

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique

Thèse
présentée à

L'université de Biskra
Faculté des Sciences et Sciences de l'ingénieur
Département d'Electronique

En vue de l'obtention du
Diplôme de Doctorat en Electronique
Option: Composants à semiconducteur et leurs applications

Par
Tobbeche Souad

Propriétés de photo-transport dans les semiconducteurs amorphes
(exemple typique: le silicium amorphe hydrogéné a-Si:H)

Soutenu le

devant le jury

MM.

N. Sengouga	Pr.	Univ. Biskra	Président
A. Merazga	Pr.	Univ. Biskra	Rapporteur
A. Halmaoui	M.C.	Univ. Bechar	Examineur
A. Benhaya	M.C.	Univ. Batna	Examineur
L. Dehimi	M.C.	Univ. Biskra	Examineur

2005/2006

Résumé

Ce travail est une étude par simulation numérique de la photoconductivité en régime stationnaire et transitoire dans le silicium amorphe hydrogéné a-Si:H. Cette étude permet de déterminer les différents mécanismes de transport, soit la conduction par le processus de "multitrapping" à travers les états étendus, soit par le processus de saut à travers les états localisés de queue de bande. Plusieurs modèles de transport ("multitrapping", saut) dépendent de la température et de la distribution des états des défauts dans ce type de matériau. Dans ce travail, nous avons développé un modèle qui réunit les deux mécanismes de transport de "multitrapping" et de saut dans une simulation numérique de la photoconductivité qui tient compte, des conditions de température, de la densité des états et du mode d'excitation stationnaire ou transitoire.

Le modèle est basé sur la recombinaison dans les états des queues de bandes et des liaisons pendantes. Il prend en considération les transitions de "multitrapping" pour décrire la conduction dans les états étendus et les transitions de saut des porteurs dans les états de queue de bande pour décrire la conduction dans les états localisés. La structure électronique est modélisée par une densité des états des liaisons pendantes calculée selon le modèle de "defect pool" (MDP) et deux densités des états de la queue de bande de conduction (QBC) et de valence (QBV) de formes exponentielles.

En régime transitoire et stationnaire, le mécanisme de transport est décrit par les équations de continuité, les équations de "multitrapping" et l'équation de "multitrapping" associé au processus de saut. La résolution numérique de ces équations conduit au calcul de la photoconductivité en régime stationnaire (PCS) et transitoire (PCT). Les aspects expérimentalement observés dans la variation de la PCS et de l'indice de puissance (γ) avec la température et le dopage sont bien reproduits par le modèle. Les courbes simulées de la PCT, dans le cas des températures moyennes et élevées, pour un échantillon en a-Si:H intrinsèque sont en bon accord avec les mesures expérimentales. Les résultats obtenus de la PCT pour les basses températures, sont comparés aux prédictions qui découlent de l'analyse de Monroe sur la thermalisation des porteurs et le transport dans une distribution des états localisés de forme exponentielle.

Nous avons utilisé la simulation dans l'étude des contributions relatives à la conduction dans les états étendus par le processus de "multitrapping" et la conduction à travers les états localisés par le mécanisme de saut dans la photoconductivité transitoire pour différentes densités des états de la QBC et pour différentes températures. Les contributions des deux mécanismes de transport ("multitrapping", saut) dans la photoconductivité stationnaire en fonction de la température sont aussi examinées. Le modèle que nous avons développé nous permet aussi d'extraire les densités des porteurs de charges, le taux de recombinaison, le niveau de transport, la mobilité...etc qui sont utilisés dans l'interprétation de nos résultats.

Abstract

In this work, we study by computer simulation, the photoconductivity in steady state and transient regime of hydrogenated amorphous silicon (a-Si:H). This study makes it possible to determine the various mechanisms of transport either conduction by multitrapping process through extended states or by the hopping process through localised states of the band tail. Several models of transport (multitrapping, hopping) depend on the temperature and the distribution of defect states in this type of material. In this work, we develop a model which joins together the two mechanisms of multitrapping and hopping transports in a computer simulation of the photoconductivity which takes account, of the temperature conditions, the density of states and the steady or transient excitation mode.

The model is based on recombination at dangling bond states and band tail states. It takes into account the multitrapping transitions to describe conduction in extended states and the hopping transitions to describe conduction in localised states. The density of states includes the exponential density of conduction band tail states (CBT) and valence band tail states (VBT) and the density of dangling bond states which is calculated according to the defect pool model (DPM).

In transient and steady state regimes, the transport mechanism is described by the continuity equations, the multitrapping equations and the multitrapping associated to the hopping process equation. The numerical resolution of these equations leads to the calculation of steady state photoconductivity (SSPC) and transient photoconductivity (TPC). The experimental features observed on the temperature and on the doping dependencies of the SSPC and the power index (γ) are well reproduced by the model. The simulated curves of the TPC, in the average and high temperature case, for an intrinsic a-Si:H, are in agreement with experimental measurements. The results obtained of the low temperature TPC are compared to the predictions of analysis by Monroe for carrier thermalisation and transport in the exponential localised state distribution.

We use the simulation to study the relative contributions of extended state conduction with multitrapping and hopping conduction through the localised states to transient photoconductivity for various densities of CBT states and as a function of temperature. The contributions of the two mechanisms of transport (multitrapping, hopping) to the steady state photoconductivity with the temperature are also examined. The model that we develop, has also allowed us to extract the charge carrier densities, recombination rate, transport level, mobility...etc which are used in the results interpretation.

SOMMAIRE

Dédicace	i
Remerciements	ii
Résumé	iii
Abstract	iv
Sommaire	v
Introduction	2
Chapitre 1: Structure et propriétés électriques du semiconducteur amorphe	5
1.1 Structure du silicium cristallin et amorphe	6
1.2 Propriétés électroniques du silicium amorphe	7
1.2.1 Etats de queue de bande	8
1.2.2 Liaisons pendantes	9
1.3 Préparation du a-Si:H	10
1.4 Mécanismes de transport dans les semiconducteurs amorphes	11
1.4.1 Conduction à travers les états étendus	11
1.4.2 Conduction par saut à travers les états de queue de bande	13
1.4.3 Conduction par saut à travers les états localisés autour du niveau de Fermi	14
Chapitre 2:Modèle "Defect Pool"	15
2.1 Introduction	16
2.2 Concept théorique de la deuxième version du MDP	16
2.3 Calcul de la densité des états $D(E)$	22
Chapitre 3:Photoconductivité	24
3.1 Introduction	25
3.2 Notions élémentaires	25
3.2.1 Génération et recombinaison	25
3.2.2 Recombinaison monomoléculaire et bimoléculaire	30
3.3 Modèle de Rose	31
3.4 Modèle de "multitrapping"	32
3.5 Techniques de photoconductivité	34
3.5.1 Technique de la photoconductivité en régime stationnaire	35
3.5.2 Principe de la technique de la photoconductivité en régime transitoire	37
3.5.3 Résultats de mesure du courant à l'obscurité	38
3.5.4 Résultats de mesure du photocourant à l'état stationnaire	39

3.5.5 Résultats de mesure de la photoconductivité en régime transitoire	41
Chapitre 4: Modélisation de la photoconductivité en régime transitoire et stationnaire	43
4.1 Introduction	44
4.2 Modèle de photoconductivité	44
4.2.1 Densité des états	44
4.2.2 Transitions	46
4.2.3 Taux net de recombinaison des électrons	49
i. Recombinaison sur les états des queues de bande	49
ii. Recombinaison sur les liaisons pendantes	49
4.3 Modélisation de la photoconductivité en régime transitoire	50
4.3.1 Equations du modèle	50
4.3.2 Méthode de résolution	52
4.4 Modélisation de la photoconductivité en régime stationnaire	58
4.4.1 Equations du modèle	58
4.4.2 Méthode de résolution	59
4.5 Calcul de la photoconductivité de saut	61
4.6 Paramètres du modèle	62
Chapitre 5: Résultats et discussions	65
5.1 Introduction	66
5.2 Régime transitoire	66
5.2.1 Description des résultats du modèle	66
5.2.2 Effet de la température sur les processus de conduction ("multitrapping", saut)	68
5.2.3 Interprétation et discussions des résultats	73
5.2.4 Effet de la densité des états sur les processus de conduction ("multitrapping", saut)	92
5.3 Régime stationnaire	96
5.3.1 Description des résultats du modèle	96
5.3.2 Effet de la température sur les processus de conduction ("multitrapping", saut)	97
5.3.3 Interprétation et discussions des résultats	102
5.3.4 Effet du dopage et de l'excitation de la lumière sur la photoconductivité	111
i. Effet du dopage sur le "thermal quenching"	116
Conclusion	120
Références	124
Publications et communications	128