateur en $z' = 0$ où la largeur du faisceau w'_0 est minimale. La situation se présente donc comme à la figure B.2.

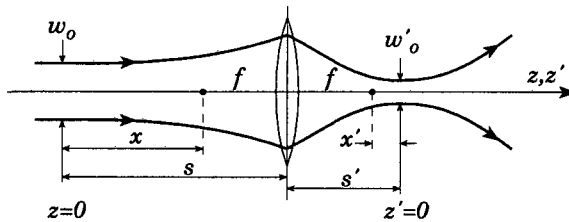


Figure B.2: focalisation d'un faisceau gaussien. Le centre du modulateur se trouve en $z' = 0$ où la largeur du faisceau est minimale et vaut w'_0 .

On place la lentille à une distance de 88 mm de la sortie du laser. Donc

$$s = 292 + 88 = 380 \text{ mm} \quad (\text{B.12})$$

Comme

$$f = 230 \text{ mm} \quad (\text{B.13})$$

alors

$$x = s - f = 150 \text{ mm}. \quad (\text{B.14})$$

Les transformations d'une gaussienne par une lentille sont données par

$$x' = \frac{f^2 x}{x^2 + z_o^2} = 17 \text{ mm} \quad (\text{B.15})$$

$$z'_o = \frac{f^2 z_o}{x^2 + z_o^2} = 76 \text{ mm} \quad (\text{B.16})$$

$$w'_o = \frac{f^2 w_o}{\sqrt{x^2 + z_o^2}} = 0.12 \text{ mm} \quad (\text{B.17})$$

et

$$\theta' = \frac{w'_o}{z'_o} = 1.6 \text{ mrad} \quad (\text{B.18})$$

Le modulateur acousto-optique sera donc placé en $s' = f + x' = 247 \text{ mm}$. La largeur du faisceau évoluera selon

$$w'(z) = w'_o \sqrt{\left(\frac{z'}{z'_o}\right)^2 + 1} \quad (\text{B.19})$$

A la sortie du modulateur de longueur $L = 64 \text{ mm}$, la largeur du faisceau vaut

$$w'(z' = L/2) \approx 1.08 w'_o \quad (\text{B.20})$$

On peut donc estimer qu'elle est presque constante dans le modulateur et que la condition (3) du §5.2 est vérifiée.

Si on place l'échantillon à une distance

$$z' = 1365 \text{ mm} \quad (\text{B.21})$$

alors

$$w'(z') = 2.25 w'_o \quad (\text{B.22})$$

On estime le diamètre apparent du faisceau illuminant la couche de a-Si:H à

$$D = 2w' = 4.5 \text{ mm} \quad (\text{B.23})$$

Lorsque l'angle entre le faisceau incident et la normale au modulateur est égal à l'angle de Bragg, il n'y aura, à la sortie du modulateur, que le faisceau non diffracté et le faisceau diffracté d'ordre 1. La condition de Bragg s'exprime par [59]

$$\sin \frac{\alpha_B}{2} = \frac{\lambda}{2\lambda_a} \quad (\text{B.24})$$

où λ : longueur d'onde optique, $\lambda = 633 \text{ nm}$; λ_a : longueur d'onde acoustique.

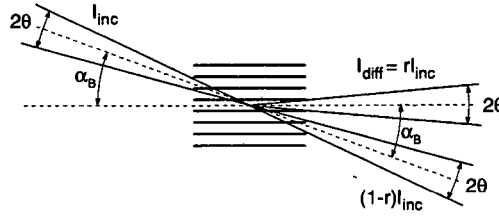


Figure B.3: lorsque le faisceau incident fait un angle égal à l'angle de Bragg avec la normale au modulateur, une proportion \mathcal{R} de l'intensité du faisceau incident est diffractée. \mathcal{R} est appelée réflectance ou efficacité de diffraction. La réflectance \mathcal{R} est une fonction de la puissance de l'onde acoustique.

Comme $\lambda_a = v_a / f_a$ (B.25)

où $v_a = 3.9 \cdot 10^3 \text{ m/s}$ est la vitesse de l'onde acoustique dans le modulateur et $f_a = 40 \text{ MHz}$, la fréquence de celle-ci, alors

$$\alpha_B \equiv \frac{\lambda}{\lambda_a} = 6.5 \text{ mrad} \quad (\text{B.26})$$

On voit que $2\theta' = 3.2 \text{ mrad} < \alpha_B$ (B.27)

Les faisceaux diffracté et non diffracté sont bien séparés et la condition (2) du §5.2 est vérifiée. Le temps de réponse du modulateur est le temps nécessaire à l'onde acoustique pour traverser la largeur du faisceau laser ($2w'_0$) lorsque la puissance acoustique change abruptement. Ce temps de réponse est donc donné par

$$\tau = \frac{2w'_0}{v_a} \approx 60 \text{ ns} \quad (\text{B.28})$$

Plus la largeur du faisceau w'_0 est petite, plus le temps de réponse du modulateur est petit. Il est suffisamment rapide pour notre expérience et la condition (1) du §5.2 est satisfaite.

C. Mesures et ajustements sur des échantillons non dopés

Echantillon: C041094

• Mesures stationnaires

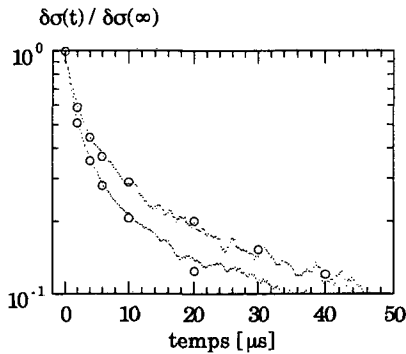
$$d = 2.45 \mu\text{m}$$

$$T = 220^\circ\text{C}$$

$$\gamma = 0.78$$

$\sigma_{ph} [\Omega^{-1} \text{cm}^{-1}]$	$G [\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}]$	$\mu_n^o \tau_n^R [\text{cm}^2/\text{V}]$
$2.1 \cdot 10^{-6}$	$1.6 \cdot 10^{19}$	$0.83 \cdot 10^{-6}$
$4.8 \cdot 10^{-6}$	$4.6 \cdot 10^{19}$	$0.66 \cdot 10^{-6}$

• Mesures transitoires



• Ajustements

$$N_m = 6 \cdot 10^{15} \text{cm}^{-3} eV^{-1} \quad b = 6 \cdot 10^{-9} \text{cm}^3/\text{s} \quad N_c = 1 \cdot 10^{20} \text{cm}^{-3}$$

$n [\text{cm}^{-3}]$	$\lambda_n [\text{s}^{-1}]$	$G [\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}]$
$1.5 \cdot 10^{12}$	$5.3 \cdot 10^6$	$0.8 \cdot 10^{19}$
$2.3 \cdot 10^{12}$	$6.7 \cdot 10^6$	$1.6 \cdot 10^{19}$

$$\Rightarrow \mu_n^o = 4.4 \text{cm}^2/\text{Vs}$$

Echantillon: A040391

• Mesures stationnaires

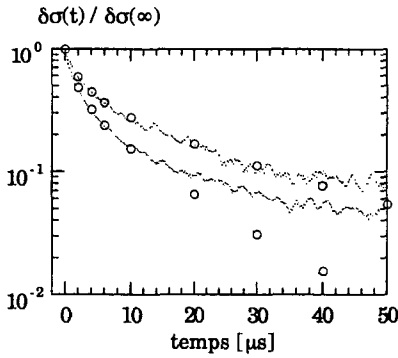
$$d = 1.85 \mu\text{m}$$

$$T = 200^\circ\text{C}$$

$$\gamma = 0.73$$

$\sigma_{ph} [\Omega^{-1} \text{cm}^{-1}]$	$G [\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}]$	$\mu_n^o \tau_n^R [\text{cm}^2/\text{V}]$
$3 \cdot 10^{-6}$	$1.8 \cdot 10^{19}$	$1 \cdot 10^{-6}$
$6.6 \cdot 10^{-6}$	$5.2 \cdot 10^{19}$	$0.8 \cdot 10^{-6}$

• Mesures transitoires



• Ajustements

$$N_m = 8 \cdot 10^{15} \text{cm}^{-3} eV^{-1} \quad b = 6 \cdot 10^{-9} \text{cm}^3/\text{s} \quad N_c = 1 \cdot 10^{20} \text{cm}^{-3}$$

$n [\text{cm}^{-3}]$	$\lambda_n [\text{s}^{-1}]$	$G [\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}]$
$3.1 \cdot 10^{12}$	$5.5 \cdot 10^6$	$1.7 \cdot 10^{19}$
$6.2 \cdot 10^{12}$	$7.5 \cdot 10^6$	$4.7 \cdot 10^{19}$

$$\Rightarrow \mu_n^o = 5.8 \text{cm}^2/\text{Vs}$$

Echantillon: C220192

• Mesures stationnaires

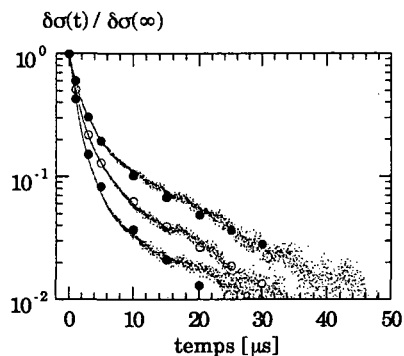
$$d = 3.2 \mu\text{m}$$

$$T = 220^\circ\text{C}$$

$$\gamma = 0.8$$

$\sigma_{ph} [\Omega^{-1} \text{cm}^{-1}]$	$G [\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}]$	$\mu_n^o \tau_n^R [\text{cm}^2/\text{V}]$
$3.5 \cdot 10^{-6}$	$3.3 \cdot 10^{19}$	$0.66 \cdot 10^{-6}$
$6.4 \cdot 10^{-6}$	$6.7 \cdot 10^{19}$	$0.6 \cdot 10^{-6}$
$11 \cdot 10^{-6}$	$13 \cdot 10^{19}$	$0.53 \cdot 10^{-6}$

• Mesures transitoires



• Ajustements

$$N_m = 4 \cdot 10^{15} \text{cm}^{-3} \text{eV}^{-1} \quad b = 6 \cdot 10^{-9} \text{cm}^3/\text{s} \quad N_c = 1 \cdot 10^{20} \text{cm}^{-3}$$

$n [\text{cm}^{-3}]$	$\lambda_n [\text{s}^{-1}]$	$G [\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}]$
$2.2 \cdot 10^{12}$	$8.5 \cdot 10^6$	$1.9 \cdot 10^{19}$
$3.7 \cdot 10^{12}$	$10.5 \cdot 10^6$	$3.9 \cdot 10^{19}$
$6 \cdot 10^{12}$	$13 \cdot 10^6$	$7.8 \cdot 10^{19}$

$$\Rightarrow \mu_n^o = 6.5 \text{cm}^2/\text{Vs}$$

Echantillon: C261094

• Mesures stationnaires

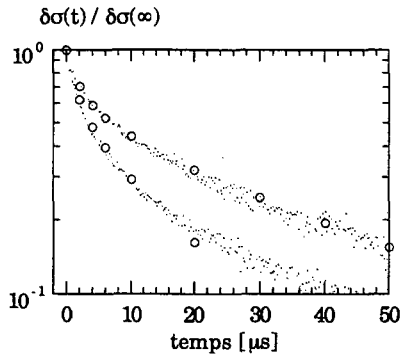
$$d = 2.42 \mu\text{m}$$

$$T = 320^\circ\text{C}$$

$$\gamma = 0.75$$

$\sigma_{ph} [\Omega^{-1} \text{cm}^{-1}]$	$G [\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}]$	$\mu_n^o \tau_n^R [\text{cm}^2/\text{V}]$
$0.73 \cdot 10^{-6}$	$1.5 \cdot 10^{19}$	$0.3 \cdot 10^{-6}$
$1.8 \cdot 10^{-6}$	$4.4 \cdot 10^{19}$	$0.26 \cdot 10^{-6}$

• Mesures transitoires



• Ajustements

$$N_m = 1 \cdot 10^{16} \text{cm}^{-3} \text{eV}^{-1} \quad b = 6 \cdot 10^{-9} \text{cm}^3/\text{s} \quad N_c = 1 \cdot 10^{20} \text{cm}^{-3}$$

$n [\text{cm}^{-3}]$	$\lambda_n [\text{s}^{-1}]$	$G [\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}]$
$2.3 \cdot 10^{12}$	$3.9 \cdot 10^6$	$0.9 \cdot 10^{19}$
$5 \cdot 10^{12}$	$5 \cdot 10^6$	$2.5 \cdot 10^{19}$

$$\Rightarrow \mu_n^o = 5.3 \text{cm}^2/\text{Vs}$$

Echantillon: D140493

• Mesures stationnaires

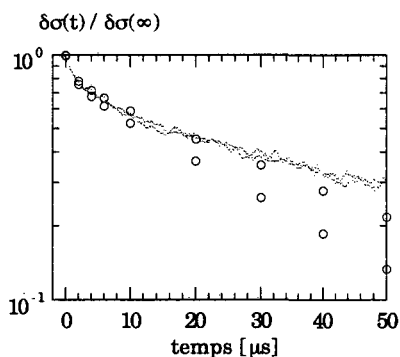
$$d = 2.2 \mu\text{m}$$

$$T = 100^\circ\text{C}$$

$$\gamma = 0.81$$

$\sigma_{ph} [\Omega^{-1} \text{cm}^{-1}]$	$G [\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}]$	$\mu_n^o \tau_n^R [\text{cm}^2/\text{V}]$
$0.27 \cdot 10^{-6}$	$5.6 \cdot 10^{19}$	$3 \cdot 10^{-8}$
$0.36 \cdot 10^{-6}$	$8.2 \cdot 10^{19}$	$2.7 \cdot 10^{-8}$

• Mesures transitoires



• Ajustements

$$N_m = 4 \cdot 10^{16} \text{cm}^{-3} eV^{-1} \quad b = 6 \cdot 10^{-9} \text{cm}^3/\text{s} \quad N_c = 1 \cdot 10^{20} \text{cm}^{-3}$$

$n [\text{cm}^{-3}]$	$\lambda_n [\text{s}^{-1}]$	$G [\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}]$
$5 \cdot 10^{12}$	$4.5 \cdot 10^6$	$2.3 \cdot 10^{19}$
$6.8 \cdot 10^{12}$	$5.4 \cdot 10^6$	$3.7 \cdot 10^{19}$

$$\Rightarrow \mu_n^o = 0.15 \text{cm}^2/\text{Vs}$$