

République Algérienne Démocratique et Populaire

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la  
Recherche Scientifique

**MEMOIRE**

Présenté pour l'obtention du diplôme de :

**MAGISTER**

En Physique

Spécialité

**Matériaux et composants**

Par

**Aicha ALLAG**

Titre

**Simulation numérique des phénomènes transitoires d'une  
structure métal/semiconducteur à base de silicium  
amorphe hydrogéné**

Soutenu publiquement le 10/11/2004,

Directeur de thèse : Mr. Le Professeur **M. AOUCHER**

# SOMMAIRE

<b>Introduction.....</b>	<b>1</b>
<b>Chapitre I: Présentation du matériau.....</b>	<b>4</b>
I.1. Arrangement atomique du silicium amorphe.....	5
I.2. Densité d'états.....	6
I.3. Silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H).....	7
I.4. Conduction dans le a-Si:H.....	7
I.4.1. Conduction dans les états étendus.....	8
I.4.2. Conduction dans les états localisés en queues de bandes.....	8
I.4.3. Conduction par sauts dans les liaisons pendantes.....	9
I.5. Absorption optique du matériau amorphe.....	9
I.5.1. Zone de forte absorption.....	10
I.5.2. Zone de moyenne absorption.....	11
I.5.3. Zone de faible absorption.....	11
<b>Chapitre II: Modélisation des phénomènes transitoires d'une structure à base de a-Si:H.....</b>	<b>12</b>
II.1. Modèle de densité d'états utilisé pour le a-Si:H.....	13
II.1.1. Queues de bandes.....	13
II.1.2. Etats profonds.....	14
II.2. Transport électrique.....	14
II.3. Génération-recombinaison.....	15
II.3.1. Recombinaison sur un centre monovalent.....	15

II.3.1.a. Equilibre thermodynamique.....	17
II.3.1.b. Hors équilibre thermodynamique : cas du régime stationnaire .....	18
II.3.2. Recombinaison sur les queues de bandes .....	19
II.3.2.a. Equilibre thermodynamique.....	20
II.3.2.b. Hors équilibre thermodynamique .....	20
II.3.3. Recombinaison sur les liaisons pendantes .....	23
II.3.3.a. Equilibre thermodynamique.....	24
II.3.3.b. Hors équilibre thermodynamique :régime stationnaire .....	26
II.3.4. Echange de porteurs avec les bandes.....	27
II.3.4.a. Echange d'électrons avec la bande de conduction.....	27
II.3.4.b. Echange de trous avec la bande de valence .....	28
II.4. Transport des porteurs .....	28
II.4.1. Equations de continuité.....	28
II.4.2. Equation de poisson.....	30
<b>Chapitre III: Résolution numérique des équations.....</b>	<b>31</b>
III.1. Structure métal/semiconducteur étudiée.....	33
III.2. Résolution numérique du système d'équations .....	34
III.2.1. Calcul des paramètres à l'équilibre thermodynamique .....	35
III.2.2. Résolution numérique dans le cas du régime stationnaire.....	35
III.2.2.a. Choix des variables.....	36
III.2.2.b. Conditions aux limites.....	36

III.2.2.c. Méthode numérique de résolution .....	39
III.2.2.d. Procédure de résolution .....	39
III.2.2.e. Algorithme de résolution .....	42
III.2.3. Résolution numérique dans le cas du régime transitoire .....	44
III.2.3.a. Procédure de résolution .....	45
III.2.3.b. Solution de départ.....	49
III.2.3.c. Algorithme de résolution .....	49
<b>Chapitre IV: Description des résultats de la simulation numérique.....</b>	<b>51</b>
IV.1. Structure à l'équilibre thermodynamique.....	53
IV.2. Structure métal/a-Si:H en régime stationnaire .....	56
IV.2.1. Structure métal/a-Si:H sous obscurité .....	56
IV.2.1.a. Polarisation négative .....	56
IV.2.1.b. Polarisation positive .....	60
IV.2.2. Caractéristique courant-tension sous obscurité .....	64
IV.2.3. Structure métal/a-Si:H sous éclairnement .....	66
IV.2.3.a. Polarisation négative .....	67
IV.2.3.b. Polarisation positive .....	71
IV.2.4. Caractéristique courant-tension sous lumière .....	75
IV.2.5. Etude de l'influence des paramètres sur la caractéristique .....	77
IV.2.5.a. Influence de l'épaisseur de la structure métal/a-Si:H.....	77
IV.2.5.b. Influence de la température .....	79

IV.2.5.c. Influence de la vitesse de recombinaison à la surface arrière .....	81
IV.2.5.d. Influence des paramètres du matériau .....	85
IV.2.5.e. Influence de la barrière de potentiel métal/a-Si:H.....	87
IV.2.6. Structure métal/a-Si:H en régime transitoire.....	90
IV.2.6.a. Réponse transitoire de la structure métal/a-Si:H.....	90
IV.2.6.b. Etude du transitoire du photocourant .....	99
IV.2.6.c. Influence de l'épaisseur de la structure métal/a-Si:H sur la décroissance du photocourant .....	105
<b>Chapitre V: Discussion.....</b>	<b>109</b>
V.1. Régime stationnaire .....	110
V.1.1. Caractéristique courant-tension sous obscurité .....	110
V.1.2. Caractéristique courant-tension sous lumière.....	110
V.1.3. Effet de quelques paramètres sur la caractéristique courant-tension.....	111
V.1.3.a. Epaisseur de la structure .....	111
V.1.3.b. Effet de la température .....	111
V.1.3.c. Effet de la recombinaison de porteurs à la surface arrière.....	111
V.1.3.d. Effet des paramètres du matériau sur la caractéristique .....	111
V.2. Régime transitoire.....	112
<b>Conclusion.....</b>	<b>113</b>
<b>Références.....</b>	<b>116</b>

# **INTRODUCTION**

Le silicium amorphe hydrogéné se présente comme un matériau prometteur dans les applications technologiques. La possibilité d'obtenir le silicium amorphe en couche mince sur de grandes surfaces par la technique de CVD et la technique de pulvérisation offre un avantage technologique important.

Cependant la présence de défauts dans ce matériau donne naissance à une densité d'états localisés dans la bande interdite. Ceci a rendu parfois difficile l'interprétation de certains phénomènes physiques qui se manifestent dans des structures électroniques. Pour une meilleure compréhension des mécanismes physiques de ce matériau, qui sont liés aux états localisés, plusieurs techniques ont été mises au point pour avoir des informations sur la densité d'états. Parmi ces techniques, on peut citer la technique du transitoire du photocourant (transient photocurrent TPC).

Dans le présent travail, nous nous intéressons à une structure métal/semiconducteur à base silicium amorphe hydrogéné. Nous proposons la résolution numérique de l'équation de Poisson et des équations de continuité des électrons et des trous dans le régime stationnaire et dans le régime transitoire. Dans le régime transitoire, il faut tenir compte des cinétiques qui régissent les échanges des états énergétiques appartenant à la bande interdite avec la bande de conduction et la bande de valence.

La résolution numérique des équations aux dérivées partielles non linéaires couplées est basée sur la méthode des différences finies et la méthode implicite d'Euler. Les propriétés du matériau sont introduites à partir du modèle de densité d'états.

La résolution numérique des équations en régime stationnaire permet d'étudier la structure métal/a-Si:H en examinant la caractéristique courant-tension sous obscurité ou sous lumière. Ainsi, nous pouvons voir l'influence des paramètres sur la caractéristique courant-tension.

Une application de la simulation numérique en régime transitoire est l'étude de la décroissance de la densité de courant de la structure métal/a-Si:H après la rupture de l'éclairement. Nous essayons de relier la décroissance de la densité de courant aux phénomènes de recombinaisons sur les états de la bande interdite.

Notre travail est composé de cinq chapitres :

Dans le chapitre I nous rappelons quelques propriétés du silicium amorphe hydrogéné. Nous donnons le modèle de conduction électrique utilisé dans les matériaux amorphes.

Dans le chapitre II nous décrivons la statistique utilisée pour l'étude de l'occupation des états localisés dans la bande interdite ainsi que l'ensemble des équations qui régissent le transport des porteurs dans le semiconducteur.

Le chapitre III consiste en la présentation de la méthode de calcul numérique pour la résolution des équations en régime stationnaire et en régime transitoire.

Dans le chapitre IV nous exposons les résultats de la simulation numérique basée sur la méthode de résolution numérique présentée dans le chapitre III.

Le chapitre V est consacré à la discussion des résultats obtenus. Finalement, nous concluons ce travail.



# **CHAPITRE I**

## **PRESENTATION DU MATERIAU**

Dans ce chapitre, nous passons en revue quelques propriétés essentielles du silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H). Nous nous intéressons aux propriétés électroniques. Nous présentons les deux principaux modèles de densité d'états proposés pour ce matériau désordonné qui permettent d'expliquer la conduction et les propriétés optiques.

### **I.1. Arrangement atomique du silicium amorphe**

La structure d'un matériau amorphe est caractérisée par un arrangement atomique irrégulier comparée à un matériau cristallin. Ce dernier présente un arrangement régulier d'atomes. L'ordre est ainsi bien établi basé sur une structure cristalline. Pour un semiconducteur amorphe, tel que le silicium amorphe, il y a absence d'ordre à longue distance. A courte distance l'ordre semble être respecté en se basant sur la liaison tétraédrique.

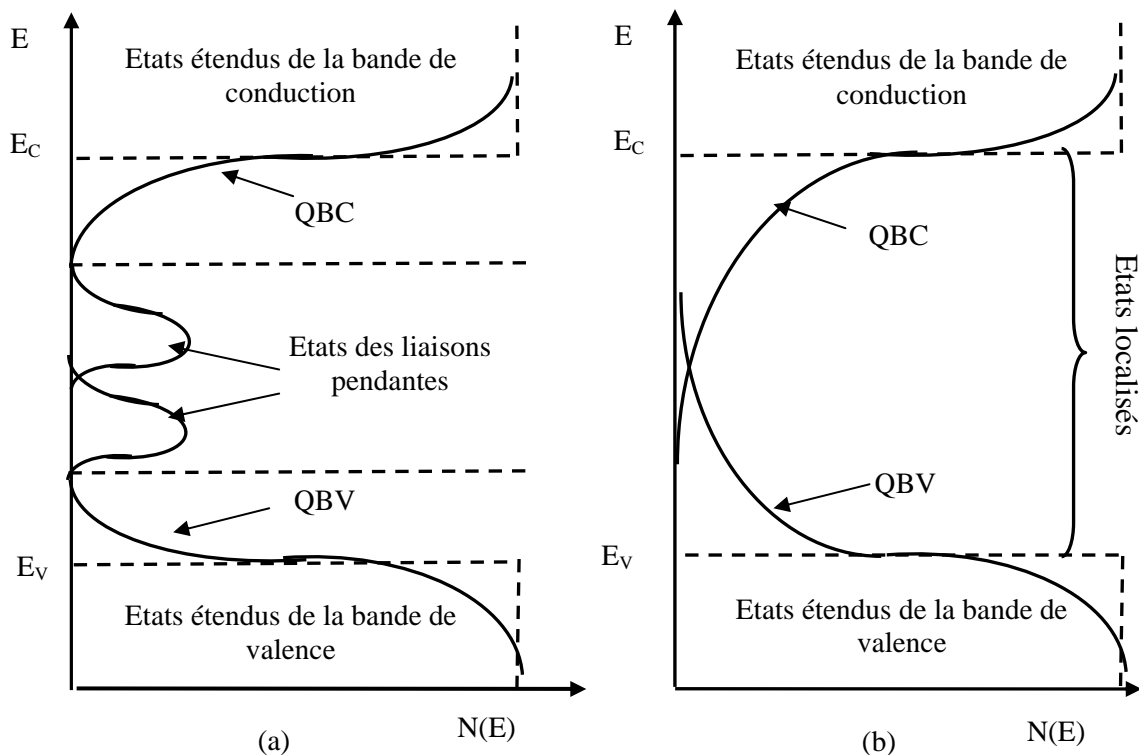
Dans le silicium cristallin, la périodicité spatiale permet d'utiliser le théorème de Bloch. En se basant sur ce théorème, on montre que l'électron dans le cristal ne peut prendre que certaines valeurs d'énergie. Ces énergies se trouvent dans des bandes d'énergies permises, séparées par une bande d'énergies interdites.

L'arrangement atomique pour le silicium amorphe reste décrit par la structure tétraédrique, l'ordre à courte distance se conserve. La perte de l'ordre à longue distance se traduit par l'apparition de défauts dans le matériau. Ces défauts de structure, tel que la distorsion de liaisons, engendrent la présence de liaisons non satisfaites.

La perte de l'ordre à grande distance ne permet pas d'utiliser le théorème de Bloch. Cependant, dans le cadre de l'approximation des liaisons fortes, on montre que l'ordre à courte distance suffit pour conserver la structure globale des bandes d'énergies.

## I.1. Densité d'états

Plusieurs modèles ont été proposés pour décrire la densité d'états dans le cas d'un matériau amorphe. Le premier modèle a été proposé par Mott et Davis [1] en se basant sur les travaux d'Anderson [2] (voir figure (I.1(a))). Ensuite Cohen, Fritzsche et Ovshinsky [3] ont proposé un modèle (CFO) qui tient compte de celui de Mott et Davis en supposant que la densité d'états est constante au voisinage du niveau de Fermi (voir figure (I.1(b))).



**Figure (I.1) :** (a) Modèle de densité d'états proposé par Mott et Davis.

(b) Modèle de densité d'états de CFO.

On distingue des états étendus de mobilité non nulle des états situés entre  $E_C$  et  $E_V$ , qui ont une très faible mobilité [1,4]. Cette différence permet de séparer les états étendus des bandes de conduction et de valence des états énergétiques introduits dans une pseudo-bande interdite appelée gap de mobilité définie pour les semiconducteurs amorphes  $E_g$  tel que  $E_g = E_C - E_V$ .  $E_C$  et  $E_V$  sont appelés seuils de mobilité.

On distingue deux types d'états localisés dans le gap de mobilité.

### A) Etats de queues de bandes

Les états de queues de bandes sont dus au désordre structural et ils se situent à l'intérieur du gap de mobilité et aux voisinages des seuils de mobilités.

### B) Etats profonds

Les états profonds sont dus à l'existence des liaisons pendantes non satisfaites.

## I.2. Silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H)

On trouve expérimentalement la concentration des liaisons non satisfaites de l'ordre de  $10^{20} \text{ cm}^{-3}$  dans le silicium amorphe [5-6]. Cette concentration rend le silicium amorphe sans intérêt en tant que semiconducteur. L'incorporation de l'hydrogène dans le silicium amorphe a pour rôle de saturer des liaisons cassées présentes dans le silicium amorphe. L'hydrogène réduit ainsi la concentration de liaisons pendantes.

## I.3. Conduction dans le a-Si:H

Le transport dans le a-Si:H fait appel au modèle de conduction électrique proposé par Mott [1].

La conductivité électrique sous la forme générale est donnée par:

$$\sigma = q \int_{-\infty}^{+\infty} N(E) \mu(E) f(E) dE \quad (\text{I.3})$$

où  $f(E)$  est la fonction de distribution de Fermi Dirac,  $N(E)$  est la densité d'états donnée par le modèle de Mott et Davis et  $\mu(E)$  est la mobilité exprimée en fonction de l'énergie.

On distingue trois modes de conduction :

- 1) Conduction dans les états étendus.
- 2) Conduction dans les états localisés des queues de bandes.
- 3) Conduction dans les états des liaisons pendantes.

### I.3.1. Conduction dans les états étendus

A haute température  $T > T_1$  (figure (I.2)), le transport des porteurs est dominé par les états étendus, au-dessus du niveau  $E_C$  s'il s'agit des électrons, et en dessous du niveau  $E_V$  s'il s'agit des trous. Dans ce cas la conductivité électrique est donnée par l'expression :

$$\sigma_1(T) = \sigma_{01} \exp\left(-\frac{E_C - E_f}{k_B T}\right) \quad (I.4)$$

$$\text{avec : } \sigma_{01}(T) = q k_B T N(E_C) \mu_n \quad (I.5)$$

où  $q$  est la charge de l'électron,  $k_B$  est la constante de Boltzmann,  $N(E_C)$  est la concentration des états au niveau  $E_C$  et  $\mu_n$  est la mobilité des électrons dans les états étendus du matériau amorphe.

### I.3.2. Conduction dans les états localisés en queues de bandes

La conduction par les états localisés est un processus qui se fait par sauts.

A plus faible température,  $T_2 < T < T_1$  (figure (I.2)), la conduction se fait par sauts due aux électrons situés au niveau  $E_a$  en-dessous du niveau  $E_C$ . La conductivité électrique s'écrit sous la forme :

$$\sigma_2(T) = \sigma_{02} \exp\left(-\frac{E_a - E_f + W}{k_B T}\right) \quad (I.6)$$

$$\text{avec : } \sigma_{02} = q k_B T N_{eff}(E_a) \mu_n \quad (I.7)$$

où  $W$  est l'énergie d'activation de saut,  $N_{eff}(E_a)$  est la concentration effective des états au niveau  $E_a$  autour duquel se fait la conduction.

### I.3.3. Conduction par sauts dans les liaisons pendantes

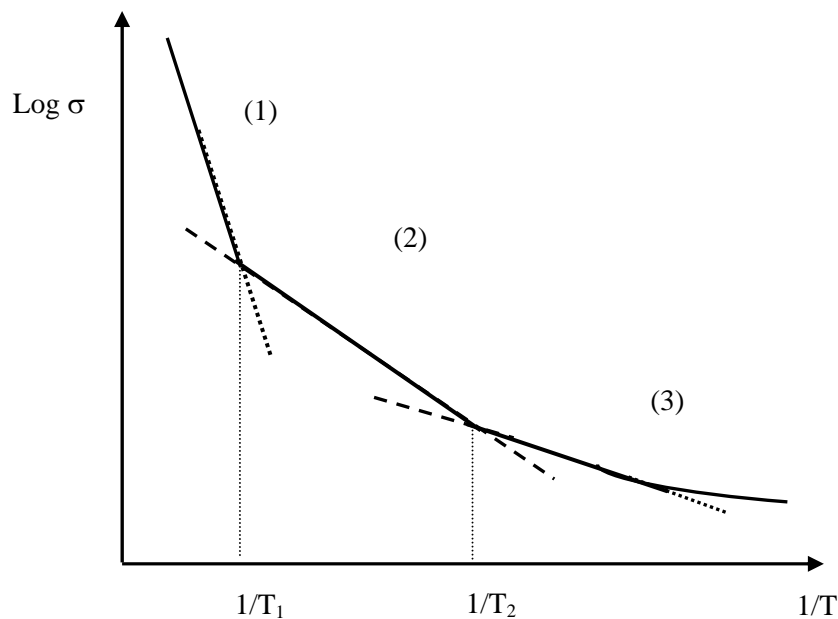
Pour les températures basses  $T < T_2$  ( figure (I.2)), le mécanisme de transport dominant est la conduction par sauts à longue distance entre les niveaux profonds. La conductivité électrique s'écrit alors :

$$\sigma_3(T) = \sigma_{03} \exp\left(-\frac{T_0}{T}\right)^{\frac{1}{4}} \quad (\text{I.8})$$

$\sigma_{03}$  et  $T_0$  sont des constantes liées à la densité d'états au niveau de Fermi.

La conductivité électrique totale est donnée par :

$$\sigma(T) = \sigma_1(T) + \sigma_2(T) + \sigma_3(T) \quad (\text{I.9})$$



**Figure (I.2) :** Conductivité en fonction de la température.

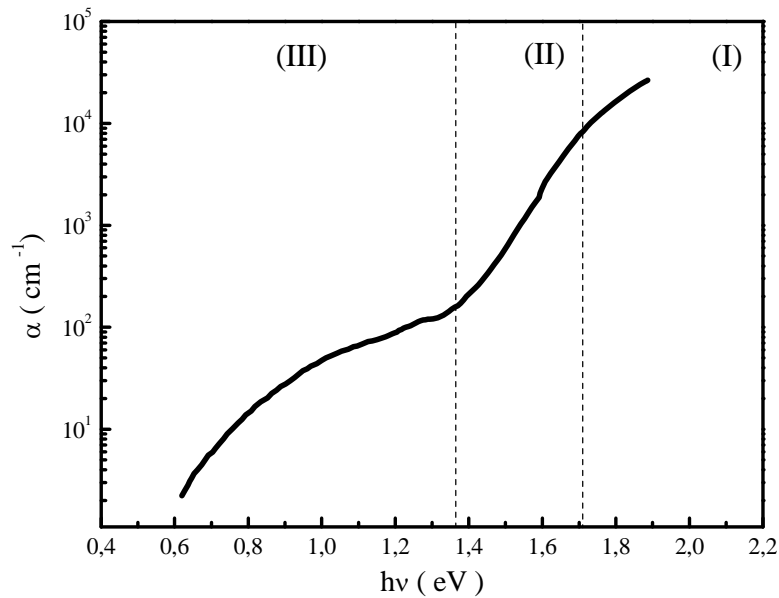
### I.4. Absorption optique du matériau amorphe

Un photon d'énergie  $h\nu$  peut être absorbé s'il peut exciter un électron occupant un état d'énergie  $E$  vers un état non occupé d'énergie  $E + h\nu$ . Ainsi le coefficient d'absorption peut être exprimé par la relation suivante :

$$\alpha(h\nu) \propto \frac{|P|^2}{h\nu} \int_{-\infty}^{+\infty} N(E) f(E) N_c(E+h\nu) dE \quad (\text{I.10})$$

où  $h$  est la constante de Planck,  $\nu$  est la fréquence de la lumière,  $N(E)$  est la densité d'états initiale,  $N_C(E)$  est la densité d'états vide,  $P$  est l'élément de matrice qui traduit l'interaction [7].

Sur la figure (I.3) on montre la variation du coefficient d'absorption en fonction de l'énergie.



**Figure (I.3) :** Coefficient d'absorption optique en fonction de l'énergie d'une couche de a-Si:H.

Ce spectre présente trois régions distinctes : la région de forte absorption ( région I), la région de moyenne absorption ( région II) et la région de faible absorption ( région III).

#### I.4.1. Zone de forte absorption

Les transitions font intervenir les états étendus de la bande de conduction et ceux de la bande de valence ( voir figure (I.4)). Le coefficient d'absorption s'écrit :

$$\alpha(h\nu) \propto \frac{B (h\nu - E_g)^2}{h\nu} \quad (\text{I.11})$$

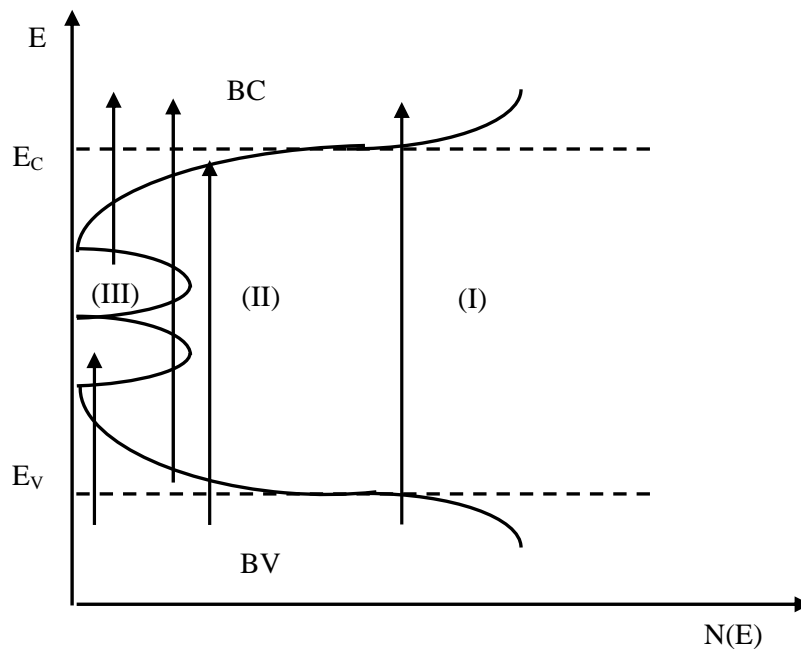
où  $B$  est une constante de proportionnalité et  $E_g$  est le gap optique de Tauc [8].

#### I.4.2. Zone de moyenne absorption

Dans cette région, les transitions se font entre les états des queues de bandes et les états de la bande de valence ou bien ceux de la bande de conduction ( voir figure (I.4) ). Le coefficient d'absorption dans cette zone varie exponentiellement et il est donné par la relation suivante :

$$\alpha(h\nu) \propto \exp\left(\frac{h\nu}{E_0}\right) \quad (\text{I.12})$$

où  $E_0$  est appelée la pente d'Urbach [9].



*Figure (I.4) :* Transitions électroniques intervenant dans l'absorption optique.

#### I.4.3. Zone de faible absorption

Dans cette région les transitions électroniques sont attribuées aux niveaux profonds dans le gap ( voir figure (I.4) ). Ces transitions électroniques font intervenir les défauts profonds et les états de la bande de conduction ou les états de la bande de valence.



**CHAPITRE II**

**MODELISATION DES PHENOMENES**

**TRANSITOIRES D'UNE STRUCTURE A BASE**

**DE a-Si:H**

Dans ce chapitre, nous décrivons la statistique utilisée pour exprimer la probabilité d'occupation, la densité des états localisés, ainsi que la recombinaison des porteurs libres. Ceci est basé sur le modèle standard de densité d'états du a-Si:H. Il s'agit également d'exprimer l'évolution dans le temps des fonctions de distribution des états localisés, ainsi que les équations qui régissent le transport dans le semiconducteur.

## II.1. Modèle de densité d'états utilisé pour le a-Si:H

Nous considérons le modèle de densité d'états communément admis pour le a-Si:H. Dans ce modèle on distingue les bandes d'énergies permises : bande de conduction et bande de valence. Les défauts de structure tel que la distorsion de liaison se traduit par une densité d'état sous forme de queues de bandes. Les liaisons pendantes sont représentées ici par des états d'énergie profonds discrets (voir figure (II.1)).

### II.1.1. Queues de bandes

Il est admis que la densité de ces états décroît exponentiellement du seuil de mobilité vers l'intérieur du gap de mobilité. Leurs densités d'états s'écrivent alors [10-12] :

Pour la queue de bande de conduction (QBC) :

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

Pour la queue de bande de valence (QBV) :

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

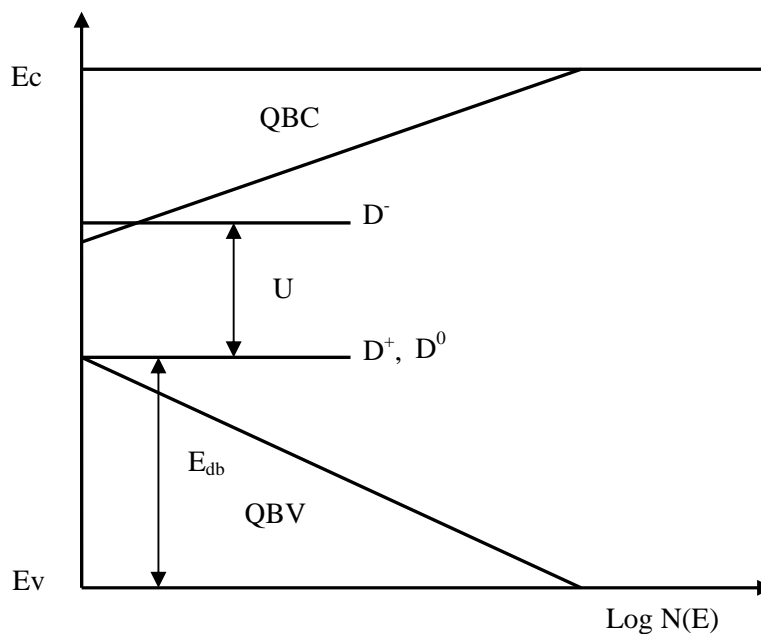
où  $N_{ct}^0$  et  $N_{vt}^0$  sont les densités d'états effectives aux bords de la bande de conduction et de valence,  $k_B T_c$  et  $k_B T_v$  sont respectivement les pentes caractéristiques de la QBC et de la QBV. Expérimentalement, on trouve des valeurs de  $k_B T_v$  comprises entre 45 et 90 meV et des valeurs de  $k_B T_c$  comprises entre 25 et 60 meV.

### II.1.2. Etats profonds

Les états profonds sont dus à l'existence des liaisons pendantes non satisfaites.

La liaison pendante peut avoir trois états de charge possibles. La charge neutre est généralement donnée par le symbole  $D^0$ . Une charge négative, elle est indiquée par le symbole  $D^-$  et une charge positive donnée par  $D^+$ .

L'état  $D^-$  joue un rôle de donneur. Son énergie est élevée par rapport à celle de  $D^{0/+}$  par une énergie  $U$  (voir figure(II.1)) appelée énergie de corrélation. Il est généralement admis que  $U$  est positive [13-14]. Cependant certains auteurs considèrent une valeur négative [15]. Les  $D^+$  et  $D^0$  se situent au même niveau énergétique.



**Figure (II.1):** Modèle de densité d'états du a-Si:H.

où  $E_{db}$  est le niveau d'énergie introduit par la liaison pendante dans les états de charge  $D^0$  ou  $D^+$ .

## II.2. Transport électrique

Les phénomènes de transport et la répartition des charges électriques dans les structures à semiconducteurs sont décrits par l'équation de Poisson et les équations de continuité des électrons et des trous.

Dans des structures à matériaux désordonnés, il est souvent admis que le transport est assuré par des porteurs libres situés dans la bande de conduction pour les électrons et dans la bande de valence pour les trous [16-17]. Les états localisés jouent le rôle de pièges et/ou de centres de recombinaison. Leur contribution au transport par le phénomène de sauts reste très faible surtout lorsque la température est élevée.

Le transport des charges dans une structure à base de a-Si:H tient compte du phénomène de la génération et de la recombinaison des porteurs de charges et des lois fondamentales de transport de ces porteurs de charges dans le matériau.

### II.3. Génération-recombinaison

Pour un matériau homogène, uniformément éclairé, on suppose que chaque photon absorbé produit une paire électron-trou. Le taux de génération des paires dû à l'éclairement à l'abscisse  $x$  s'écrit :

$$g(x) = -\frac{\partial F(x)}{\partial x} = \alpha F \exp(-\alpha x) \quad (\text{II.2})$$

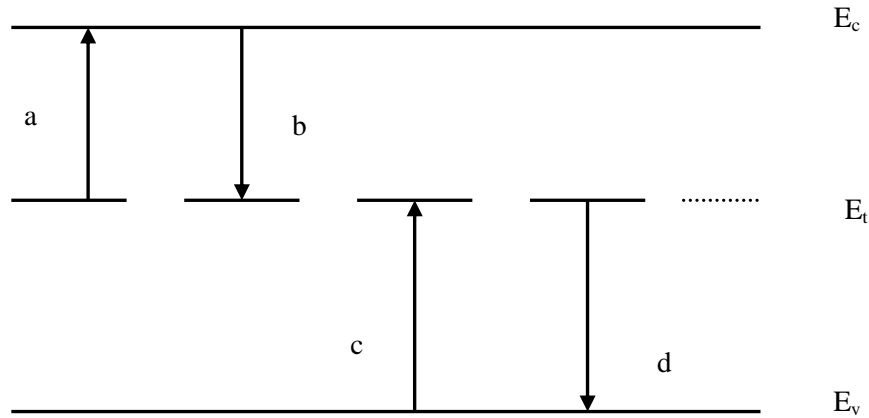
où  $F(x)$  est le flux de photons.

La recombinaison intervient pour équilibrer la génération. Elle peut être directe : transition de la bande de conduction vers la bande de valence, ou indirecte en passant par un centre dont le niveau est situé dans le gap.

La cinétique des échanges d'un porteur entre les différents états d'énergie et les bandes est développée par Shockley, Read et Hall [18]. Cette approche est connue sous le nom de la théorie SRH, qui s'applique aux niveaux discrets dans les semiconducteurs. Cette théorie a été généralisée par Simmons et Taylor [19] pour les semiconducteurs amorphes en se basant sur certaines approximations pour un continuum de niveaux de même type. Ce qui permet d'établir la statistique d'occupation des états localisés.

#### II.3.1. Recombinaison sur un centre monovalent

La statistique de Shockley, Read et Hall permet de décrire l'occupation d'un centre monovalent d'énergie  $E_t$  dans le gap:



**Figure (II.2):** Transitions électroniques pour un centre monovalent selon le modèle de SRH.

Dans ce modèle on trouve quatre transitions possibles dans la recombinaison sur un centre monovalent d'énergie  $E_t$  et de densité  $N_t$  (voir figure(II.2)):

La transition (a) correspond à l'émission d'un électron qui passe d'un centre piège à la bande de conduction.

La transition (b) correspond à la capture d'un électron de la bande de conduction par un centre piège.

La transition (c) correspond à la capture d'un trou de la bande de valence par un centre piège.

La transition (d) correspond à l'émission d'un trou d'un centre piège vers la bande de valence.

Les taux d'échanges des quatre mécanismes sont les suivants :

$$r_{cn} = n C_n N_t (1 - f_t)$$

$$r_{en} = e_n N_t f_t$$

$$r_{cp} = p C_p N_t f_t$$

$$r_{ep} = e_p N_t (1 - f_t)$$

(II.8)

où  $n$  et  $p$  sont les concentrations des électrons et des trous respectivement,  $C_n$  et  $C_p$  sont les coefficients de capture des électrons et des trous respectivement,  $e_n$  et  $e_p$  sont les taux d'émission des électrons et des trous respectivement et  $f_t$  est la fonction de Fermi-Dirac.

Les taux nets de recombinaison des électrons ( $U_n$ ) et des trous ( $U_p$ ) sont donnés respectivement par :

$$\begin{aligned} U_n &= r_{cn} - r_{en} \\ U_p &= r_{cp} - r_{ep} \end{aligned} \quad (\text{II.9})$$

La variation de la concentration du centre occupé par un électron hors équilibre est donnée par :

$$\frac{\partial n_t}{\partial t} = r_{cn} - r_{en} - r_{cp} + r_{ep} = U_n - U_p \quad (\text{II.10})$$

### II.3.1.a. Equilibre thermodynamique

A l'équilibre thermodynamique les taux nets de recombinaison sont nuls. De ce fait, les coefficients d'émission sont reliés aux coefficients de capture par les relations suivantes :

$$e_n = C_n n_i \exp\left[-\frac{(E_c - E_t)}{k_B T}\right] \quad (\text{II.11})$$

$$e_p = C_p n_i \exp\left[\frac{(E_v - E_t)}{k_B T}\right] \quad (\text{II.12})$$

où  $n_i$  est la concentration intrinsèque des porteurs libres dans la bande de conduction et la bande de valence. On pose :

$$n_1 = n_i \exp\left[-\frac{(E_c - E_t)}{k_B T}\right] \quad (\text{II.13})$$

$$p_1 = n_i \exp\left[\frac{(E_v - E_t)}{k_B T}\right]$$

Donc les équations (II.11) et (II.12) deviennent sous la forme :

$$\begin{aligned} e_n &= C_n n_1 \\ e_p &= C_p p_1 \end{aligned} \quad (\text{II.14})$$

On remarque que les relations (II.13) et (II.14) sont indépendantes du niveau de Fermi. De ce fait ces relations restent valables en régime hors équilibre.

### II.3.1.b. Hors équilibre thermodynamique : cas du régime stationnaire

En régime permanent et sous excitation nous avons  $\frac{\partial n_t}{\partial t}=0$ . Les taux de génération-recombinaison sont égaux :  $U_n=U_p$ . On obtient alors la fonction d'occupation hors équilibre thermodynamique d'un centre d'énergie  $E_t$ :

$$f_t = \frac{C_n C_p N_t (n p - n_i^2)}{C_n (n + n_1) + C_p (p + p_1)} \quad (\text{II.15})$$

On en déduit le taux net de recombinaison-génération :

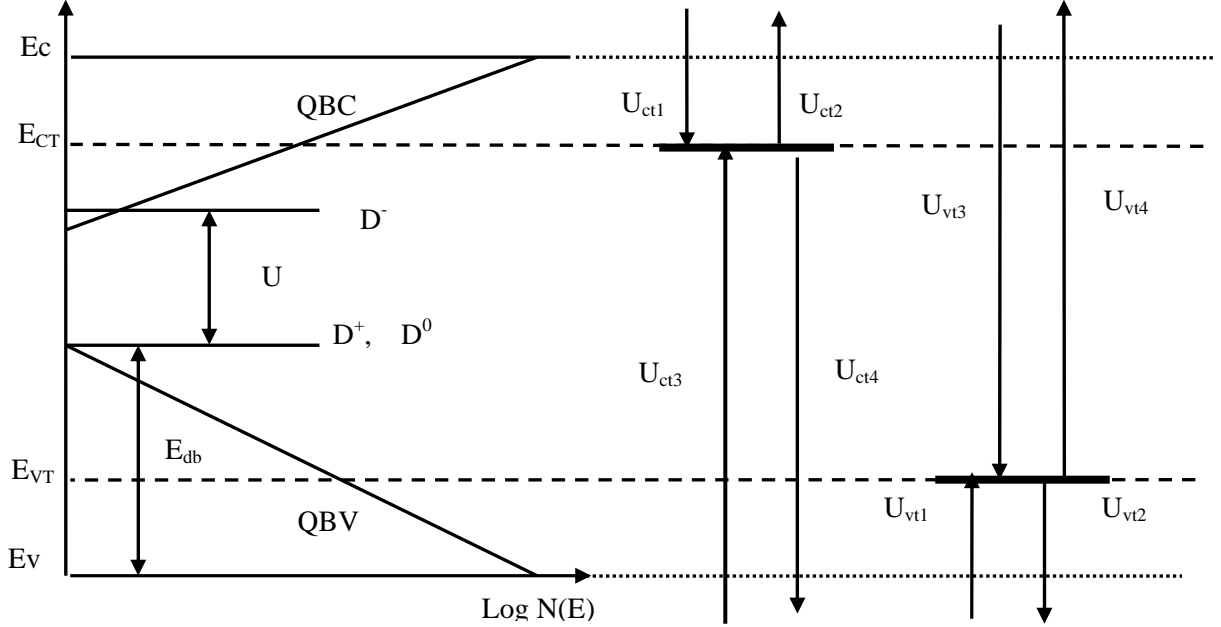
$$U_n = U_p = \frac{C_n C_p (n p - n_i^2)}{C_n (n + n_1) + C_p (p + p_1)} \quad (\text{II.16})$$

Ce résultat est applicable dans le cas d'un continuum d'états localisés. On considère alors les échanges dans les quatre transitions comme suit :

$$\begin{aligned} r_{cn}(E_t) &= n C_n N_t(E_t) [1 - f_t(E_t)] \\ r_{en}(E_t) &= e_n N_t(E_t) f_t(E_t) \\ r_{cp}(E_t) &= p C_p N_t(E_t) f_t(E_t) \\ r_{ep}(E) &= e_p N_t(E) [1 - f_t(E_t)] \end{aligned} \quad (\text{II.17})$$

### II.3.2. Recombinaison sur les queues de bandes

Les états localisés dans les queues de bandes sont considérés comme monovalents et obéissent à la statistique de Shockley, Read et Hall [18]. Cette statistique a été généralisée par Simmons et Taylor [19] dans le cas d'une distribution arbitraire d'états de même type.



**Figure (II.3):** Schéma des transitions électroniques entre les états étendus et les états des queues de bandes.

En conséquence, les taux de capture et d'émission correspondants aux transitions électroniques entre la bande de conduction, la bande de valence et les états de la QBC et de la QBV sont donnés conformément aux transitions électroniques schématisées dans la figure (II.3).

Queue de bande de conduction

$$U_{ct1} = n C_n^{ct}(E_{ct}) N_{ct}(E_{ct}) [1 - f_{ct}(E_{ct})]$$

$$U_{ct2} = e_n^{ct}(E_{ct}) N_{ct}(E_{ct}) f_{ct}(E_{ct})$$

$$U_{ct3} = p C_p^{ct}(E_{ct}) N_{ct}(E_{ct}) f_{ct}(E_{ct})$$

$$U_{ct4} = e_p^{ct}(E_{ct}) N_{ct}(E_{ct}) [1 - f_{ct}(E_{ct})]$$

Queue de bande de valence

$$U_{vt1} = p C_p^{vt}(E_{vt}) N_{vt}(E_{vt}) f_{vt}(E_{vt})$$

$$U_{vt2} = e_p^{vt}(E_{vt}) N_{vt}(E_{vt}) [1 - f_{vt}(E_{vt})]$$

$$U_{vt3} = n C_n^{vt}(E_{vt}) N_{vt}(E_{vt}) [1 - f_{vt}(E_{vt})]$$

$$U_{vt4} = e_n^{vt}(E_{vt}) N_{vt}(E_{vt}) f_{vt}(E_{vt})$$



### II.3.2.a. Equilibre thermodynamique

A l'équilibre thermodynamique, les fonctions d'occupations des queues de bandes de conduction et de valence sont données par la statistique de Fermi-Dirac.

### II.3.2.b. Hors équilibre thermodynamique

Les équations cinétiques qui régissent les transitions électroniques entre la bande de conduction et la bande de valence et les états des queues de bandes sont données par :

$$\frac{\partial n_{ct}(E_{ct})}{\partial t} = U_{ct1} - U_{ct2} + U_{ct4} - U_{ct3}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_{ct}(E_{ct})}{\partial t} = & n C_n^{ct} N_{ct}(E_{ct}) [1 - f_{ct}(E_{ct})] - e_n^{ct}(E_{ct}) N_{ct}(E_{ct}) f_{ct}(E_{ct}) \\ & + e_p^{ct}(E_{ct}) N_{ct}(E_{ct}) [1 - f_{ct}(E_{ct})] - p C_p^{ct} N_{ct}(E_{ct}) f_{ct}(E_{ct}) \end{aligned} \quad (\text{II.18})$$

$$\frac{\partial n_{vt}(E_{vt})}{\partial t} = U_{vt1} - U_{vt2} + U_{vt4} - U_{vt3}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_{vt}(E_{vt})}{\partial t} = & n C_n^{vt} N_{vt}(E_{vt}) [1 - f_{vt}(E_{vt})] - e_n^{vt}(E_{vt}) N_{vt}(E_{vt}) f_{vt}(E_{vt}) \\ & + e_p^{vt}(E_{vt}) N_{vt}(E_{vt}) [1 - f_{vt}(E_{vt})] - p C_p^{vt} N_{vt}(E_{vt}) f_{vt}(E_{vt}) \end{aligned} \quad (\text{II.19})$$

Dans le cas du régime stationnaire nous avons :

$$\frac{\partial n_{ct}(E_{ct})}{\partial t} = 0 \quad \text{et} \quad \frac{\partial n_{vt}(E_{vt})}{\partial t} = 0$$

Ce qui donne la fonction de probabilité d'occupation d'un niveau  $E_x$  :

$$f_x(E_x) = \frac{n C_n^x + p_1(E_x) C_p^x}{C_n^x [n + n_1(E_x)] + C_p^x [p + p_1(E_x)]} \quad (\text{II.20})$$

le symbole x signifie vt pour la QBV et ct pour la QBC.

Comme les distributions d'états de la queue de bande de conduction et de la queue de bande de valence sont considérées sous forme exponentielle données par les expressions suivantes :

$$N_{ct}(E_{ct}) = N_{ct}^0 \exp\left(\frac{E_{ct} - E_c}{k_B T_c}\right) \quad (\text{II.21})$$

$$N_{vt}(E_{vt}) = N_{vt}^0 \exp\left(\frac{E_v - E_{vt}}{k_B T_v}\right) \quad (\text{II.22})$$

la densité de charge totale négative dans la QBC peut être calculée comme suit :

$$Q_{ct} = \int_{E_v}^{E_c} N_{ct}(E_{ct}) f_{ct}(E_{ct}) dE_{ct} \quad (\text{II.23})$$

et la densité de charge totale positive dans la QBV est calculée à partir de :

$$Q_{vt} = \int_{E_v}^{E_c} N_{vt}(E_{vt}) [1 - f_{vt}(E_{vt})] dE_{vt} \quad (\text{II.24})$$

Le taux de recombinaison sur les queues de bandes s'écrit pour la queue de bande de conduction :

$$U_{ct} = \int_{E_v}^{E_c} \frac{N_{ct}(E_{ct}) C_n^{ct} C_p^{ct} (np - n_i^2)}{C_n^{ct} [n + n_1(E_{ct})] + C_p^{ct} [p + p_1(E_{ct})]} dE_{ct} \quad (\text{II.25})$$

et pour la queue de bande de valence

$$U_{vt} = \int_{E_v}^{E_c} \frac{N_{vt}(E_{vt}) C_n^{vt} C_p^{vt} (np - n_i^2)}{C_n^{vt} [n + n_1(E_{vt})] + C_p^{vt} [p + p_1(E_{vt})]} dE_{vt} \quad (\text{II.26})$$

Les expressions (II.23 à 26) peuvent être calculées analytiquement avec certaines approximations [20] et on obtient :

La densité de charge dans la QBC :

$$Q_{ct} = N_{ct}^0 k_B T \exp\left(\frac{E_c - E_v}{2k_B T_c}\right) \frac{\pi}{\sin\left(\pi \frac{T}{T_c}\right)} \left[ \left( \frac{C_n^{ct} n + C_p^{ct} p}{C_p^{ct} n_i} \right)^{\frac{T}{T_c}} + \frac{n}{n_i} \left( \frac{C_n^{ct} n + C_p^{ct} p}{C_n^{ct} n_i} \right)^{\frac{T}{T_c} - 1} \right] \quad (\text{II.27})$$

Et la densité de charge dans la QBV :

$$Q_{vt} = N_{vt}^0 k_B T \exp\left(\frac{E_c - E_v}{2k_B T_v}\right) \frac{\pi}{\sin\left(\pi \frac{T}{T_v}\right)} \left[ \left( \frac{C_n^{vt} n + C_p^{vt} p}{C_p^{vt} n_i} \right)^{\frac{T}{T_v}} + \frac{n}{n_i} \left( \frac{C_n^{vt} n + C_p^{vt} p}{C_n^{vt} n_i} \right)^{\frac{T}{T_v} - 1} \right] \quad (\text{II.28})$$

De même que les taux nets de recombinaison sont :

$$U_x = \frac{C_n^x C_p^x (np - n_i^2)}{C_n^x + C_p^x p} N_x^0 k_B T_x \exp\left[\frac{(-1)^x (E_f - E_x)}{k_B T_x}\right] (-1)^x \left[ \left( \frac{C_n^x + C_p^x p}{C_n^x n_0} \right) + \frac{p}{n_i} \left( \frac{C_n^x + C_p^x p}{C_p^x p_0} \right)^{\frac{T}{T_x}} \right] \quad (\text{II.29})$$

Le symbole x signifie vt pour la queue de bande de valence et ct pour la queue de bande de conduction et :

$$(-1)^x = 1 \text{ si } x \equiv ct \quad \text{et} \quad (-1)^x = -1 \text{ si } x \equiv vt$$

Ces expressions sont valables pour les températures inférieures aux températures caractéristiques  $T_C$  et  $T_V$ .

Pour des températures supérieures aux températures caractéristiques  $T_C$  et  $T_V$ , les densités de charge dans la QBC et la QBV ainsi que les taux de recombinaison  $U_{ct}$  et  $U_{vt}$  sont calculés numériquement.

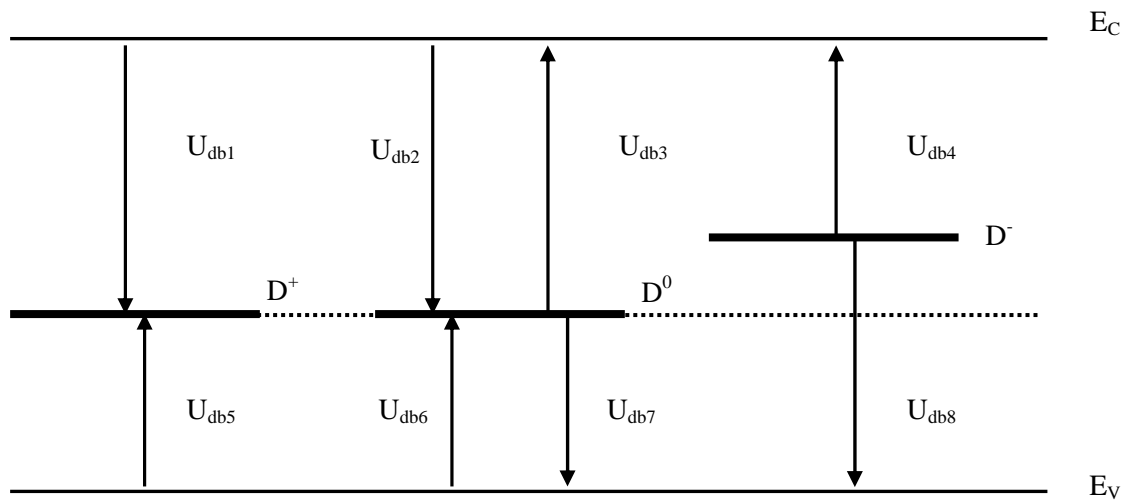
### II.3.3. Recombinaison sur les liaisons pendantes

Sur la figure (II.4) sont indiquées les différentes transitions possibles des électrons et des trous vers les liaisons pendantes.

Les états de charge de la liaison pendante changent selon les possibilités suivantes :  $D^- \Leftrightarrow D^0 + electron$        $D^+ + electron \Leftrightarrow D^0$

$$D^+ \Leftrightarrow D^0 + trou$$

$$D^- + trou \Leftrightarrow D^0$$



**Figure (II.4):** Transitions électroniques entre les états de liaisons pendantes dans les différents états de charges et les états étendus.

En suivant le même raisonnement que pour les pièges monovalents, on trouve les taux de recombinaison pour ces différentes transitions comme suit :

#### Echanges avec la bande de conduction :

$$U_{db1} = n C_n^+ N_{db} f^+ \quad D^+ + electron \Rightarrow D^0 \quad \text{La capture d'un électron par } D^+$$

$$U_{db2} = n C_n^0 N_{db} f^0 \quad D^0 + electron \Rightarrow D^- \quad \text{La capture d'un électron par } D^0$$

$$U_{db3} = e_n^0 N_{db} f^0 \quad D^0 \Rightarrow D^+ + electron \quad \text{L'émission d'un électron par } D^0$$

$$U_{db4} = e_n^- N_{db} f^- \quad D^- \Rightarrow D^+ + electron \quad \text{L'émission d'un électron par } D^-$$

**Echanges avec la bande de valence :**

$$U_{db5} = e_p^+ N_{db} f^+ \quad D^+ \leftrightarrow D^0 + \text{trou} \quad \text{L'émission d'un trou par } D^+$$

$$U_{db6} = e_p^0 N_{db} f^0 \quad D^0 \leftrightarrow D^- + \text{trou} \quad \text{L'émission d'un trou par } D^0$$

$$U_{db7} = p C_p^0 N_{db} f^0 \quad D^0 + \text{trou} \leftrightarrow D^+ \quad \text{La capture d'un trou par } D^0$$

$$U_{db8} = p C_p^- N_{db} f^- \quad D^- + \text{trou} \leftrightarrow D^0 \quad \text{La capture d'un trou par } D^-$$

où  $C_j^i$  et  $e_j^i$  sont les coefficients de capture et les taux d'émission de la liaison pendante dans l'état de charge  $i$  ( $i \equiv D^0, D^-, D^+$ ) pour les électrons ( $j \equiv n$ ) et les trous ( $j \equiv p$ ),  $N_{db}$  est la concentration totale des liaisons pendantes,  $f^+$ ,  $f^0$  et  $f^-$  représentent les probabilités pour que la liaison pendante soit dans l'état  $D^+$ ,  $D^0$  et  $D^-$  respectivement.

**II.3.3.a. Equilibre thermodynamique**

Le calcul des fonctions d'occupation est basé sur les méthodes de la mécanique statistique à partir de la fonction de partition grand canonique [21].

A l'équilibre thermodynamique on obtient :

$$\left\{ \begin{array}{l} f_0^+ = \left[ 1 + 2 \exp \frac{E_{f0} - E_{db}}{k_B T} + \exp \frac{2(E_{f0} - E_{db}) - U}{k_B T} \right]^{-1} \\ f_0^0 = 2 f_0^+ \exp \frac{E_{f0} - E_{db}}{k_B T} \\ f_0^- = f_0^+ \exp \frac{2(E_{f0} - E_{db}) - U}{k_B T} \end{array} \right. \quad (\text{II.30})$$

où  $E_{f0}$  représente le niveau de Fermi à l'équilibre thermodynamique.

La relation entre les taux d'émission et les taux de capture peut être déduite des conditions imposées par le principe des bilans détaillés :

$$U_{db1}=U_{db3}, U_{db2}=U_{db4}, U_{db5}=U_{db7}, U_{db6}=U_{db8}$$

On obtient alors :

$$e_n^0 = n_0 \frac{f_0^+}{f_0} C_n^+ \qquad e_n^- = n_0 \frac{f_0^0}{f_0} C_n^+ \qquad (II.31)$$

$$e_p^0 = p_0 \frac{f_0^-}{f_0} C_p^- \qquad e_n^+ = p_0 \frac{f_0^0}{f_0} C_n^+$$

Hors équilibre thermodynamique, les équations qui donnent la cinétique des échanges avec la liaison pendante s'écrivent :

$$\frac{\partial N_{db}^-}{\partial t} = U_{db2} + U_{db6} - U_{db4} - U_{db8}$$

$$\frac{\partial N_{db}^-}{\partial t} = \left( n C_n^0 + e_p^0 \right) \left[ 1 - f_{db}^+ - f_{db}^- \right] N_{db} - \left( e_n^- + p C_p^- \right) f_{db}^- N_{db} \qquad (II.32)$$

$$\frac{\partial N_{db}^+}{\partial t} = U_{db3} + U_{db7} - U_{db1} - U_{db5}$$

$$\frac{\partial N_{db}^+}{\partial t} = \left( p C_p^0 + e_n^0 \right) \left[ 1 - f_{db}^+ - f_{db}^- \right] N_{db} - \left( e_p^+ + n C_n^+ \right) f_{db}^+ N_{db} \qquad (II.33)$$

$$\frac{\partial N_{db}^0}{\partial t} = - \frac{\partial N_{db}^+}{\partial t} - \frac{\partial N_{db}^-}{\partial t} \qquad (II.34)$$

Cette dernière équation découle du fait que la concentration totale des liaisons pendantes  $N_{db}$  est constante d'où :  $f^0 = 1 - f^+ - f^-$ .

### II.3.3.b. Hors équilibre thermodynamique : régime stationnaire

Le calcul des fonctions de distribution hors équilibre thermodynamique et en régime permanent impose la résolution de  $\frac{\partial N_{db}^-}{\partial t}=0$  et  $\frac{\partial N_{db}^+}{\partial t}=0$  simultanément. Ce qui donne :

$$\begin{cases} f^+ = af^0 \\ f^0 = \frac{1}{1+a+b} \\ f^- = bf^0 \end{cases} \quad (\text{II.35})$$

avec :

$$a = \frac{e_n^0 + pC_p^0}{e_p^+ + nC_n^+} \quad \text{et} \quad b = \frac{e_p^0 + nC_n^0}{e_n^- + pC_p^-} \quad (\text{II.36})$$

Les densités de charges positive et négative dans les liaisons pendantes valent donc :

$$\begin{aligned} Q_{db}^- &= N_{db} f^- \\ Q_{db}^+ &= N_{db} f^+ \end{aligned} \quad (\text{II.37})$$

Le taux de recombinaison global dû à ces états dépend seulement de la concentration des porteurs libres et les coefficients d'émission et de capture.  $U_{db}$  peut se mettre sous la forme :

$$\begin{aligned} U_{db} &= U_{db1} + U_{db2} - U_{db3} - U_{db4} \\ U_{db} &= N_{db} \frac{n C_n^+ a + n C_n^0 - e_n^0 - e_n^- b}{1+a+b} \end{aligned} \quad (\text{II.38})$$

### II.3.4. Echange de porteurs avec les bandes

Le processus d'échange de porteurs entre les états étendus et les états du gap de mobilité dans le cas général dépend du bilan de capture et d'émission des porteurs par la QBC, la QBV et les liaisons pendantes.

#### II.3.4.a.Echange d'électrons avec la bande de conduction

Le taux d'échange d'électrons avec la bande de conduction peut s'exprimer de la manière suivante :

$$U_n = U_{ctn} + U_{vtn} + U_{dbn}$$

Les échanges sont :

avec la queue de bande de conduction :

$$U_{ctn} = \int_{E_{vc}}^{E_c} U_{ct1} dE_{ct} + \int_{E_v}^{E_c} U_{ct2} dE_{ct}$$

$$U_{ctn} = n(t) C_n^{ct} \int_{E_v}^{E_c} N_{ct}(E_{ct}) [1 - f_{ct}(E_{ct}, t)] dE_{ct} + \int_{E_v}^{E_c} \left[ e_n^{ct}(E_{ct}) N_{ct}(E_{ct}, t) f_{ct}(E_{ct}, t) \right] dE_{ct}$$

avec la queue de bande de valence :

$$U_{vtn} = \int_{E_v}^{E_c} U_{ct3} dE_{vt} + \int_{E_v}^{E_c} U_{ct4} dE_{vt}$$

$$U_{vtn} = n(t) C_n^{vt} \int_{E_v}^{E_c} N_{vt}(E_{vt}, t) f_{vt}(E_{vt}, t) dE_{vt} - \int_{E_v}^{E_c} e_n^{vt}(E_{vt}) N_{vt}(E_{vt}) [1 - f_{vt}(E_{vt}, t)] dE_{vt}$$

et avec les liaisons pendantes

$$U_{dbn} = U_{db4} + U_{db3} - U_{db2} - U_{db1}$$

$$U_{dbn} = + e_n^- N_{db} f_{db}^-(t) + e_n^0 N_{db} f_{db}^0(t) - n(t) C_n^0 N_{db} f_{db}^0(t) - n(t) C_n^+ N_{db} f_{db}^+(t)$$



### II.3.4.b. Echange de trous avec la bande de valence

L'échange de trous avec la bande de valence s'exprime comme suit :

$$U_p = U_{ctp} + U_{vtp} + U_{dbp} \quad (\text{II.39})$$

Les différents composantes d'échanges sont :

avec la queue de bande de conduction :

$$U_{ctp} = \int_{E_v}^{E_c} U_{ct3} dE_{ct} + \int_{E_v}^{E_c} U_{ct4} dE_{ct}$$

$$U_{ctp} = p(t) C_p^{ct} \int_{E_v}^{E_c} N_{ct}(E_{ct}, t) f_{ct}(E_{ct}, t) dE_{ct} - \int_{E_v}^{E_c} e_p^{ct}(E_{ct}) N_{ct}(E_{ct}) [1 - f_{ct}(E_{ct}, t)] dE_{ct}$$

avec la queue de bande de valence :

$$U_{vtp} = \int_{E_v}^{E_c} U_{vt1} dE_{vt} + \int_{E_v}^{E_c} U_{vt2} dE_{vt}$$

$$U_{vtp} = p(t) C_p^{vt} \int_{E_v}^{E_c} N_{vt}(E_{vt}) f_{vt}(E_{vt}, t) dE_{vt} + \int_{E_v}^{E_c} \left[ e_p^{vt}(E_{vt}) N_{vt}(E_{vt}, t) [1 - f_{vt}(E_{vt}, t)] \right] dE_{vt}$$

et avec les liaisons pendantes

$$U_{dbp} = U_{db5} + U_{db6} - U_{db8} - U_{db7}$$

$$U_{dbp} = +e_p^+ N_{db} f_{db}^+(t) + e_p^0 N_{db} f_{db}^0(t) - p(t) C_p^- N_{db} f_{db}^-(t) - p(t) C_p^0 N_{db} f_{db}^0(t)$$

## II.4. Transport des porteurs

Le transport et la répartition de charges électriques sont obtenus à partir de la résolution des équations de continuité et de l'équation de Poisson.

### II.4.1. Equations de continuité

L'évolution temporelle et spatiale des concentrations de porteurs est exprimée par les équations de continuités.

Pour les électrons :

$$\frac{\partial n(x,t)}{\partial t} = G_e(x,t) - U_n(x,t) + \frac{1}{q} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_n(x,t) \quad (\text{II.41})$$

Et pour les trous :

$$\frac{\partial p(x,t)}{\partial t} = G_e(x,t) - U_p(x,t) - \frac{1}{q} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_p(x,t) \quad (\text{II.42})$$

Le taux de génération  $G_e$ , et les taux de recombinaison  $U_n$  et  $U_p$  représentent la variation du nombre de porteurs par unité de volume et par unité de temps.

La densité de courant des électrons et la densité de courant des trous sont respectivement :

$$\vec{J}_n(x,t) = q n(x,t) \mu_n \vec{E}(x,t) + q D_n \vec{\nabla} n(x,t) \quad (\text{II.43})$$

$$\vec{J}_p(x,t) = q p(x,t) \mu_p \vec{E}(x,t) - q D_p \vec{\nabla} p(x,t) \quad (\text{II.44})$$

où  $\mu_n$  et  $\mu_p$  sont les mobilités des électrons et des trous.

Les grandeurs  $D_n$  et  $D_p$  sont respectivement le coefficient de diffusion des électrons et des trous donnés par les relation d'Einstein.

$$D_n = \frac{k_B T \mu_n}{q} \quad \text{et} \quad D_p = \frac{k_B T \mu_p}{q} \quad (\text{II.44})$$

A ces deux composantes de densité de courant on rajoute la densité de courant de déplacement due à la variation du potentiel au cours du temps, elle est donnée comme suit :

$$\vec{J}_d(x) = \frac{\partial \vec{D}(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial \varepsilon_{sc} \vec{E}(x,t)}{\partial t} = - \frac{\partial \varepsilon_{sc} \vec{\nabla} V(x,t)}{\partial t} \quad (\text{II.45})$$

$\varepsilon_{sc}$  est la permittivité du semiconducteur, où  $\vec{D}$  est le vecteur de déplacement électrique.

La densité de courant total est alors donnée par :

$$\vec{J}_t(x,t) = \vec{J}_n(x,t) + \vec{J}_p(x,t) + \vec{J}_d(x,t) \quad (\text{II.46})$$

### II.4.2. Equation de poisson

l'équation de Poisson sous sa forme implicite s'écrit :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D}(x,t) = \rho(x,t) \quad (\text{II.47})$$

où  $\rho(x,t)$  est la densité de charge totale.

Le vecteur de déplacement électrique  $\vec{D}$  est relié au champ électrique par :

$$\vec{D}(x,t) = \epsilon_{sc} \vec{E}(x,t)$$

Comme le champ électrique dérive du potentiel, nous avons :

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}V$$

Alors l'équation de Poisson considérée dans un milieu isotrope et homogène s'écrit comme suit :

$$\Delta V(x,t) = -\frac{\rho(x,t)}{\epsilon_{sc}}$$

La densité de charge totale s'exprime sous la forme :

$$\rho(x,t) = q \left[ p(x,t) - n(x,t) + Q_{vt}(x,t) - Q_{ct}(x,t) + Q_{db}^+(x,t) - Q_{db}^-(x,t) \right] \quad (\text{II.48})$$

**CHAPITRE III**

**RESOLUTION NUMERIQUE DES EQUATIONS**

La solution analytique des équations aux dérivées partielles n'est généralement possible que pour des cas simples avec des approximations. Pour la résolution exacte des équations nous avons recours aux méthodes numériques. La première résolution numérique des équations aux dérivées partielles d'une structure unidimensionnelle à semiconducteurs a été suggérée par Gummel [22] en 1964. Elle est suivie d'autres travaux de simulations numériques développés par De Mari [23] et par Sharfetter et Gummel [24] sur les structures à base de semiconducteur.

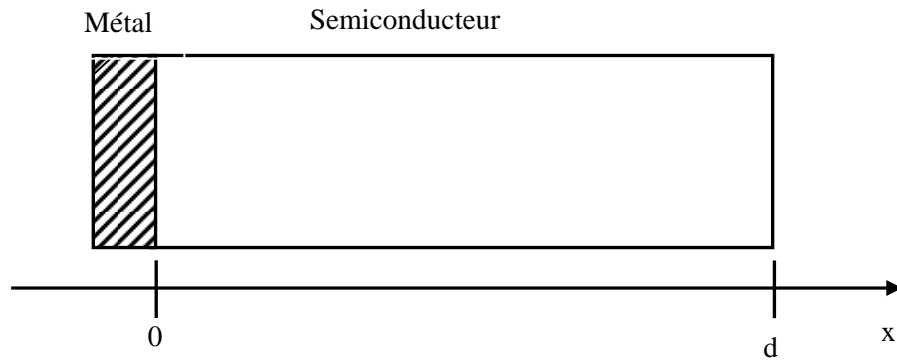
L'objectif de la méthode numérique est de résoudre les équations aux dérivées partielles sur un ensemble discret de points dans le domaine de solution, c'est la discrétisation. Ceci donne un système d'équation dont les inconnues représentent la solution aux différents points de la discrétisation. Le système d'équations peut être résolu par itérations successives.

Les propriétés de transport d'un matériau désordonné sont liées à la densité d'états localisés. Des travaux ont été réalisés pour mesurer cette densité d'états. De multiples techniques basées sur des mesures électriques transitoires ont été utilisées telle que la technique de temps de vol [25-27], le photocourant transitoire (TPC) [28-30]. Ces expériences ont été décrites dans le cadre du modèle de multipliégeage. Elles ont fait l'objet de plusieurs travaux de simulations [31-33]. Dans notre travail nous étudions l'évolution temporelle du photocourant transitoire due à un changement de l'état stationnaire. Ce changement est causé par la rupture de l'éclairement dans le cas une structure métal/semiconducteur.

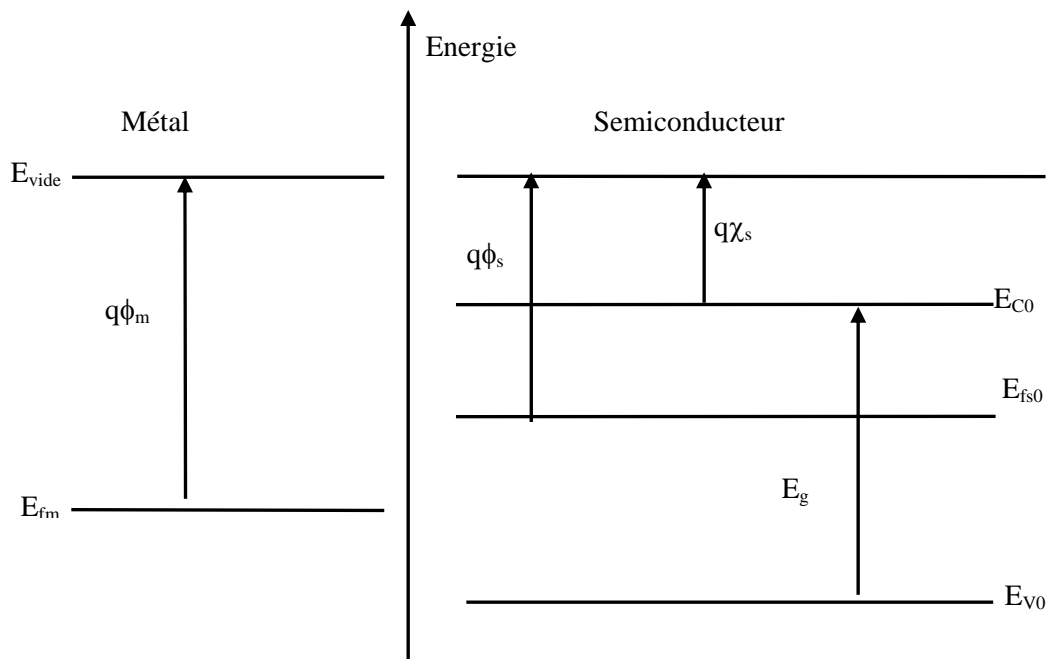
Ce chapitre est consacré à la description de l'approche numérique adoptée pour étudier les phénomènes de transport dans le cas stationnaire et dans le cas transitoire d'une structure métal/semiconducteur à base de a-Si:H. L'approche numérique suivie consiste à résoudre l'équation de Poisson et les équations de continuité. A ces équations on rajoute les équations cinétiques qui régissent les échanges entre la bande de conduction et la bande de valence, et les centres de niveaux d'énergies situés dans le gap de mobilité.

### III.1. Structure métal/semiconducteur étudiée

La structure métal/semiconducteur étudiée comporte un contact entre un métal et un semiconducteur constituant ainsi la face avant. Sur la face arrière on suppose un contact à caractère Ohmique. La figure (III.1) présente la structure à une dimension de variable  $x$ . L'origine des abscisses est prise au contact avant métal/semiconducteur.



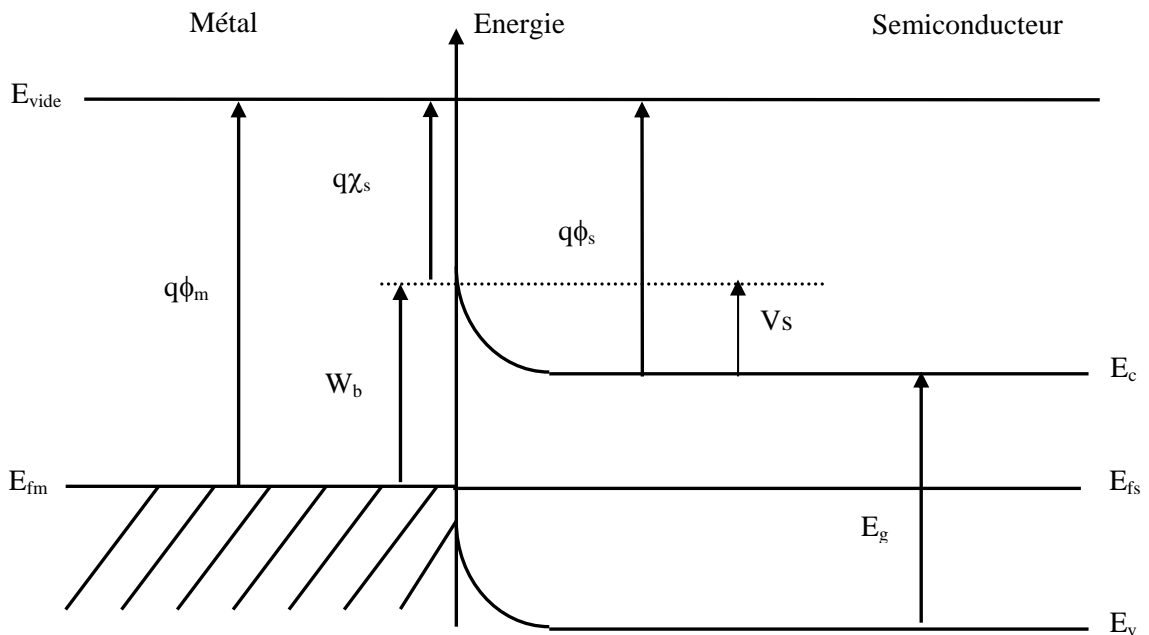
**Figure(III.1)** Structure métal/semiconducteur unidimensionnelle.



**Figure(III.2)** Diagramme des bandes d'énergie, métal et semi-conducteur considérés isolés.

La figure (III.2) présente les digrammes énergétiques des deux matériaux à l'équilibre et isolés. On définit les potentiels d'extraction du métal et du semiconducteur qui sont respectivement  $\phi_m$  et  $\phi_s$ .

Le cas qui nous intéresse dans ce travail est celui d'un contact métal/semiconducteur présentant un effet redresseur dans leur caractéristique courant-tension qui correspond aux potentiels de sortie vérifiant la relation  $\phi_m > \phi_s$ .



**Figure(III.3)** Diagramme des bandes d'énergie à l'équilibre du contact métal/semiconducteur,  $V_s$  est le potentiel de diffusion,  $\chi_s$  est l'affinité électronique et  $W_b$  est la barrière de potentiel.

### III.2. Résolution numérique du système d'équations

Nous avons considéré la résolution dans le cas unidimensionnel. Le principe de résolution numérique d'équations différentielles consiste à utiliser la méthode des différences finies pour passer du problème physique continu au problème numérique discret, ensuite linéariser les équations. Et enfin résoudre le système d'équation par une méthode itérative.

### III.2.1. Calcul des paramètres à l'équilibre thermodynamique

On se sert de l'équation de neutralité pour accéder aux différents paramètres physiques à l'équilibre thermodynamique, en calculant le niveau de Fermi à l'obscurité  $E_{F0}$  :

$$n_0 - p_0 + Q_{ct} - Q_{vt} + Q_{db}^- - Q_{db}^+ = 0 \quad (\text{III.1})$$

### III.2.2. Résolution numérique dans le cas du régime stationnaire

Dans le régime stationnaire, le système d'équation s'écrit de la manière suivante :

Equation de Poisson :

$$-\frac{\partial}{\partial x} \left[ \epsilon_{sc} \frac{\partial V(x)}{\partial x} \right] = q \left[ p(x) - n(x) + Q_{vt}(x) - Q_{ct}(x) + Q_{db}^+(x) - Q_{db}^-(x) \right] \quad (\text{III.2})$$

La concentration des porteurs libres hors équilibre peut être donnée comme suit :

$$n(x) = n_0 \exp \frac{q[V(x) - V_{fn}(x)]}{k_B T} \quad \text{pour les électrons} \quad (\text{III.3})$$

et

$$p(x) = p_0 \exp \frac{q[V_{fp}(x) - V(x)]}{k_B T} \quad \text{pour les trous} \quad (\text{III.4})$$

où  $V_{fn}$  et  $V_{fp}$  sont les potentiels électrochimiques des électrons et des trous respectivement,  $n_0$  et  $p_0$  sont les concentrations des électrons et des trous à l'équilibre thermodynamique.

Equations de continuité :

$$G_e(x) - U_n(x) + \frac{1}{q} \frac{\partial}{\partial x} J_n(x) = 0 \quad (\text{III.5})$$

$$G_e(x) - U_p(x) - \frac{1}{q} \frac{\partial}{\partial x} J_p(x) = 0 \quad (\text{III.6})$$



Avec :

$$J_n(x) = -q n(x) \mu_n \frac{\partial}{\partial x} V_n(x) \quad (\text{III.7})$$

$$J_p(x) = -q p(x) \mu_p \frac{\partial}{\partial x} V_p(x)$$

Le courant de déplacement étant nul, la densité de courant total s'écrit :

$$J_t(x) = J_n(x) + J_p(x) \quad (\text{III.8})$$

### III.2.2.a. Choix des variables

Nous allons résoudre un système d'équations aux dérivées partielles fortement non linéaire. Les inconnues sont le potentiel électrostatique, la concentration des électrons et la concentration des trous. Le problème sera d'autant plus compliqué que ces inconnues sont d'échelles très différentes. Ceci nous ramène à choisir d'autres variables ayant le même ordre de grandeurs. Il s'agit des trois variables suivantes : le potentiel électrostatique  $V(x)$ , le potentiel électrochimique des électrons  $V_n(x)$  et le potentiel électrochimique des trous  $V_p(x)$ . On peut aussi considérer  $V(x)$ , le quasi-niveau de Fermi des électrons  $E_{fn}(x)$  et le quasi-niveau de Fermi des trous  $E_{fp}(x)$  avec :

$$\begin{aligned} E_{fn}(x) &= -q V_n(x) \\ E_{fp}(x) &= -q V_p(x) \end{aligned} \quad (\text{III.9})$$

### III.2.2.b. Conditions aux limites

La résolution d'un système d'équations différentielles nécessite la connaissance des conditions aux limites. Dans notre cas, les limites de la structure sont le contact avant assuré par la jonction métal/semiconducteur, et le contact arrière par le contact Ohmique qui peut être caractérisé par la vitesse de recombinaison en surface [34].

### III.2.2.b.1 Contact avant : Jonction métal/semiconducteur

#### Equation de poisson

Sous polarisation, le potentiel à l'interface ( $x=0$ ) est la tension de diffusion  $V_s$  modifié de la tension appliquée :

$$V = V_s + V_{app} \quad (\text{III.10})$$

#### Equations de continuité

Les équations de continuité des électrons et des trous sont conditionnées par le courant des porteurs libres à l'interface. Le transport des électrons et des trous à travers la jonction est contrôlé par l'interface métal/semiconducteur. Nous sommes ici dans le cas de l'émission thermoionique. Les électrons (trous) arrivent sur l'interface métal/semiconducteur avec une vitesse thermique  $V_{thn}$  ( $V_{thp}$ ).

En effet, au contact avant, la concentration des électrons  $n_0$  (trous  $p_0$ ) à l'équilibre thermodynamique est modifiée par rapport à celle du volume du fait de la différence de potentiel  $V_s$  existant entre le contact avant du semiconducteur et le volume. La concentration des électrons (trous) en accumulation au contact avant à l'équilibre est :  $n_0 \exp\left(\frac{V_s}{k_B T}\right)$  ( $p_0 \exp\left(\frac{-V_s}{k_B T}\right)$ ).

Le courant qui traverse l'interface du métal vers le semiconducteur est donné par :

$$J_{sm} = q V_{thn} n(0)$$

Le courant qui traverse l'interface du semiconducteur vers le métal est donné

par :

$$J_{ms} = q V_{thn} n_0 \exp\left(\frac{V_s}{k_B T}\right)$$

De ce fait le courant dû aux électrons résultant à l'interface est le suivant :

$$J_{ni} = J_{sm} - J_{ms} \quad (\text{III.11})$$

$$\text{donc } J_{ni} = q V_{thn} \left[ n(0) - n_0 \exp\left(\frac{V_s}{k_B T}\right) \right] \quad (\text{III.12})$$

$$\text{avec } V_{thn} = \sqrt{\frac{k_B T q}{m_n 2 \pi}}$$

où  $m_n$  est la masse effective de l'électron.

Le même raisonnement est fait pour les trous et nous trouvons :

$$J_{pi} = -q V_{thp} \left[ p(0) - p_0 \exp\left(\frac{-V_s}{k_B T}\right) \right] \quad (\text{III.13})$$

$$\text{avec } V_{thp} = \sqrt{\frac{k_B T q}{m_p 2 \pi}}$$

où  $m_p$  est la masse effective du trou.

### III.2.2.b.2 Contact arrière : contact ohmique ( $x=d$ )

#### Equation de Poisson

On considère au contact ohmique la densité de charge électrique nulle.

#### Equations de continuité

La recombinaison des porteurs libres se fait avec une certaine vitesse qu'on appelle la vitesse de recombinaison. Le courant de recombinaison au contact arrière pour les électrons et les trous est donc:

$$J_{ns} = -q S_n [n(d) - n_0] \quad (\text{III.14})$$

$$J_{ps} = q S_p [p(d) - p_0] \quad (\text{III.15})$$

où  $S_n$  et  $S_p$  sont les vitesses de recombinaison des électrons et des trous respectivement à la surface.

### III.2.2.c. Méthode numérique de résolution

Les méthodes numériques sont basées sur la discrétisation des équations aux dérivées partielles sur les nœuds du maillage. Nous adoptons la méthode découplée développée par Gummel [22].

### III.2.2.d. Procédure de résolution

#### III.2.2.d.1 Discrétisation spatiale des équations

La discrétisation spatiale est basée sur le développement de Taylor,

La dérivée au premier ordre est donnée par l'approximation suivante :

$$\frac{\partial f(x_i)}{\partial x} \approx \frac{f(x_i-h) - f(x_i+h)}{2h} \quad (\text{III.16})$$

l'approximation de la dérivée au second ordre est donnée par :

$$\frac{\partial^2 f(x_i)}{\partial x^2} \approx \frac{f(x_i+h) - 2f(x_i) + f(x_i-h)}{h^2} \quad (\text{III.17})$$

Par la suite, dans le but de simplifier la notation, on repère les grandeurs aux nœuds par les indices correspondants.

#### III.2.2.d.2 Linéarisation des équations

L'équation de Poisson et les équations de continuité des électrons et des trous sont des équations fortement non linéaires en raison de la présence des termes exponentiels.

Nous avons adopté la méthode de résolution de Gummel. Chacune des équations considérées est discrétisée et linéarisée séparément des autres équations.

Equation de Poisson :

$$\frac{\partial^2 V(x)}{\partial x^2} = -\frac{q}{\epsilon_{sc}} \left[ p(x) - n(x) - Q_{ct}(x) + Q_{vt}(x) + Q_{db}^+(x) - Q_{db}^-(x) \right] \quad (\text{III.18})$$

En appliquant les formules de dérivées (III.16 et 17), on obtient l'équation de Poisson discrétisée :

$$V_{i+1} - 2V_i + V_{i-1} = -h^2 \frac{q}{\varepsilon_{sc}} \rho_i \quad (\text{III.19})$$

Dans le but d'avoir une meilleure précision, nous avons considéré dans les formules de dérivées le développement de Taylor au quatrième ordre. Dans ce cas l'équation de Poisson s'écrit :

$$V_{i+1} - 2V_i + V_{i-1} = -h^2 \frac{q}{12 \varepsilon_{sc}} [\rho_{i+1} + 10 \rho_i + \rho_{i-1}] \quad (\text{III.20})$$

La linéarisation se fait par rapport au potentiel électrostatique pour l'équation de Poisson. En utilisant l'approximation suivante :  $V = V_0 + \delta V$  et en supposant que  $V_n$  et  $V_p$  sont vraies, l'équation de Poisson discrétisée et linearisée au point  $i$  (après avoir réarrangé les termes faisant intervenir  $\delta V$ ) est sous la forme :

$$A_{vi} \delta V_{i+1} - B_{vi} \delta V_i + C_{vi} \delta V_{i-1} = Y_{vi} \quad (\text{III.21})$$

Avec :

$$Y_{vi} = -V_{i+1} + 2V_i - V_{i-1} - [\rho_{i+1} + 10 \rho_i + \rho_{i-1}] \quad (\text{III.22})$$

$$A_{vi} = 1 + d \rho_{i+1} \quad (\text{III.23})$$

$$B_{vi} = 2 - 10 \rho_i \quad (\text{III.24})$$

$$C_{vi} = 1 - d \rho_{i-1}. \quad (\text{III.25})$$

Le calcul est effectué de  $i=0$  jusqu'à  $i=N$ , d'où le domaine d'étude est formé de  $(N+1)$  points. Les valeurs du potentiel sur les frontières du domaine correspondent aux conditions aux limites. De ce fait, le calcul porte sur  $(N-1)$  points.

L'équation (III.21) est donnée en fonction des positions  $i+1$ ,  $i$  et  $i-1$ . Elle forme un système sous la forme  $Y=[M]X$ . La représentation matricielle de ce système est :

$$\begin{bmatrix} -B_{V1} & C_{V1} & 0 & 0 & & & \\ A_{V2} & -B_{V2} & C_{V2} & 0 & & & \\ 0 & A_{V3} & -B_{V3} & C_{V3} & & & \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & 0 & A_{VN-2} & -B_{VN-2} & C_{VN-2} & \\ & & 0 & 0 & A_{VN-1} & -B_{VN-1} & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta V_1 \\ \delta V_2 \\ \delta V_3 \\ \cdot \\ \delta V_{N-2} \\ \delta V_{N-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} V_1 \\ V_2 \\ V_3 \\ \cdot \\ V_{N-2} \\ V_{N-1} \end{bmatrix}$$

Avec les équations écrites aux limites ( $i=0$  et  $i=N$ ), on obtient un système d'équations à  $(N+1)$  inconnues. La forme tridiagonale de la matrice permet la résolution de ce système par la méthode du double balayage [35].

#### Equation de continuité des électrons

Les mêmes étapes sont suivies pour la discrétisation et la linearisation de l'équation de continuité des électrons. Ceci nous permet d'écrire l'équation des électrons discrétisée et linéarisée :

$$A_{ni} \delta V_{ni+1} - B_{ni} \delta V_{ni} + C_{ni} \delta V_{ni-1} = Y_{ni} \quad (\text{III.26})$$

Avec les coefficients :

$$\begin{aligned} Y_{ni} = & -V_{ni+1} + 2V_{ni} - V_{ni-1} - \frac{q}{k_B T} (V_{ni+1} - V_{ni-1}) (V_{i+1} - V_{i-1} - V_{ni+1} - V_{ni-1}) \\ & - \frac{q}{\mu_n n_i k_B T} (U_{ni} - G_{ei}) \end{aligned} \quad (\text{III.27})$$

$$A_{ni} = 1 + \frac{q}{4k_B T} [V_{i+1} - V_{i-1} - 2(V_{ni+1} - V_{ni-1})] \quad (\text{III.28})$$

$$B_{ni} = 2 + [n_i dU_{ni} - (U_{ni} + G_{ei})] \frac{qh^2}{n_i k_B T} \quad (\text{III.29})$$

$$C_{ni} = 1 - \frac{q}{4k_B T} [V_{i+1} - V_{i-1} - 2(V_{ni+1} - V_{ni-1})] \quad (\text{III.30})$$

Equation de continuité des trous

De façon similaire on obtient l'expression de l'équation de continuité des trous discrétisée et linéarisée :

$$A_{p_i} \delta V_{p_{i+1}} - B_{p_i} \delta V_{p_i} + C_{p_i} \delta V_{p_{i-1}} = Y_{p_i} \quad (\text{III.31})$$

Avec les coefficients :

$$Y_{p_i} = -V_{p_{i+1}} + 2V_{p_i} - V_{p_{i-1}} - \frac{q}{k_B T} (V_{p_{i+1}} - V_{p_{i-1}}) (V_{p_{i+1}} - V_{p_{i-1}} - V_{i+1} + V_{i-1}) \\ - \frac{q}{\mu_n p_i k_B T} (U_{p_i} - G_{e_i}) \quad (\text{III.32})$$

$$A_{p_i} = 1 + \frac{q}{4k_B T} [V_{i-1} - V_{i+1} - 2(V_{p_{i-1}} - V_{p_{i+1}})] \quad (\text{III.33})$$

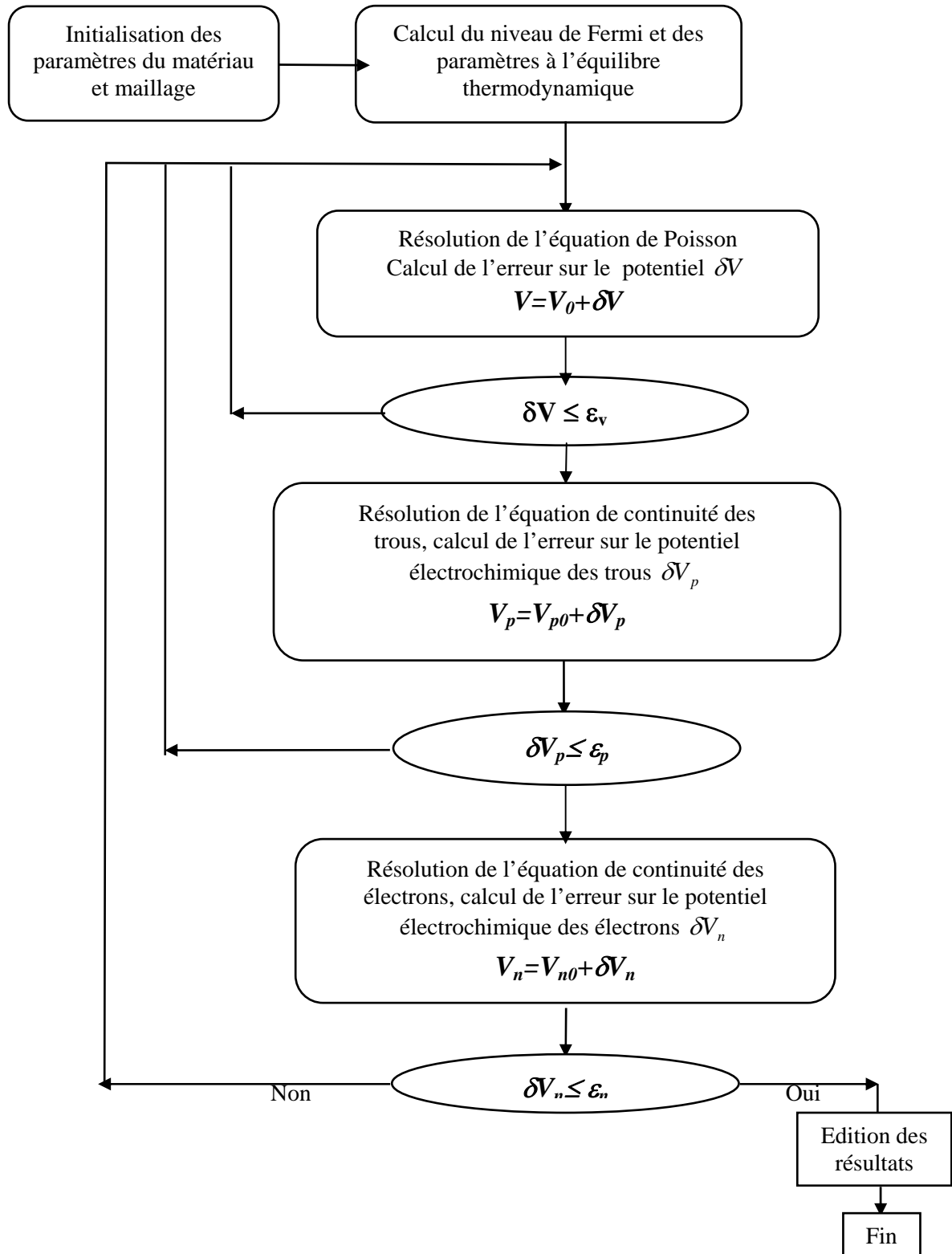
$$B_{p_i} = 2 + \left[ p_i dU_{p_i} - (U_{p_i} + G_{e_i}) \right] \frac{qh^2}{n_i k_B T} \quad (\text{III.34})$$

$$C_{p_i} = 1 - \frac{q}{4k_B T} [V_{i-1} - V_{i+1} - 2(V_{p_{i-1}} - V_{p_{i+1}})] \quad (\text{III.35})$$

Les corrections  $\delta V$ ,  $\delta V_n$  et  $\delta V_p$  sont les inconnues du système d'équations linéaire. Elles sont données en fonction de  $V_0$ ,  $V_{n0}$  et  $V_{p0}$  tel que :  $V = V_0 + \delta V$ ,  $V_n = V_{n0} + \delta V_n$  et  $V_p = V_{p0} + \delta V_p$ . Ceci nous permet d'obtenir une meilleure approximation de la solution finale de  $V(x)$ ,  $V_n(x)$  et  $V_p(x)$ .

**III.2.2.e. Algorithme de résolution**

La résolution des équations s'effectue en introduisant les paramètres du matériau et du maillage. Nous calculons les paramètres à l'équilibre thermodynamique avant de résoudre l'équation de Poisson. Nous résolvons ensuite l'équation de continuité des trous et enfin l'équation de continuité des électrons. Le processus de calcul est répété jusqu'à ce que les corrections  $\delta V$ ,  $\delta V_n$  et  $\delta V_p$  sont inférieurs aux limites données respectivement  $\varepsilon_v$ ,  $\varepsilon_n$  et  $\varepsilon_p$ . L'algorithme du programme utilisé est schématisé par l'organigramme de la figure (III.4).



**Figure(III.4)** Organigramme de résolution des trois équations dans le cas stationnaire.



### III.2.3. Résolution numérique dans le cas du régime transitoire

Dans le régime transitoire, l'évolution des porteurs libres est décrite par les équations de continuité des électrons et des trous. L'équation de Poisson calcule le potentiel électrostatique à un instant  $t$  donné.

Equations de continuité :

$$\frac{\partial n(x,t)}{\partial t} = G_e(x,t) - U_n(x,t) + \frac{1}{q} \frac{\partial}{\partial x} J_n(x,t) \quad (\text{III.36})$$

$$\frac{\partial p(x,t)}{\partial t} = G_e(x,t) - U_p(x,t) - \frac{1}{q} \frac{\partial}{\partial x} J_p(x,t) \quad (\text{III.37})$$

Avec :

$$J_n(x,t) = -q n(x,t) \mu_n \frac{\partial}{\partial x} V_n(x,t) \quad (\text{III.38})$$

$$J_p(x,t) = -q p(x,t) \mu_p \frac{\partial}{\partial x} V_p(x,t) \quad (\text{III.39})$$

$$J_d = -\varepsilon_{sc} \frac{\partial^2 V(x,t)}{\partial t \partial x} \quad (\text{III.40})$$

$$J_t(x,t) = J_n(x,t) + J_p(x,t) + J_d(x,t) \quad (\text{III.41})$$

On associe à ce système l'ensemble des équations régissant la cinétique des états localisés:

$$\frac{\partial f_{ct}}{\partial t} = p(x,t) C_p^{ct} f_{ct} - e_p^{ct} (1 - f_{ct}) + e_n^{ct} (1 - f_{ct}) - n(x,t) C_n^{ct} f_{ct} \quad (\text{III.42})$$

$$\frac{\partial f_{vt}}{\partial t} = p(x,t) C_p^{vt} f_{vt} - e_p^{vt} (1 - f_{vt}) + e_n^{vt} (1 - f_{vt}) - n(x,t) C_n^{vt} f_{vt} \quad (\text{III.43})$$

$$\frac{\partial f_{db}^-}{\partial t} = [n(x,t) C_n^0 + e_p^0] (1 - f_{db}^+ - f_{db}^-) - [e_n^0 + p(x,t) C_p^0] f_{db}^- \quad (\text{III.44})$$

$$\frac{\partial f_{db}^+}{\partial t} = \left[ p(x,t) C_p^0 + e_n^0 \right] (1 - f_{db}^+ - f_{db}^-) - \left[ e_p^+ + n(x,t) C_n^+ \right] f_{db}^+ \quad (\text{III.45})$$

L'équation de Poisson, qui dépend implicitement du temps s'écrit :

$$-\frac{\partial}{\partial x} \left[ \varepsilon_{sc} \frac{\partial}{\partial x} V(x,t) \right] = q \left[ p(x,t) - n(x,t) + Q_{vt}(x,t) - Q_{vt}(x,t) + Q_{db}^+ - Q_{db}^- \right] \quad (\text{III.46})$$

La résolution numérique de ce système d'équations nécessite la discrétisation des variables. Les variables d'espace et de temps sont indépendantes, La discrétisation dans l'espace se fait de la même façon que celle dans l'état stationnaire. Il reste à discrétiser la variable temps. L'approche suivie est la résolution numériquement du système d'équations dans l'espace pour des temps discrets. Dans chaque intervalle de temps un système d'équations non linéaires doit être résolu.

### III.2.3.a. Procédure de résolution

#### III.2.3.a.1 Discrétisation temporelle

De façon générale la discrétisation temporelle est basé sur la subdivision de l'intervalle de temps en plusieurs petits intervalles. Nous avons adopté la méthode semi-implicite d'Euler [36], qui possède comme principal avantage d'être stable numériquement.

Dans notre cas on s'intéresse à la discrétisation temporelle du type d'équation différentielle suivant :

$$\frac{\partial f(x,t)}{\partial t} = A(x,t) \quad (\text{III.47})$$

La méthode semi-implicite est basée sur l'évolution de la dérivé à la date  $[t + \Delta t]$ . Ainsi le terme à gauche de l'équation (III.47) peut être exprimé de la façon suivante :

$$\frac{\partial f(x,t)}{\partial t} \approx \frac{f(x,t + \Delta t) - f(x,t)}{\Delta t} \approx \theta \frac{\partial f(x,t)}{\partial t} \Big|_{t+\Delta t} + (1-\theta) \frac{\partial f(x,t)}{\partial t} \Big|_t \quad (\text{III.48})$$

Avec  $0 \leq \theta \leq 1$ .

où  $\theta$  est le facteur de stabilité, dans notre calcul  $\theta = \frac{1}{2}$ .

Le schéma de discrétisation de la méthode semi-implicite donne :

$$f(x, t + \Delta t) = f(x, t) + \Delta t(1 - \theta) \left. \frac{\partial f(x, t)}{\partial t} \right|_t + \Delta t \theta \left. \frac{\partial f(x, t)}{\partial t} \right|_{t+\Delta t} \quad (\text{III.49})$$

La solution à la date  $t$  est connue, le but est de trouver la nouvelle solution à la date  $t+\Delta t$ , et ce en commençant par les conditions initiales.

### III.2.3.a.2 Linéarisation des équations

Equations cinétiques :

La probabilité d'occupation d'un niveau de la QBC d'énergie  $E_i$  est obtenue en appliquant la formulation (III.49) :

$$f_{ct}(E_i, t+\Delta t, x_i) = f_{ct}(E_i, t, x_i) + \frac{\Delta t}{2} \left. \frac{\partial f_{ct}}{\partial t} \right|_t + \frac{\Delta t}{2} \left. \frac{\partial f_{ct}}{\partial t} \right|_{t+\Delta t} \quad (\text{III.50})$$

$$f_{ct}(E_i, t+\Delta t, x_i) = f_{ct0}(E_i, t+\Delta t, x_i) + \delta f_{ct} \quad (\text{III.51})$$

Ce qui donne :

$$\delta f_{ct}(E_i) = f_{ct}(E_i, t, x_i) - f_{ct}(E_i, t+\Delta t, x_i) + \frac{\Delta t}{2} \left. \frac{\partial f_{ct}}{\partial t} \right|_t + \frac{\Delta t}{2} \left. \frac{\partial f_{ct}}{\partial t} \right|_{t+\Delta t} \quad (\text{III.52})$$

De même, on trouve pour la fonction de probabilité d'occupation de la QBV pour un niveau discret d'énergie  $E_i$  :

$$\delta f_{vt}(E_i) = f_{vt}(E_i, t, x_i) - f_{vt}(E_i, t+\Delta t, x_i) + \frac{\Delta t}{2} \left. \frac{\partial f_{vt}}{\partial t} \right|_t + \frac{\Delta t}{2} \left. \frac{\partial f_{vt}}{\partial t} \right|_{t+\Delta t} \quad (\text{III.53})$$

La fonction de probabilité d'occupation de la liaison pendante  $D^+$  est calculée par l'approximation suivante :

$$\delta f_{db}^+ = f_{db}^+(x_i, t) - f_{db}^+(x_i, t + \Delta t) + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial f_{db}^+}{\partial t} \Bigg|_t + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial f_{db}^+}{\partial t} \Bigg|_{t+\Delta t} \quad (\text{III.54})$$

La fonction de probabilité d'occupation de la liaison pendante D<sup>-</sup> est obtenue suivant l'approximation :

$$\delta f_{db}^- = f_{db}^-(x_i, t) - f_{db}^-(x_i, t + \Delta t) + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial f_{db}^-}{\partial t} \Bigg|_t + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial f_{db}^-}{\partial t} \Bigg|_{t+\Delta t} \quad (\text{III.55})$$

Le calcul des fonctions d'occupation de chaque type d'états sert à calculer les diverses concentrations de charges fixes dans l'équation de Poisson, ainsi que le taux net de recombinaison des électrons et celui des trous utilisés dans les équations de continuité.

### Equation de Poisson

De façon similaire à la méthode de discrétisation dans le cas stationnaire, on obtient la discrétisation de l'équation de Poisson entre la date  $t$  et la date  $t + \Delta t$  :

$$A_{v_i}^{t+\Delta t} \delta V_{i+1}^{t+\Delta t} + B_{v_i}^{t+\Delta t} \delta V_i^{t+\Delta t} + C_{v_i}^{t+\Delta t} \delta V_{i-1}^{t+\Delta t} = Y_{v_i}^{t+\Delta t} \quad (\text{III.56})$$

Les coefficients sont

$$Y_{v_i}^{t+\Delta t} = -V_{i+1}^{t+\Delta t} + 2V_i^{t+\Delta t} - V_{i-1}^{t+\Delta t} - \left[ \rho_{i+1}^{t+\Delta t} + 10\rho_i^{t+\Delta t} + \rho_{i-1}^{t+\Delta t} \right] \quad (\text{III.57})$$

$$A_{v_i}^{t+\Delta t} = 1 \quad (\text{III.58})$$

$$B_{v_i}^{t+\Delta t} = 2 \quad (\text{III.59})$$

$$C_{v_i}^{t+\Delta t} = 1 \quad (\text{III.60})$$

Equation de continuité des électrons :

On déduit la discrétisation de l'équation de continuité des électrons dans l'intervalle entre  $t$  et  $t+\Delta t$  de la même manière que la discrétisation dans le cas stationnaire :

$$A_{ni}^{t+\Delta t} \delta V_{ni+1}^{t+\Delta t} - B_{ni}^{t+\Delta t} \delta V_{ni}^{t+\Delta t} + C_{ni}^{t+\Delta t} \delta V_{ni-1}^{t+\Delta t} = Y_{ni}^{t+\Delta t} \quad (\text{III.61})$$

Les coefficients sont :

$$Y_{ni}^{t+\Delta t} = \frac{2h^2}{\Delta t \mu_n k_B T} \left[ V_{ni}^t - V_{ni}^{t+\Delta t} + V_i^{t+\Delta t} - V_i^t + \frac{\partial V_n}{\partial t} \Big|_t + \frac{\partial V_n}{\partial t} \Big|_{t+\Delta t} \right] \quad (\text{III.62})$$

$$A_{ni}^{t+\Delta t} = -1 - \frac{q}{4k_B T} \left[ V_{i+1}^{t+\Delta t} - V_{i-1}^{t+\Delta t} - 2 \left( V_{ni+1}^{t+\Delta t} - V_{ni+1}^t \right) \right] \quad (\text{III.63})$$

$$B_{ni}^{t+\Delta t} = -2 + \frac{h^2}{m_n} + \frac{q}{k_B T} \left( U_{ni}^{t+\Delta t} - G_{ei}^{t+\Delta t} \right) \frac{2h^2}{\Delta t \mu_n k_B T} \quad (\text{III.64})$$

$$C_{ni}^{t+\Delta t} = -1 + \frac{q}{4k_B T} \left[ V_{i+1}^{t+\Delta t} - V_{i-1}^{t+\Delta t} - 2 \left( V_{ni+1}^{t+\Delta t} - V_{ni+1}^t \right) \right] \quad (\text{III.65})$$

Equation de continuité des trous :

La discrétisation temporelle se fait entre la date  $t$  et  $t+\Delta t$ . La discrétisation spatiale se fait d'une manière analogue à celle utilisée dans le cas stationnaire :

$$A_{pi}^{t+\Delta t} \delta V_{pi-1}^{t+\Delta t} - B_{pi}^{t+\Delta t} \delta V_{pi}^{t+\Delta t} + C_{pi}^{t+\Delta t} \delta V_{pi+1}^{t+\Delta t} = Y_{pi}^{t+\Delta t} \quad (\text{III.66})$$

Avec les coefficients :

$$Y_{pi}^{t+\Delta t} = \frac{2h^2}{\Delta t \mu_p k_B T} \left[ V_{pi}^t - V_{pi}^{t+\Delta t} + V_i^{t+\Delta t} - V_i^t + \frac{\partial V_p}{\partial t} \Big|_t + \frac{\partial V_p}{\partial t} \Big|_{t+\Delta t} \right] \quad (\text{III.67})$$

$$A_{pi}^{t+\Delta t} = -1 - \frac{q}{4k_B T} \left[ V_{i+1}^{t+\Delta t} - V_{i-1}^{t+\Delta t} - 2 \left( V_{pi+1}^{t+\Delta t} - V_{pi+1}^t \right) \right] \quad (\text{III.68})$$

$$B_{pi}^{t+\Delta t} = -2 + \frac{h^2}{m_p} + \frac{q}{k_B T} \left( U_{pi}^{t+\Delta t} - G_{ei}^{t+\Delta t} \right) \frac{2h^2}{\Delta t \mu_p k_B T} \quad (\text{III.69})$$

$$C_{pi}^{t+\Delta t} = -1 + \frac{q}{4k_B T} \left[ V_{i+1}^{t+\Delta t} - V_{i-1}^{t+\Delta t} - 2 \left( V_{pi+1}^{t+\Delta t} - V_{pi+1}^{t+\Delta t} \right) \right] \quad (\text{III.70})$$

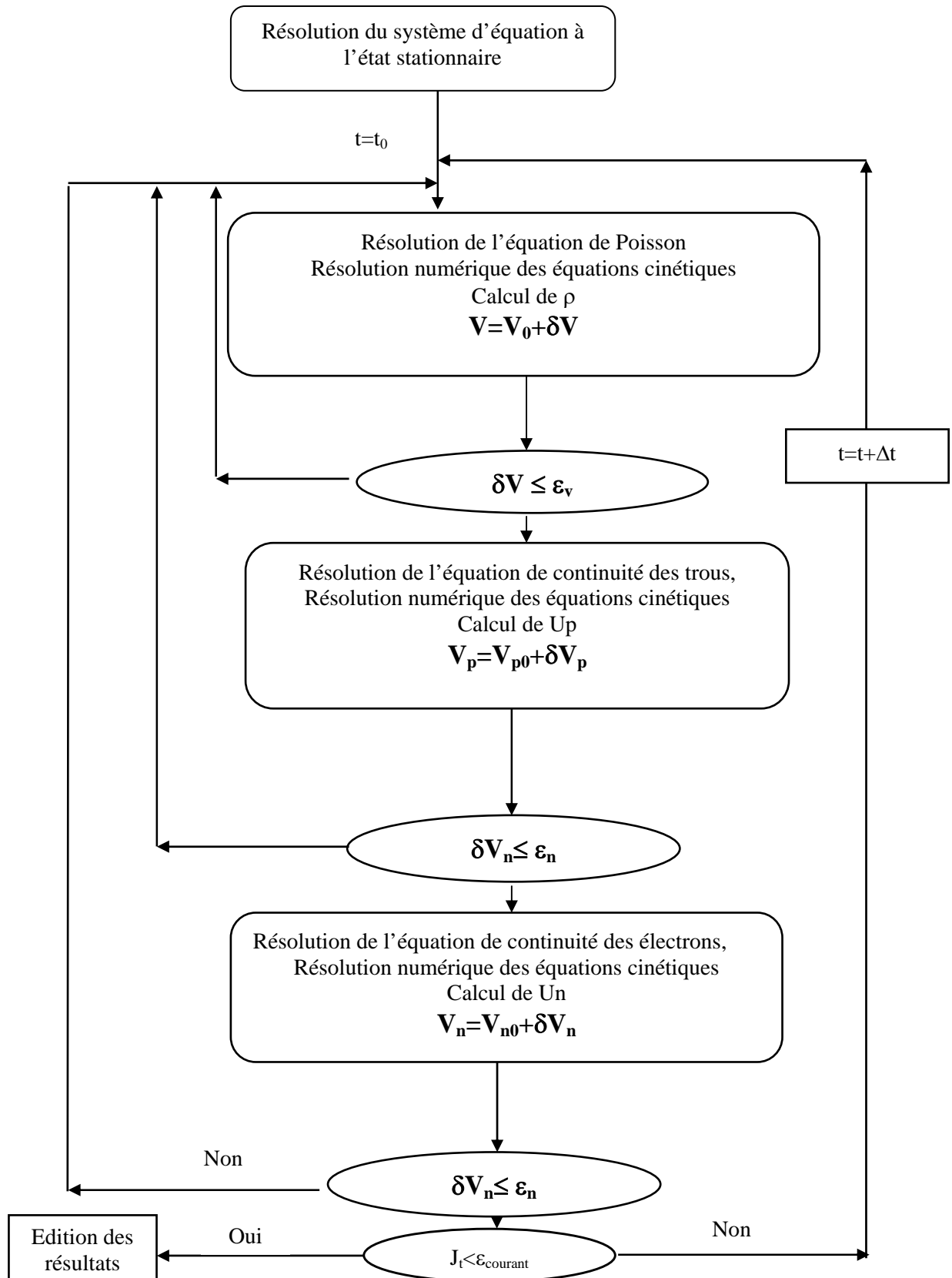
Les équations (III.56), (III.61) et (III.66) sont similaires. Dans l'intervalle de temps  $[t, t+\Delta t]$ , elles sont écrites aux positions  $i+1$ ,  $i$  et  $i-1$ . Elles forment des systèmes tridiagonaux dans le cas transitoire, les conditions aux limites sont les mêmes que celles de l'état stationnaire, car il ne dépendent pas explicitement du temps. La résolution a été faite par la méthode classique du double balayage [35].

### III.2.3.b. Solution de départ

La simulation des phénomènes transitoires nécessite la connaissance de la solution initiale. Cette solution est obtenue en résolvant le système d'équations qui régit le transport des porteurs dans le régime stationnaire.

### III.2.3.c. Algorithme de résolution

La solution du départ sont les conditions initiales obtenues en résolvant le même système d'équations dans le cas stationnaire sous les mêmes conditions aux limites. Dans l'intervalle de temps  $[t, t+\Delta t]$  l'algorithme de résolution transitoire est construit sur le même schéma que dans la résolution stationnaire, sauf qu'il faut tenir compte des termes dépendants du temps. L'algorithme est basé sur la résolution de l'ensemble des équations dans chaque intervalle de temps jusqu'à ce que le courant total est inférieur à une limite donnée  $\varepsilon_{\text{courant}}$ . L'algorithme du programme est décrit dans l'organigramme de la figure (III.5).



Figure(III.5) Schéma de résolution du système d'équations dans le cas transitoire.

**CHAPITRE IV**

**DESCRIPTION DES RESULTATS DE LA**

**SIMULATION NUMERIQUE**



Dans ce chapitre nous allons présenter les résultats de la simulation numérique décrite dans le chapitre précédent. Nous examinons la structure métal/semiconducteur à base de a-Si:H à l'équilibre thermodynamique avant de passer au régime hors équilibre thermodynamique. Nous étudions par la suite l'effet des paramètres du modèle de DOS et des paramètres de la structure. Nous étudions la réponse de la structure métal/a-Si:H après la rupture de l'excitation lumineuse en examinant la décroissance du photocourant.

Dans le tableau (IV.1), nous présentons l'ensemble des paramètres utilisés dans la simulation de la structure métal/a-Si:H.

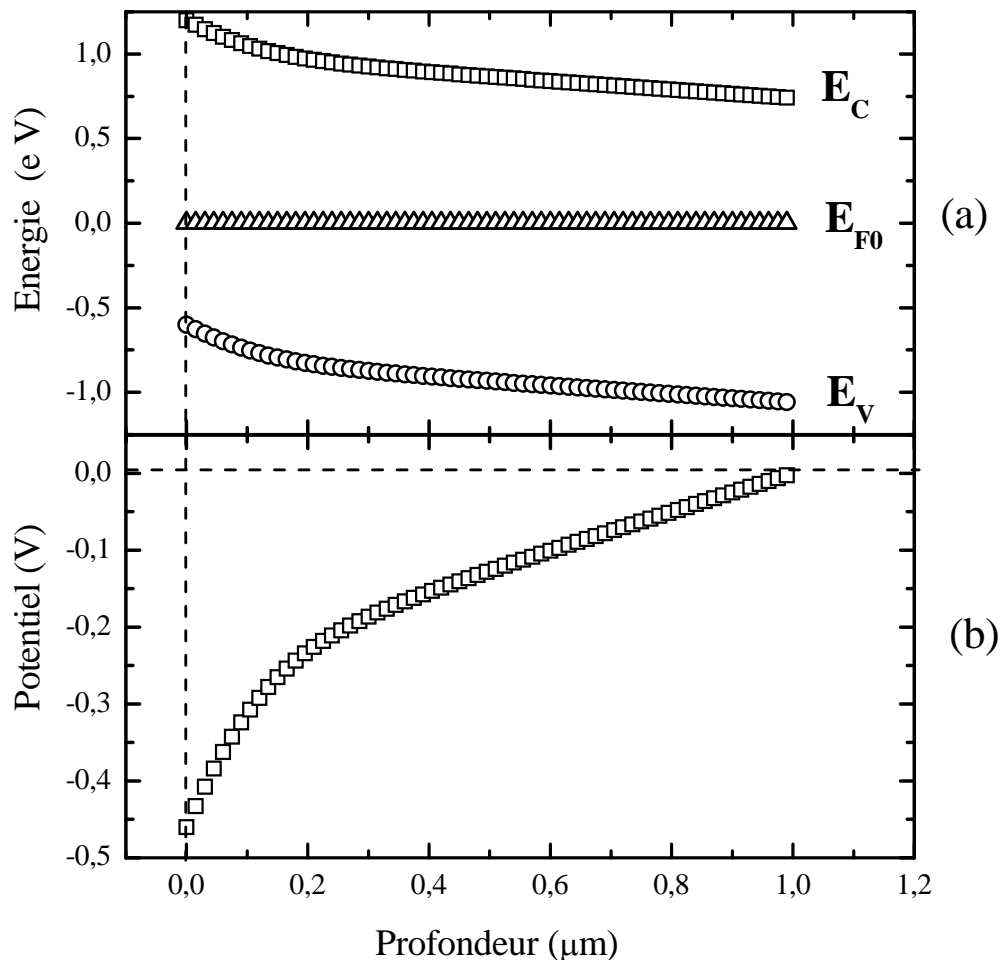
Paramètres	Valeurs
Largeur de la bande interdite	$E_g = 1.8 \text{ eV}$
Mobilité des électrons Mobilité des trous	$\mu_n = 10 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$ $\mu_p = 1 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$ [31]
Densité d'états effective en $E_C$ Energie caractéristique de la QBC Coefficients de capture des électrons (trous) par la QBC	$N_{ct}^0 = 10^{21} \text{ cm}^{-3} \text{eV}^{-1}$ $K_B T_c = 40 \text{ meV}$ $C_n^{ct} = C_p^{ct} = 10^{-8} \text{ cm}^3 \text{s}^{-1}$ [37-38]
Densité d'états effective en $E_v$ Energie caractéristique de la QBV Coefficients de capture des électrons (trous) par la QBV	$N_{vt}^0 = 10^{21} \text{ cm}^{-3} \text{eV}^{-1}$ $K_B T_v = 60 \text{ meV}$ $C_n^{vt} = C_p^{vt} = 10^{-8} \text{ cm}^3 \text{s}^{-1}$ [37-38]
Concentration totale de liaisons pendantes Position de $D^{+/0}$ Energie de corrélation Coefficients de capture des électrons (trous) par les liaisons pendantes	$N_{db} = 510^{15} \text{ cm}^{-3}$ $E_{db} = 0.85 \text{ eV}$ $U = 0.4 \text{ eV}$ [14] $C_n^0 = 310^{-8} \text{ cm}^3 \text{s}^{-1}$ $C_n^+ = 50C_n^0$ [39]
Barrière de la jonction Vitesse de recombinaison des électrons en surface Vitesse de recombinaison des trous en surface	$W_b = 1.2 \text{ eV}$ $S_n = 10^7 \text{ cm s}^{-1}$ $S_p = 10^4 \text{ cm s}^{-1}$
Epaisseur de la structure	$d = 1 \mu\text{m}$
Température	$T = 300 \text{ K}$

Tableau (IV.1): Paramètres utilisés dans la simulation numérique.

### IV.1. Structure à l'équilibre thermodynamique

A l'équilibre thermodynamique, le niveau de Fermi se situe par rapport au bas de la bande de conduction à  $E_c - E_{F0} = 0,7\text{eV}$ . Il est plus proche de la bande de conduction que de la bande de valence. Le matériau a-Si:H présente un caractère de type n.

Sur les figures (IV.1) et (IV.2) nous présentons le résultat obtenu par la résolution numérique de l'équation de Poisson à l'équilibre thermodynamique avec les paramètres donnés dans le tableau (IV.1). Nous avons établi le diagramme des bandes énergétiques de la structure métal/a-Si:H sans polarisation et à l'obscurité (figure (IV.1 (a))).



**Figure(IV.1)** Structure métal/a-Si:H à l'équilibre thermodynamique.

(a) Bandes d'énergie de la structure, (b) Potentiel électrostatique.

Ce diagramme présente une courbure de la bande de conduction et de la bande de valence vers le haut au voisinage de la surface avant.

La figure (IV.1(b)) montre le potentiel électrique dans la structure. Le potentiel en valeur absolue augmente lorsque on s'approche de la surface arrière.

La figure (IV.2(a)) donne la représentation linéaire et logarithmique de l'évolution de la densité de charge totale et de ses composantes à l'équilibre thermodynamique. La courbe de la densité de charge totale  $\rho(x)$  est subdivisée en trois régions comme indiqué sur la figure (IV.2 (a)).

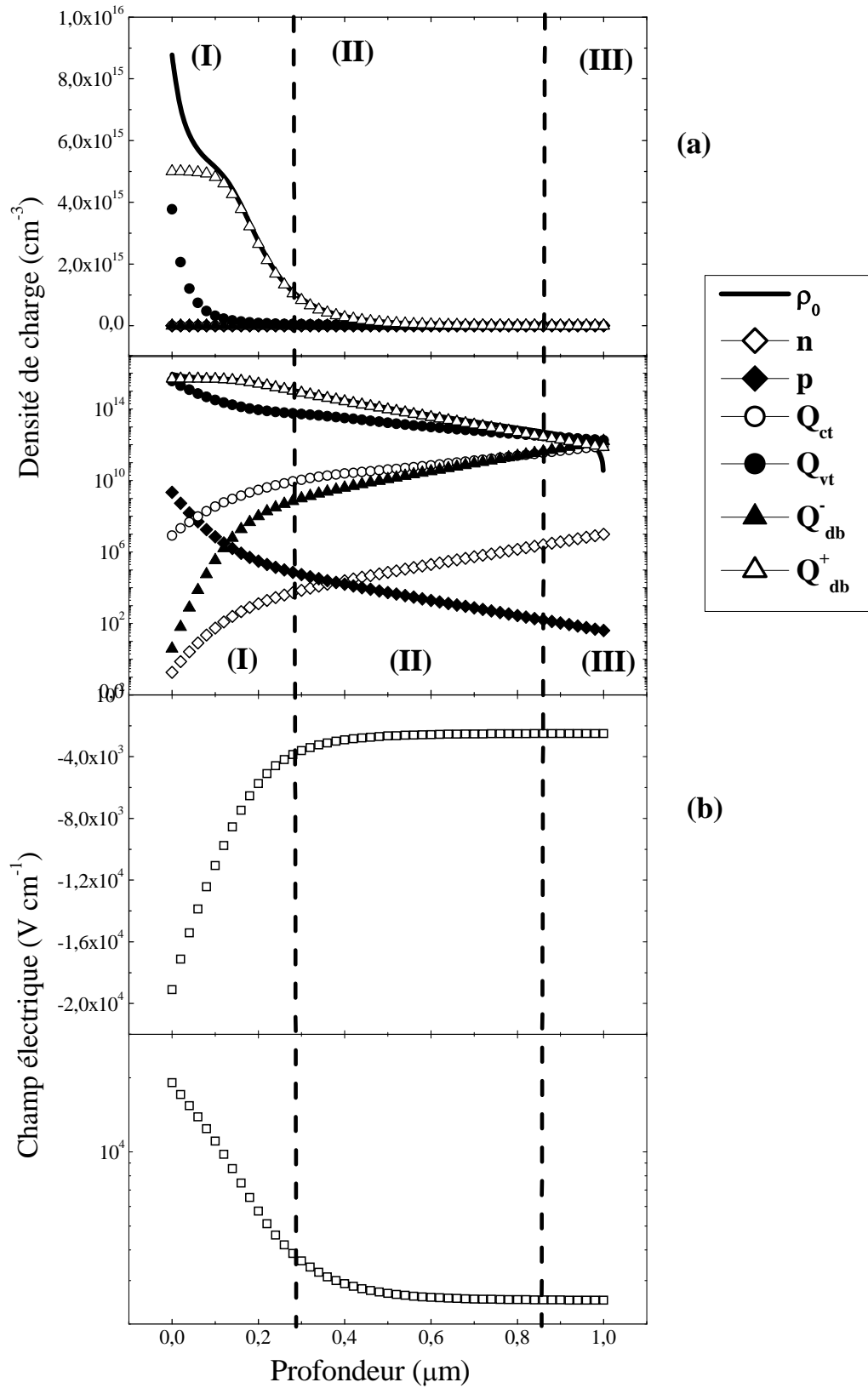
La région (I) comprise entre les positions  $x=0\mu\text{m}$  et  $x=0,12\mu\text{m}$  environ correspond à la densité  $\rho(x)$  due essentiellement à la concentration des états localisés dans la QBV et la concentration des états localisés de la liaison pendante  $D^+$ .

La région (II) présente une décroissance entre  $x=0,12\mu\text{m}$  et  $x=0,85\mu\text{m}$ . La densité de charge est due essentiellement à la concentration des états de la liaison pendante  $D^+$ . La partie de  $x=0,85\mu\text{m}$  correspond à l'égalité entre la concentration des états de la QBV et la concentration des états  $D^+$ . la densité de charge suit la variation de la concentration des états de la liaison pendante  $D^+$ .

La région (III) s'étale de  $x=0,85 \mu\text{m}$  à  $x=1\mu\text{m}$ , la densité  $\rho(x)$  diminue davantage, la concentration des états de la QBV devient plus importante que la concentration des états de la liaison pendante  $D^+$ . Dans cette zone,  $\rho(x)$  tend vers une valeur nulle proche de la surface arrière.

Le champ électrique  $E(x) = -\frac{\partial V(x)}{\partial x}$ , indiqué sur la figure (IV.2 (b)) varie considérablement dans la région (I) et dans la région(II).  $E(x)$  tend vers une valeur constante dans la région (III).

Dans ce qui suit de la partie stationnaire, la distinction de différentes régions de la structure se fait de la même façon que celle de l'état à l'équilibre.



**Figure(IV.2)** Structure métal/a-Si:H à l'équilibre thermodynamique.

(a)Densité de charge totale et ses composantes. (b) champs électrique.

## IV.2. Structure métal/a-Si:H en régime stationnaire

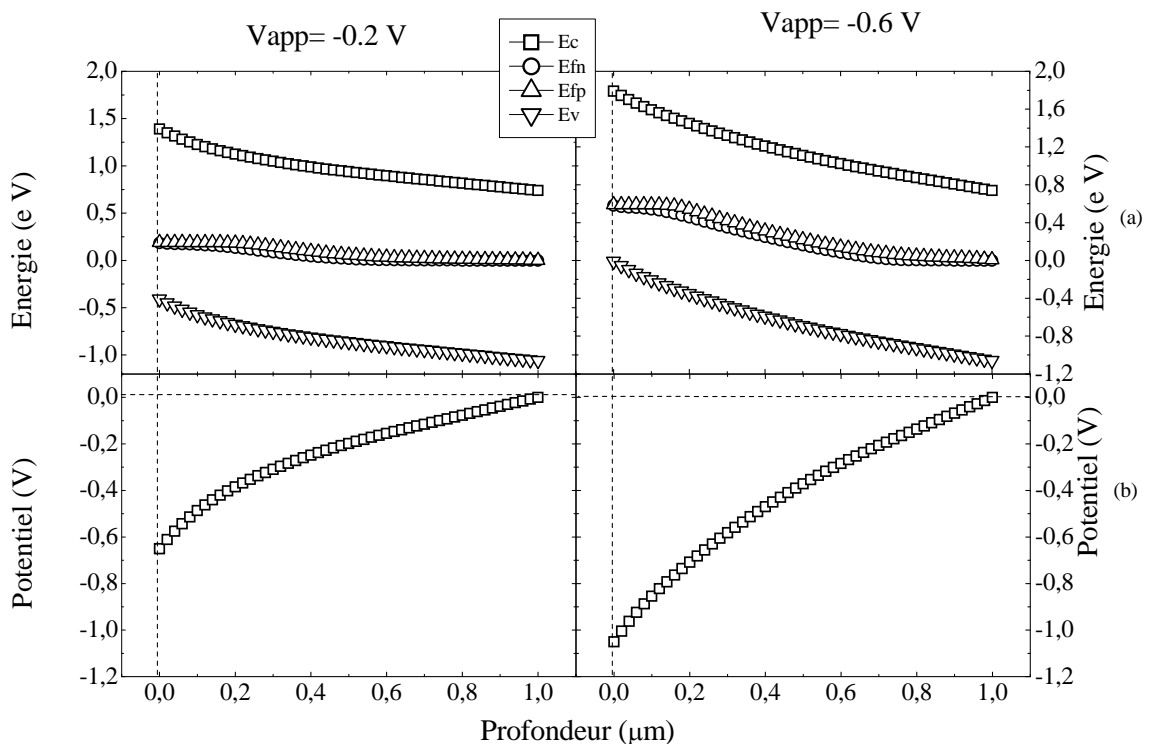
Hors équilibre thermodynamique et en régime stationnaire la solution est obtenue en résolvant l'équation de Poisson et les équations de continuité simultanément selon la procédure indiquée dans le chapitre précédent.

### IV.2.1. Structure métal/a-Si:H sous obscurité

L'application d'une polarisation aux bornes de la structure métal/a-Si:H, sous obscurité, modifie la barrière de diffusion.

#### IV.2.1.a. Polarisation négative

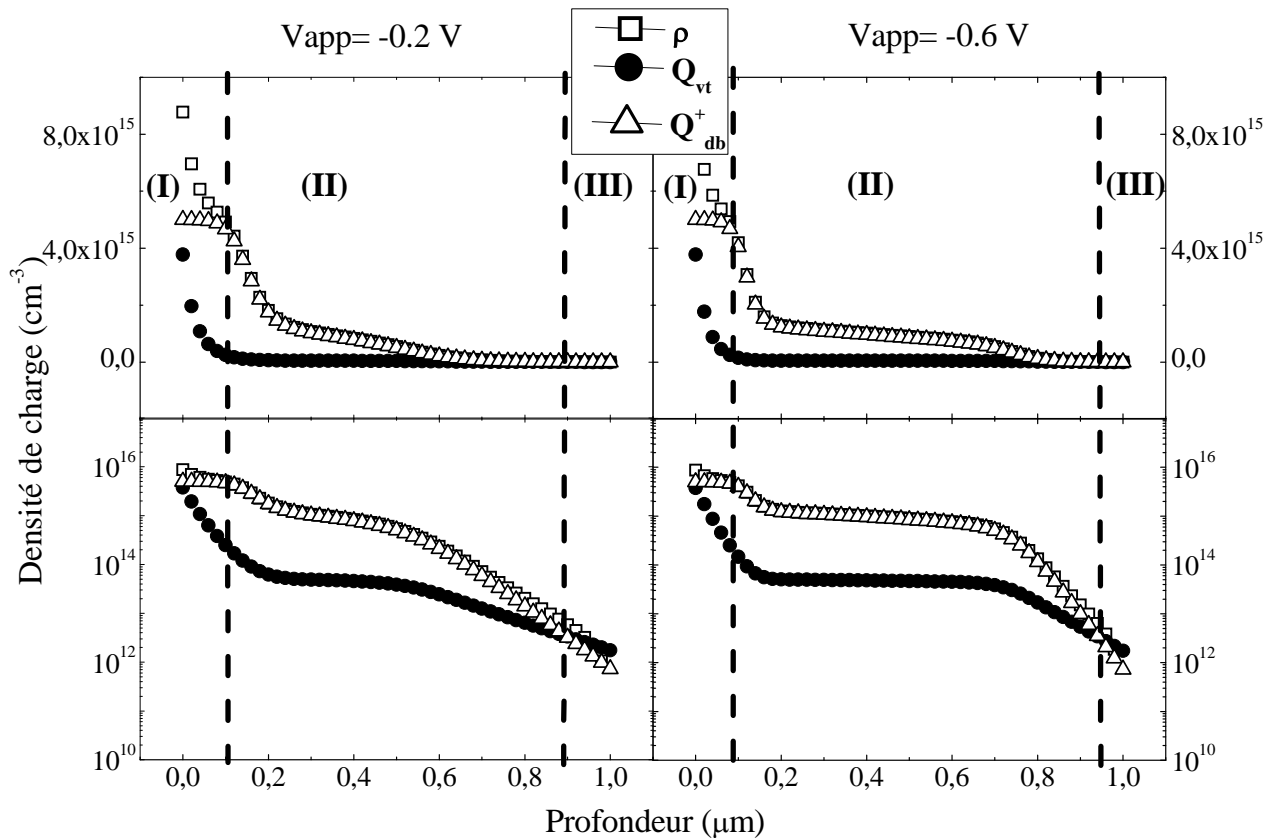
Sur la figure (IV.3) nous montrons le schéma de bandes d'énergie de la structure métal/a-Si:H et du potentiel électrostatique dans le cas d'une polarisation négative sous obscurité. La hauteur de la barrière de diffusion vue par les électrons augmente.



**Figure(IV.3)** (a) Bandes d'énergie sous polarisations négatives. (b) Potentiel électrostatique.

Nous représentons également sur la figure (IV.4) la distribution spatiale de la densité de charge d'espace, de la concentration des liaisons pendantes  $Q_{db}^+$  et de la concentration  $Q_{vt}$ , pour des polarisations négatives.

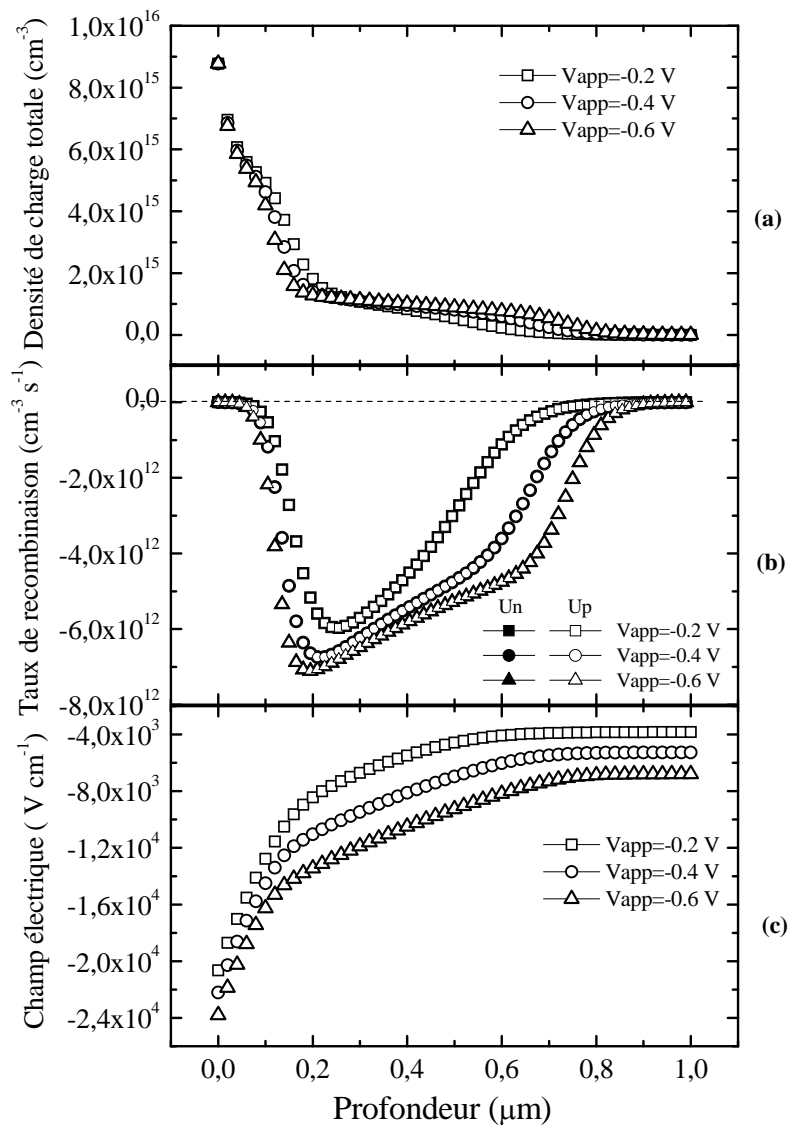
Pour la polarisation  $V_{app} = -0,2V$ , la région (I) est limitée par les positions  $x=0\mu m$  et  $x=0,1\mu m$ . La région (II) est limitée par les positions  $x=0,1\mu m$  et  $x=0,89\mu m$ . Dans cette région, on constate que l'allure de la charge d'espace présente un plateau. Pour la polarisation  $V_{app} = -0,6 V$ , ce plateau augmente en largeur. Dans ce cas, cette région est limitée par les positions  $x=0,08\mu m$  et  $x=0,7\mu m$ . La région (III) est comprise entre les positions  $x=0,89\mu m$  et  $x=1\mu m$  pour la polarisation  $V_{app} = -0.2 V$ . elle est réduite dans le cas de la polarisation  $V_{app} = -0.6 V$  ( $x=0,94 \mu m$  et  $x=1\mu m$ ).



**Figure(IV.4)** Profils de la densité de charge totale, concentration des  $D^+$  et  $Q_{vt}$  le long de la structure pour deux polarisations négatives.

La figure (IV.5 (b)) montre l'évolution du taux net de recombinaison des électrons et des trous le long de la structure  $U_n$  et  $U_p$ . Pour les polarisations négatives  $U_n$  et  $U_p$  sont négatives. Ces taux sont d'autant plus importants que la polarisation appliquée est grande. Notons que nous trouvons  $U_n=U_p$  dans le régime stationnaire. Ces taux de recombinaison négatifs sont appelés génération thermique par Street [17,39].

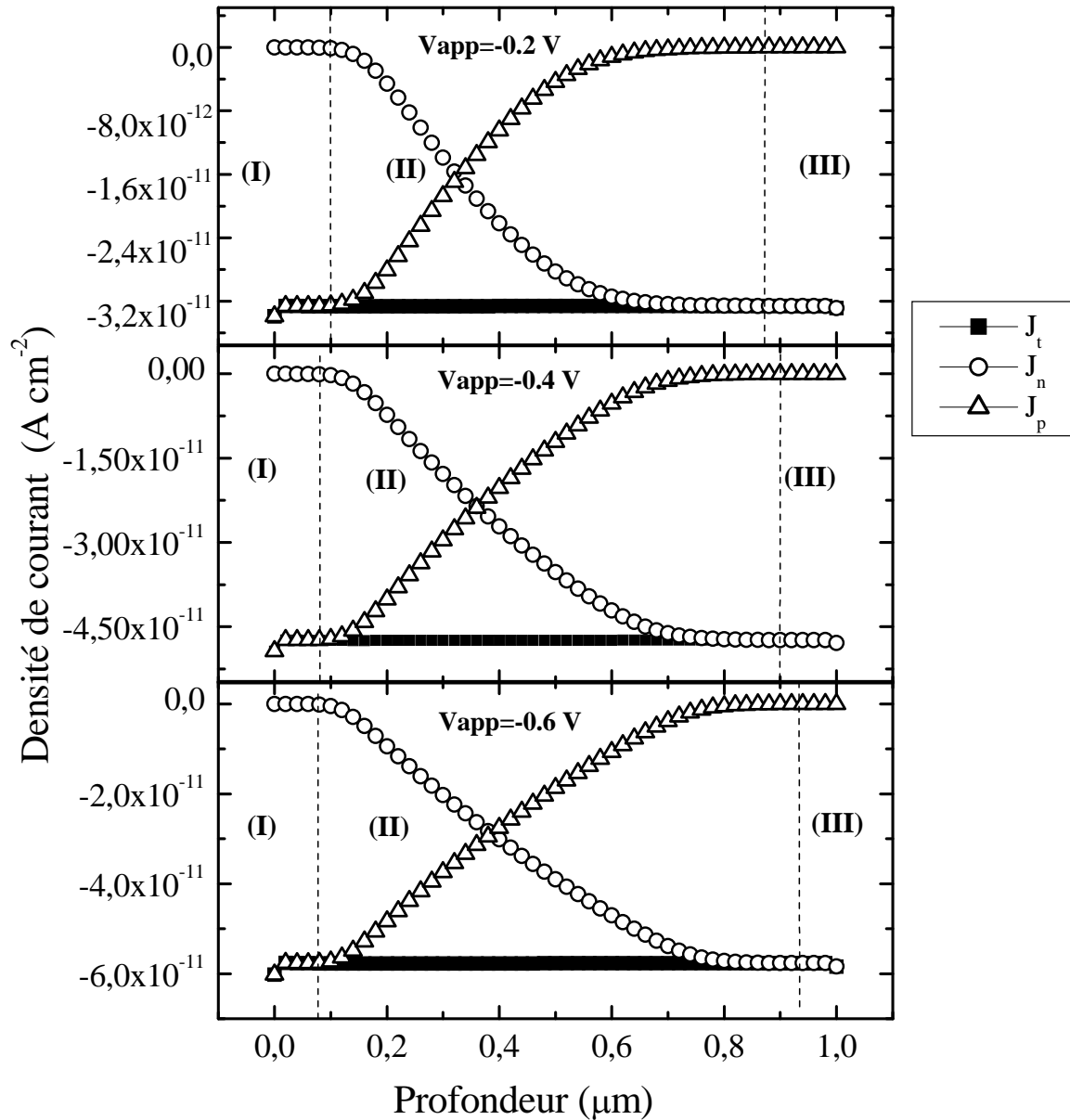
Sur la figure (IV.5 (c)) on présente l'évolution du champ électrique pour des polarisations négatives. Il augmente en valeurs absolue lorsqu'on augmente la polarisation négative.



**Figure(IV.5)** Structure métal/a-Si:H à l'état stationnaire à différentes polarisations négatives.

(a) Densité de charge totale, (b) Taux de recombinaison, (c) Champ électrique.

La figure (IV.6) montre la distribution spatiale de la densité de courant. La région (I) est conditionnée par la densité des trous au voisinage de la surface avant. Cette région varie légèrement en fonction de la polarisation. Dans la région (II), on trouve la contribution des deux types de porteurs. La région (III) est due essentiellement aux électrons au voisinage de la surface arrière.

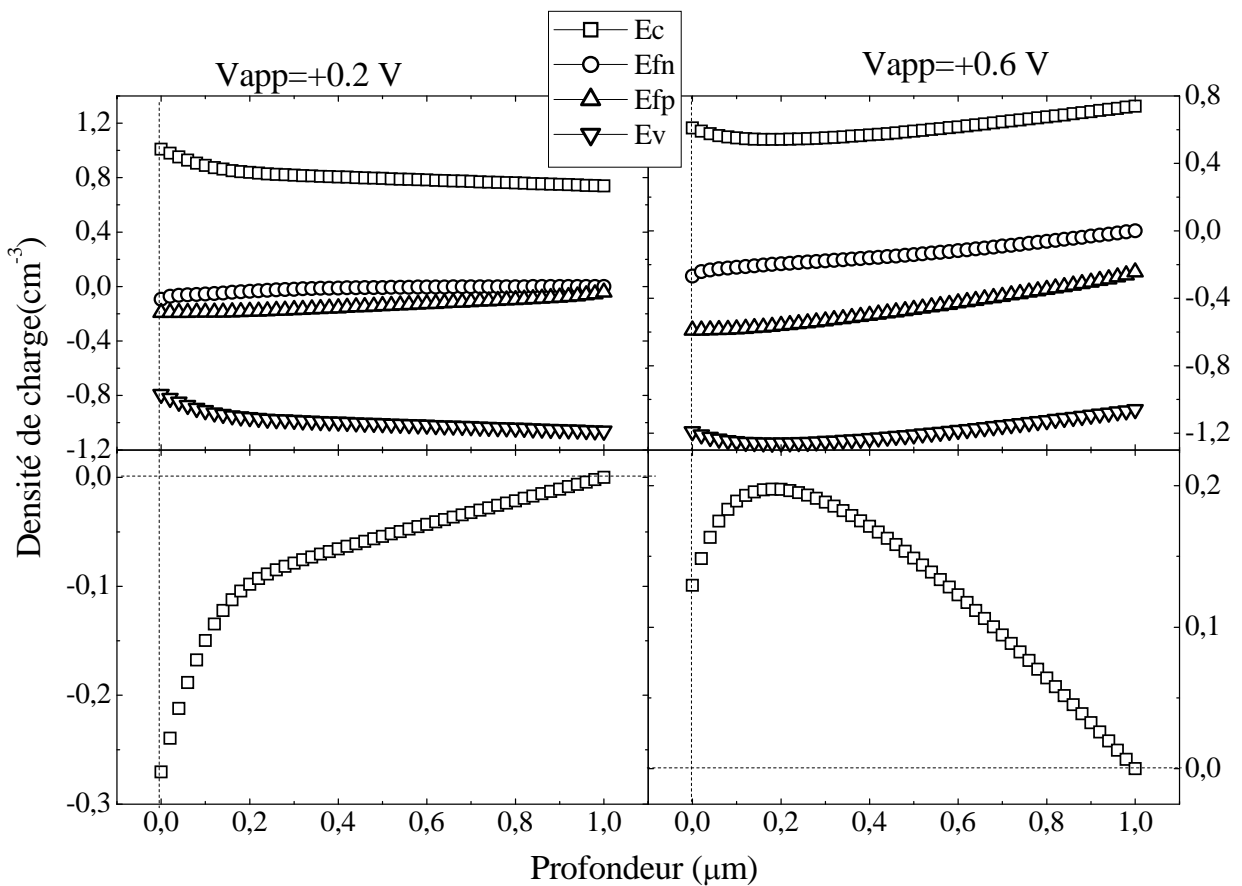


**Figure(IV.6)** Distributions spatiales de la densité de courant total  $J_t$ , de la densité de courant des électrons  $J_n$  et la densité de courant des trous  $J_p$  calculées pour des polarisations négatives.



### IV.2.1.b. Polarisation positive

L'allure du digramme des bandes d'énergie de la structure et le potentiel calculés pour deux polarisations positives,  $V_{app}=0,2$  V et  $V_{app}=0,6$  V, sont présentés sur la figure (IV.7).

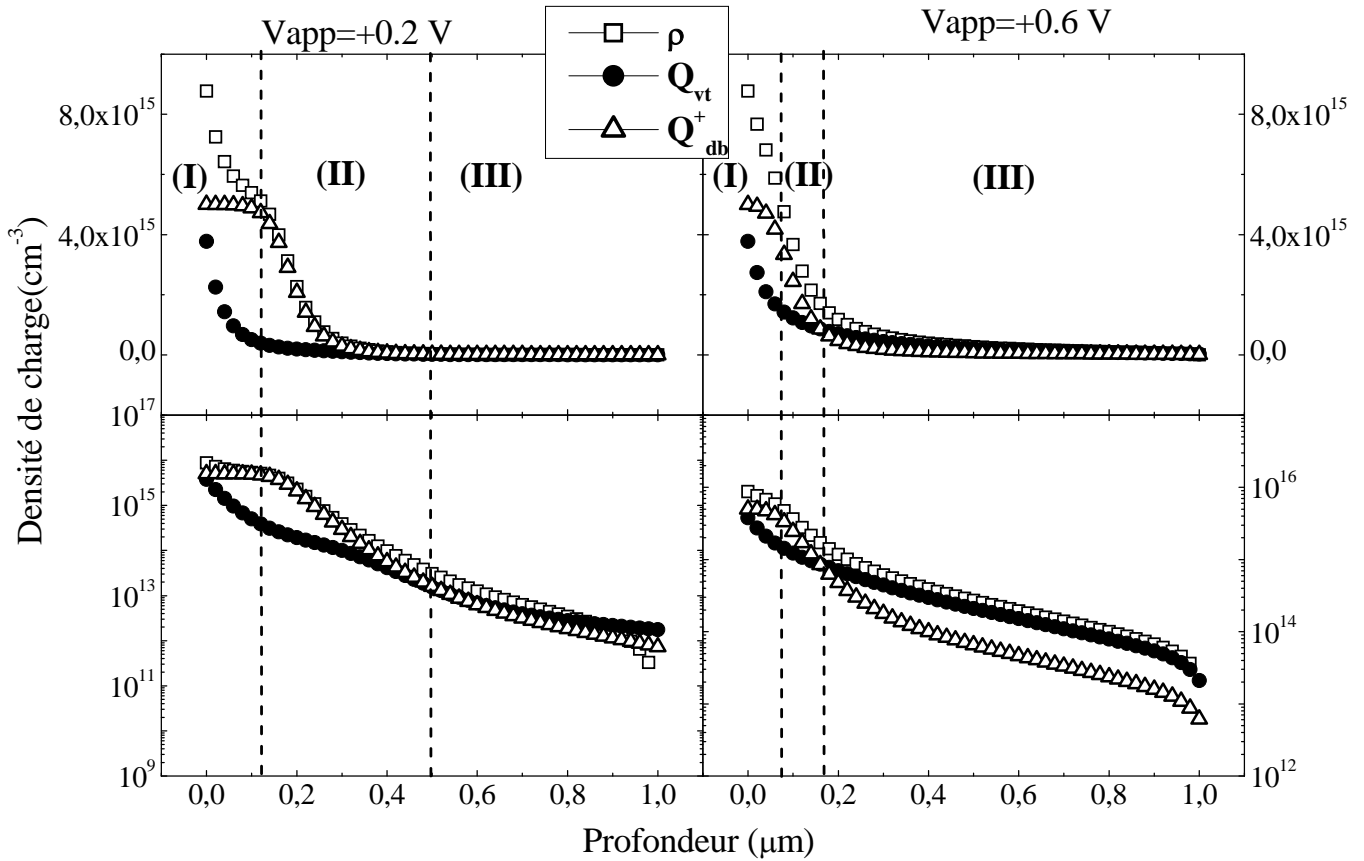


**Figure(IV.7)** (a) Bandes d'énergie de la structure sous polarisation positive à l'obscurité.

(b) Potentiel électrostatique sous polarisation positive à l'obscurité.

Dans le cas de la polarisation positive ( $V_{app}=0,2$  V), la différence de potentiel extérieure  $V_{app}$  réduit la barrière de diffusion par rapport à l'équilibre thermodynamique. Si on augmente encore la polarisation appliquée ( $V_{app}=0,6$  V), la hauteur de la barrière de diffusion est réduite davantage.

Les profils de la densité de charge totale, de la concentration des liaisons pendantes  $Q_{db}^+$  et de la concentration  $Q_{vt}$  pour les polarisations 0,2 V et 0,6 V sont donnés dans la figure (IV.8).



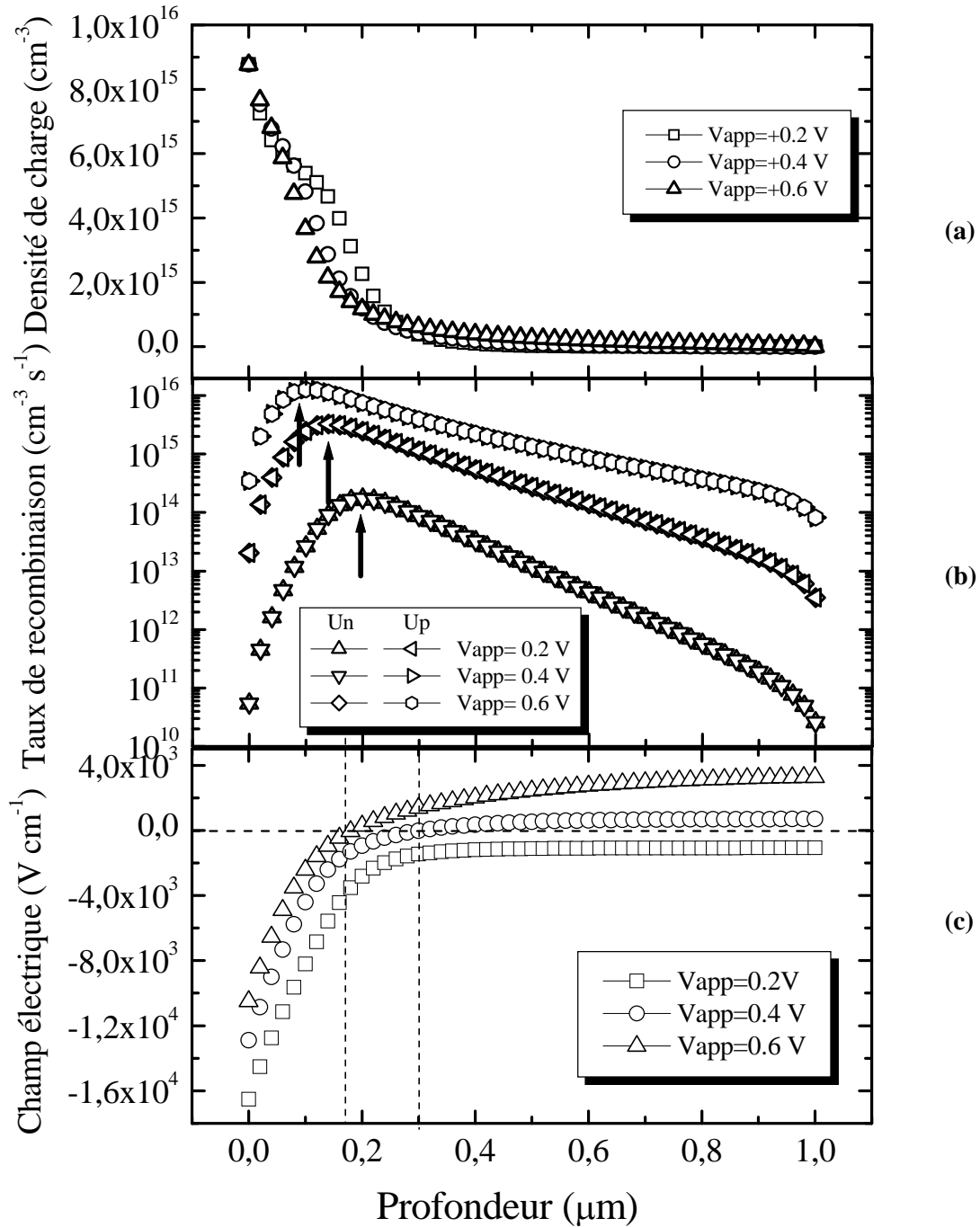
**Figure(IV.8)** Distribution spatiale de la densité de charge totale, concentration des  $D^+$  et  $Q_{vt}$  pour deux polarisations positives sous obscurité.

Pour la polarisation  $V_{app}=0,2$  V la région (I) est comprise entre les positions  $x=0$   $\mu\text{m}$  et  $x=0,12\mu\text{m}$ . Cette région est plus étroite dans le cas d'une polarisation plus élevée ( $V_{app}=0,6\text{V}$ ) (entre  $x=0$   $\mu\text{m}$  et  $x=0,07$   $\mu\text{m}$ ).

Pour la polarisation  $V_{app}=0,2$  V, la région (II) s'étale de  $x=0,12$   $\mu\text{m}$  jusqu'à  $x=0,5$   $\mu\text{m}$ . Elle devient plus étroite dans le cas de  $V_{app}= 0,6$  V, elle est limitée entre  $x=0,07$   $\mu\text{m}$  et  $x=0,16$  V.

La région (III). s'étend entre les positions  $x=0,5\mu\text{m}$  et  $x=1\mu\text{m}$  pour  $V_{app}=0,2$  V . En augmentant la polarisation ( $V_{app}=0,6\text{V}$ ) elle devient plus large, elle est limitée par  $x= 0,16\mu\text{m}$  et  $x=1\mu\text{m}$ .

Le profil de la densité de charge totale, le taux de recombinaison ainsi que le champ électrique pour des polarisations positives sont donnés dans la figure (IV.9).



**Figure(IV.9)** Structure métal/a-Si:H à l'état stationnaire à différentes polarisations positives : (a) Densité de charge totale, (b) Taux de recombinaison, (c) Champ électrique.

Sur la figure (IV.9 (b)) nous montrons la distribution spatiale des taux de recombinaison  $U_n$  et  $U_p$ . On peut voir dans le régime stationnaire l'égalité des taux de recombinaison  $U_n=U_p$ .

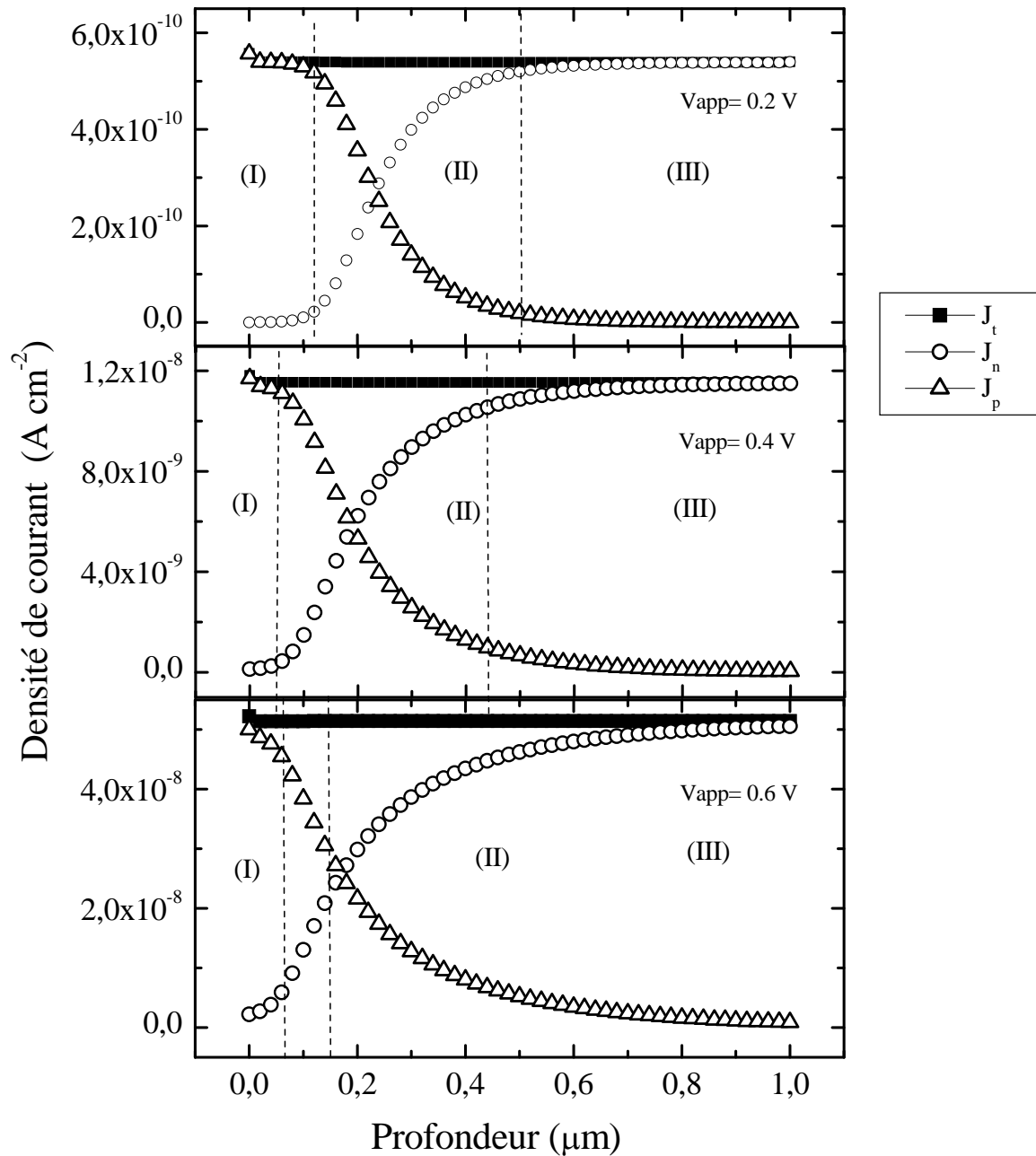
La recombinaison des porteurs libres augmente en fonction de la polarisation appliquée et présente un maximum dans la zone proche de la surface avant en suivant la variation du front de  $\rho(x)$ . Ce maximum se déplace vers la surface avant. Il est à la position  $x=0,2 \mu\text{m}$  pour  $V_{\text{app}}=0,2\text{V}$ , à la position  $x=0,14\mu\text{m}$  pour  $V_{\text{app}}=0,4 \text{ V}$  et  $x=0,1 \mu\text{m}$  pour  $V_{\text{app}}=0,6 \text{ V}$ .

Pour la polarisation appliquée  $V_{\text{app}}=0,2 \text{ V}$  le champ électrique ne change pas de signe le long de la structure, alors que pour les polarisations  $V_{\text{app}}=0,4 \text{ V}$  et  $V_{\text{app}}=0,6 \text{ V}$ , le champ électrique change à  $x=0,2 \mu\text{m}$  et  $x=0,3\mu\text{m}$  respectivement.

Le profil de la densité de courant pour des polarisations positives est représenté sur la figure (IV.10). Pour la polarisation  $V_{\text{app}}=0,2 \text{ V}$  dans la région (I) proche du contact, la densité de courant des trous est considérablement plus grande que celle des électrons.

Dans la région (II) il y a la contribution des deux courants. Dans la région (III), proche du contact arrière, c'est la densité de courant due aux électrons qui prédomine.

Plus on augmente la polarisation plus la région (III) s'étale et la région (II) devient étroite.



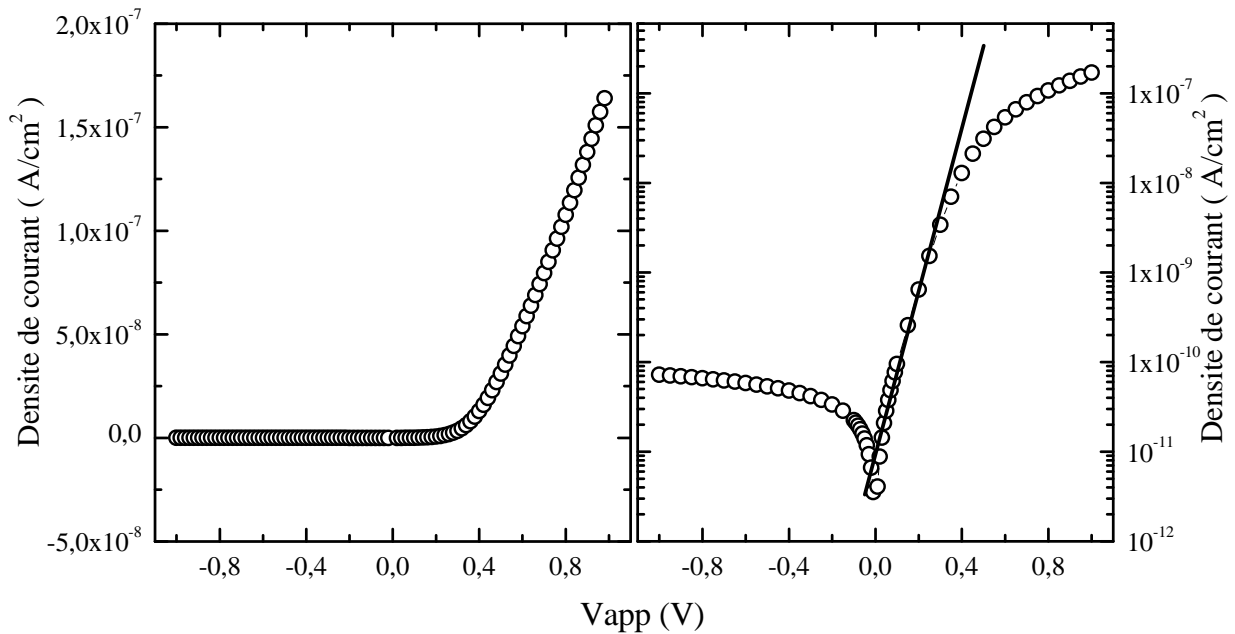
**Figure(IV.10)** Distributions spatiales de la densité de courant total  $J_t$ , la densité de courant des électrons  $J_n$  et la densité de courant des trous  $J_p$  pour des polarisations positives.

#### IV.2.2. Caractéristique courant-tension sous obscurité

Le comportement de la structure peut être explicité de façon simple en étudiant la caractéristique courant-tension.

Nous donnons sur la figure (IV.11) la représentation de la densité de courant en fonction de la polarisation appliquée. On peut voir un effet de redressement : sous polarisations négatives la densité de courant est très faible comparée au cas de polarisations positives.

L'effet de la jonction se traduit par une croissance exponentielle de la densité de courant total pour les polarisations positives (figure (IV.11)).

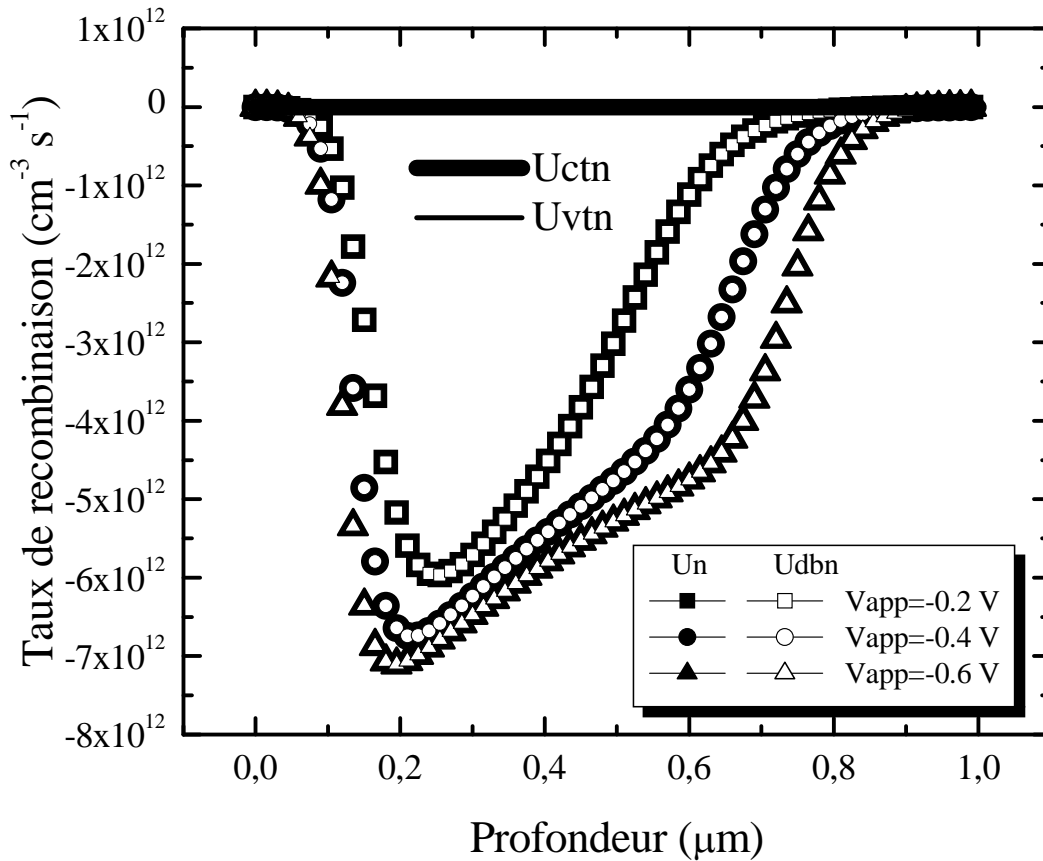


**Figure(IV.11)** Caractéristique courant-tension de la structure métal/a-Si:H sous obscurité.

En polarisation négative la densité de courant est faible comparée à la densité de courant en polarisation positive. Sa faible croissance est due à la génération thermique des porteurs du fait que le taux de recombinaison est négatif

Sur la figure (IV.12) nous représentons l'évolution du taux de recombinaison et de ses composantes pour des polarisations négatives. Les courbes continues sont la recombinaison des électrons sur la QBC ( $U_{ct}$ ) et la recombinaison des électrons sur la QBV ( $U_{vt}$ ). Sur cette figure on peut voir que ( $U_{ct}$ ) et ( $U_{vt}$ ) sont faibles comparées à la recombinaison des électrons sur la liaison pendante ( $U_{dbn}$ ). La courbe du taux de recombinaison des électrons  $U_n$  suit la même variation que ( $U_{dbn}$ ). On peut conclure que la recombinaison des électrons sous polarisation négative à l'obscurité est prédominante

par la liaison pendante. Ce résultat est confirmé par la conclusion de Sib [40] qui a montré que la génération thermique est prédominante par l'émission d'une bande étroite d'états localisés proche du milieu du gap de mobilité.



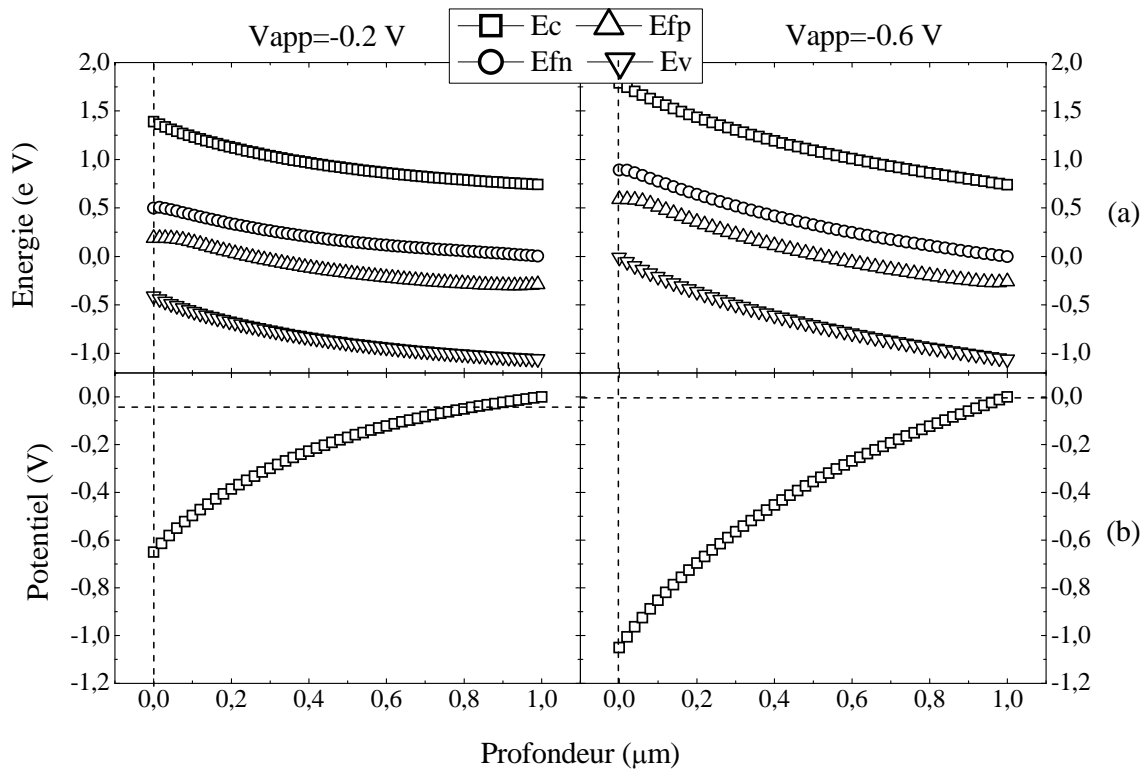
**Figure(IV.12)** Taux net de recombinaison des électrons et ses composantes pour des polarisation négatives.

#### IV.2.3. Structure métal/a-Si:H sous éclaircissement

Considérons une structure métal/a-Si:H polarisée et soumise à un éclaircissement perpendiculaire à la surface avant. Le taux de génération utilisé dans cette simulation est  $G_e = 10^{16} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$  et le coefficient d'absorption  $\alpha = 10^4 \text{ cm}^{-1}$ .

### IV.2.3.a. Polarisation négative

Sur la figure (IV.13) nous présentons le schéma de bandes d'énergie et le potentiel électrostatique pour des polarisations négatives.



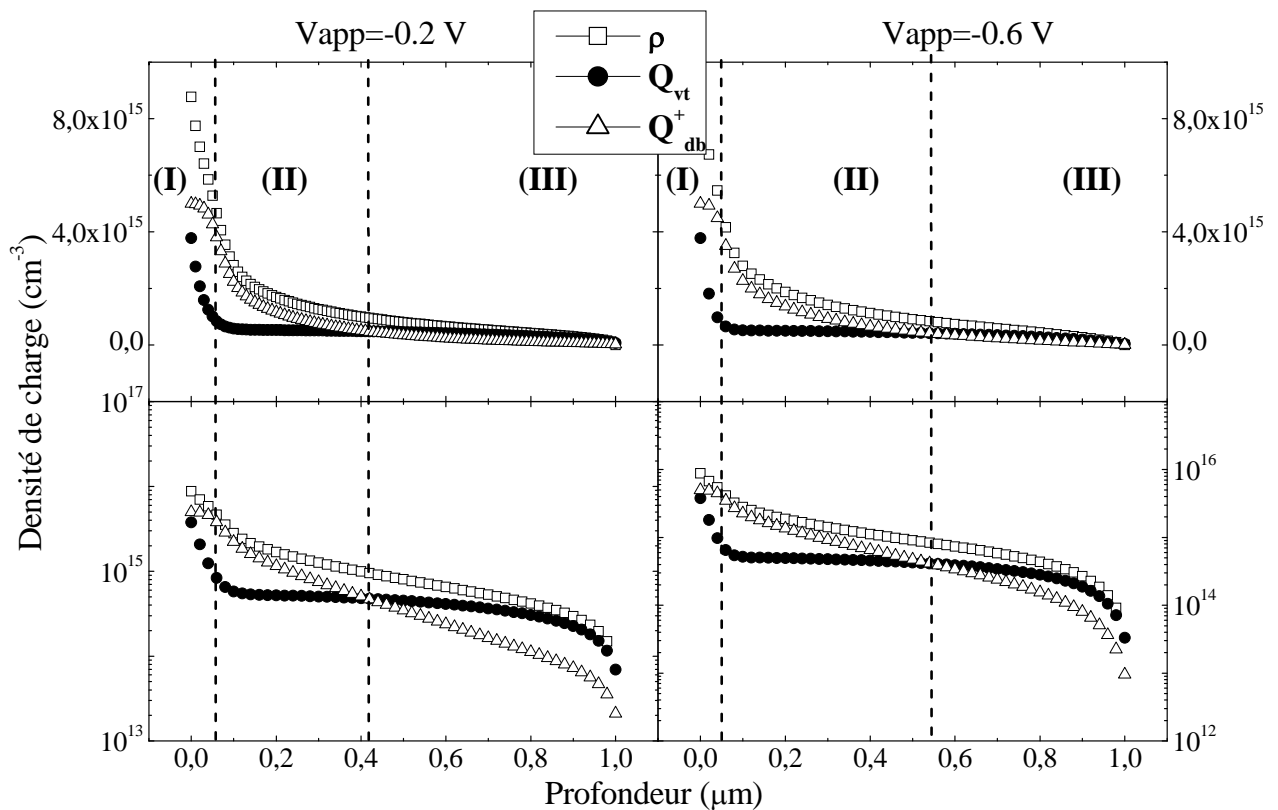
**Figure(IV.13)** (a) Bandes d'énergie de la structure pour de polarisations négatives.

(b) Potentiel électrostatique pour des polarisations négatives

Nous représentons sur la figure (IV.14) le profil des densités des charge sous éclairage pour des polarisation appliquées négatives.

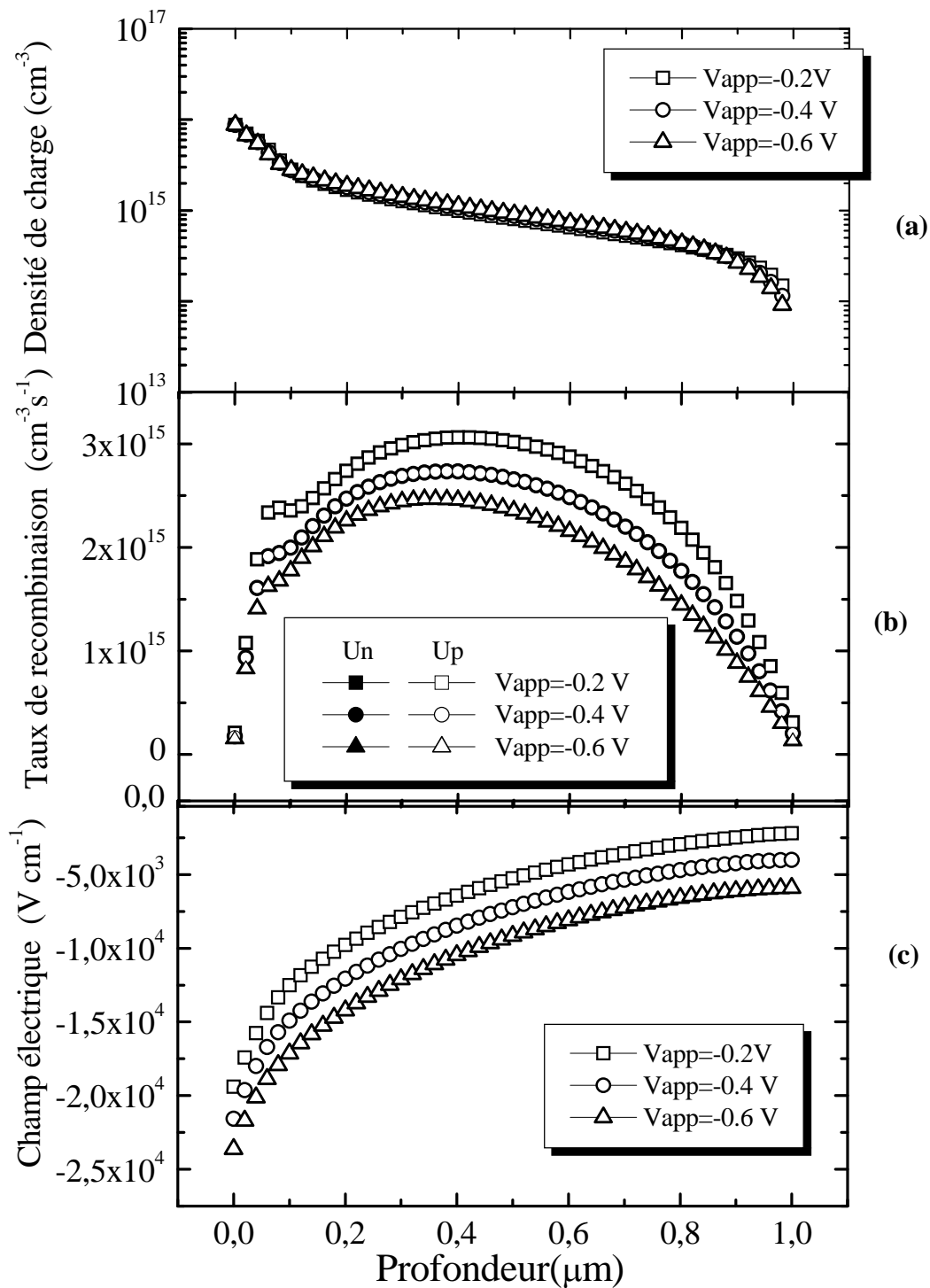


Dans le cas de polarisation  $V_{app}=-0,2$  V la région (I) est comprise entre les positions  $x=0$   $\mu\text{m}$  et  $x=0,05$   $\mu\text{m}$ . Cette région est légèrement modifiée dans le cas de polarisation  $V_{app}=-0,6$  V. La région (II) de la densité  $\rho(x)$  est comprise entre les positions  $x=0,05$   $\mu\text{m}$  et  $x=0,41$   $\mu\text{m}$ . Cette région augmente dans le cas d'une polarisation  $V_{app}=-0,6$  V et elle est située entre  $x=0,05$   $\mu\text{m}$  et  $x=0,54$   $\mu\text{m}$ . La région (III) commence à  $x=0,41$   $\mu\text{m}$ . Cette région est moins large dans le cas de la polarisation  $V_{app}=-0,6$  V.



**Figure(IV.14)** Densité de charge totale, concentrations des  $D^+$  et  $Q_{vt}$  pour des polarisations négatives sous éclaircissement.

Nous présentons sur la figure (IV.15 (b)) le taux net de recombinaison le long de la structure pour des polarisations négatives. Contrairement à l'états sous obscurité, les taux de recombinaison des porteurs libres ( $U_n$ ) et ( $U_p$ ) à l'état de l'éclaircissement sont positifs. La recombinaison des porteurs libres augmente en fonction de la polarisation. Sur la figure (IV.15 (c)), on montre que le champ électrique augmente en valeur absolue lorsque on augmente la polarisation négative.

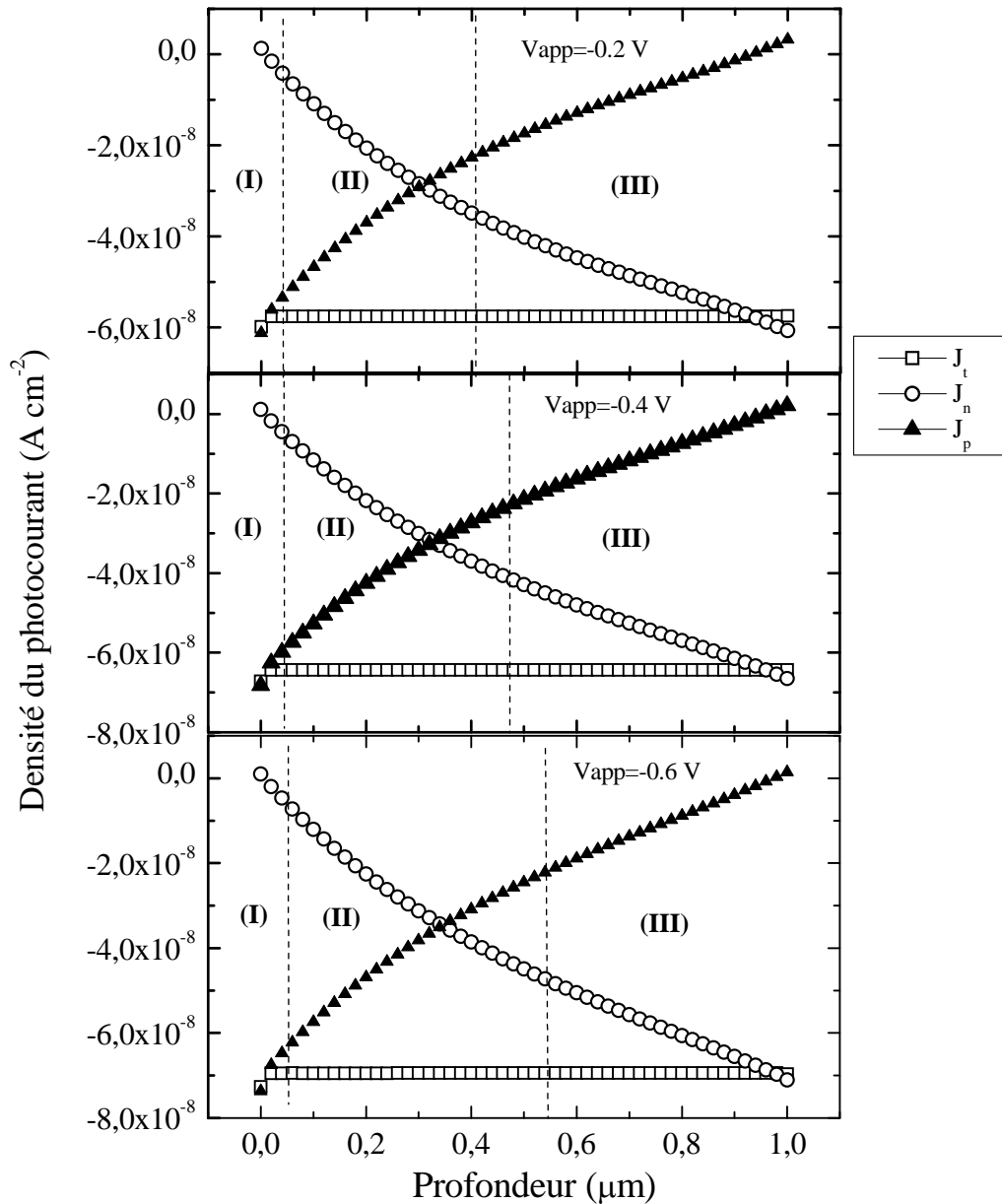


**Figure(IV.15)** Structure métal/a-Si:H à l'état stationnaire à différentes polarisations négatives.

(a) Densité de charge totale, (b) Taux de recombinaison, (c) Champ électrique.

La figure (IV.16) montre qu'en polarisation inverse et sous éclaircissement, le photocourant est dû essentiellement au déplacement des électrons proche de la surface

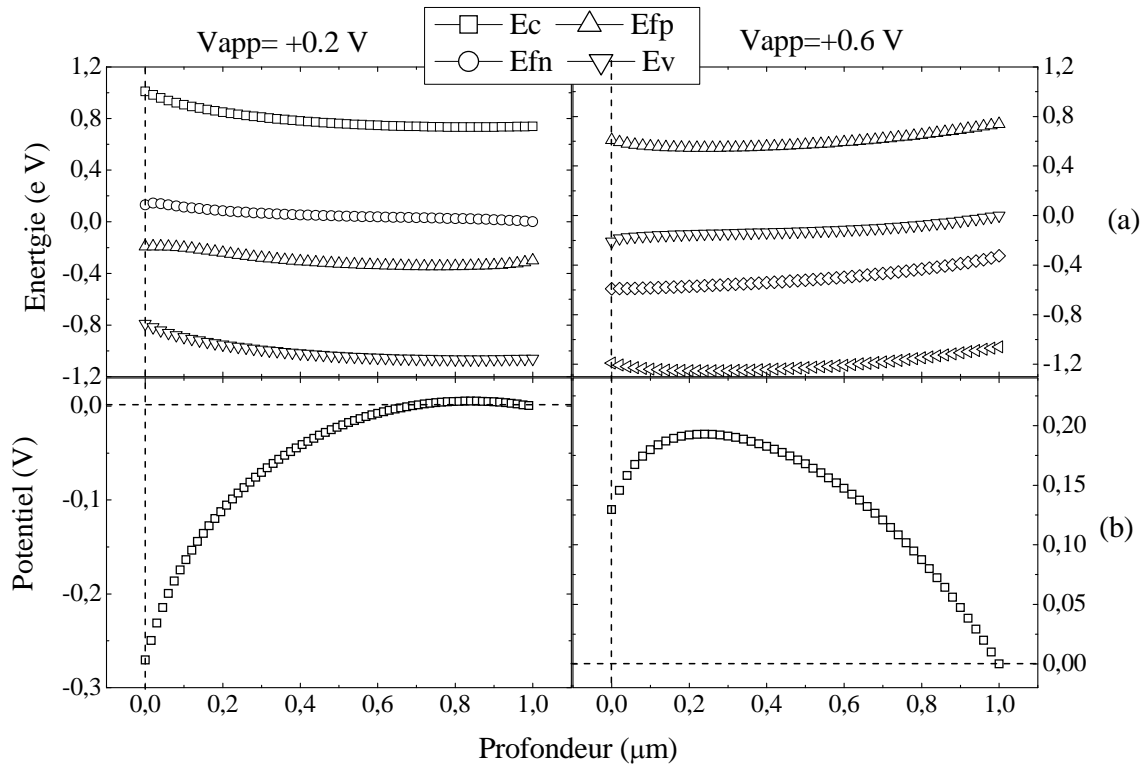
arrière dans la région (III). Dans la région (II) on constate la contribution de la densité du courant due aux électrons et la densité de courant due aux trous. Dans la région (I) on trouve la prédominance de la densité de courant des trous.



**Figure(IV.16)** Distributions spatiales de la densité de courant total  $J_t$ , de la densité de photocourant des électrons  $J_n$  et de la densité de courant des trous  $J_p$  pour des valeurs de polarisation négatives sous éclaircissement.

### IV.2.3.b. Polarisation positive

Le schéma de bandes d'énergie et le profil du potentiel électrostatique obtenus dans la structure métal/a-Si:H éclairée sont présentés sur la figure (IV.17).

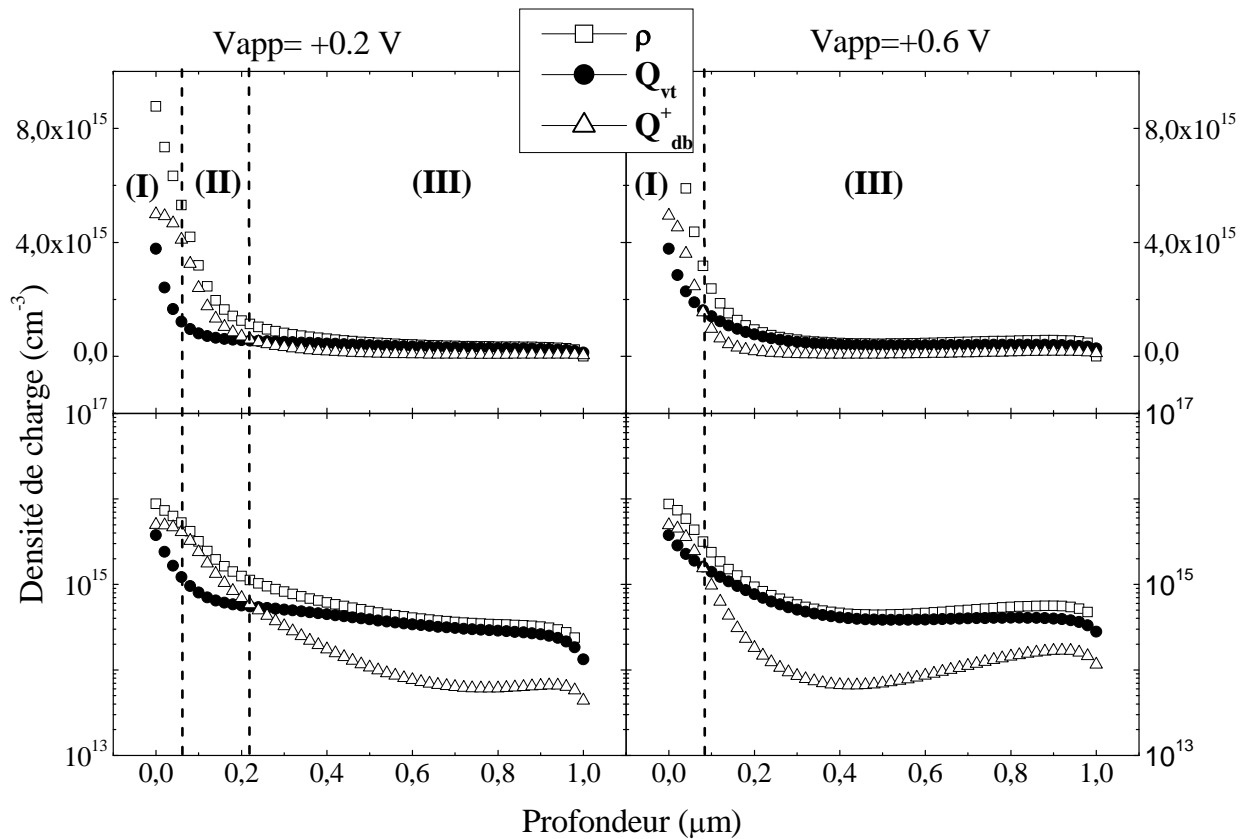


**Figure(IV.17)** (a)Bandes d'énergie pour des polarisations positives.

(b) Potentiel électrostatique pour des polarisations positives.

Sur la figure (IV.18) nous présentons la variation de la densité de charge totale dans le cas de l'éclairement pour deux polarisations positives :  $V_{app}=0,2$  V et  $V_{app}=0,6$ V.

Pour une polarisation de  $V_{app}=0,2$  V, la région (I) de la densité  $\rho(x)$  est comprise entre  $x=0$   $\mu\text{m}$  et  $x=0,06$   $\mu\text{m}$ . La région (II) est comprise entre  $x=0,06$   $\mu\text{m}$  et  $x=0,22$   $\mu\text{m}$ . La région (III) s'étale de  $x=0,22$   $\mu\text{m}$  à  $x=1$  $\mu\text{m}$ . Dans le cas de la polarisation  $V_{app}=0,6$ V, la région (I) se confond avec la région (II) ( $x=0$  $\mu\text{m}$  et  $x=0,08$  $\mu\text{m}$ ). La région (III) est limitée par  $x=0,08$  $\mu\text{m}$  et  $x=1$  $\mu\text{m}$ .



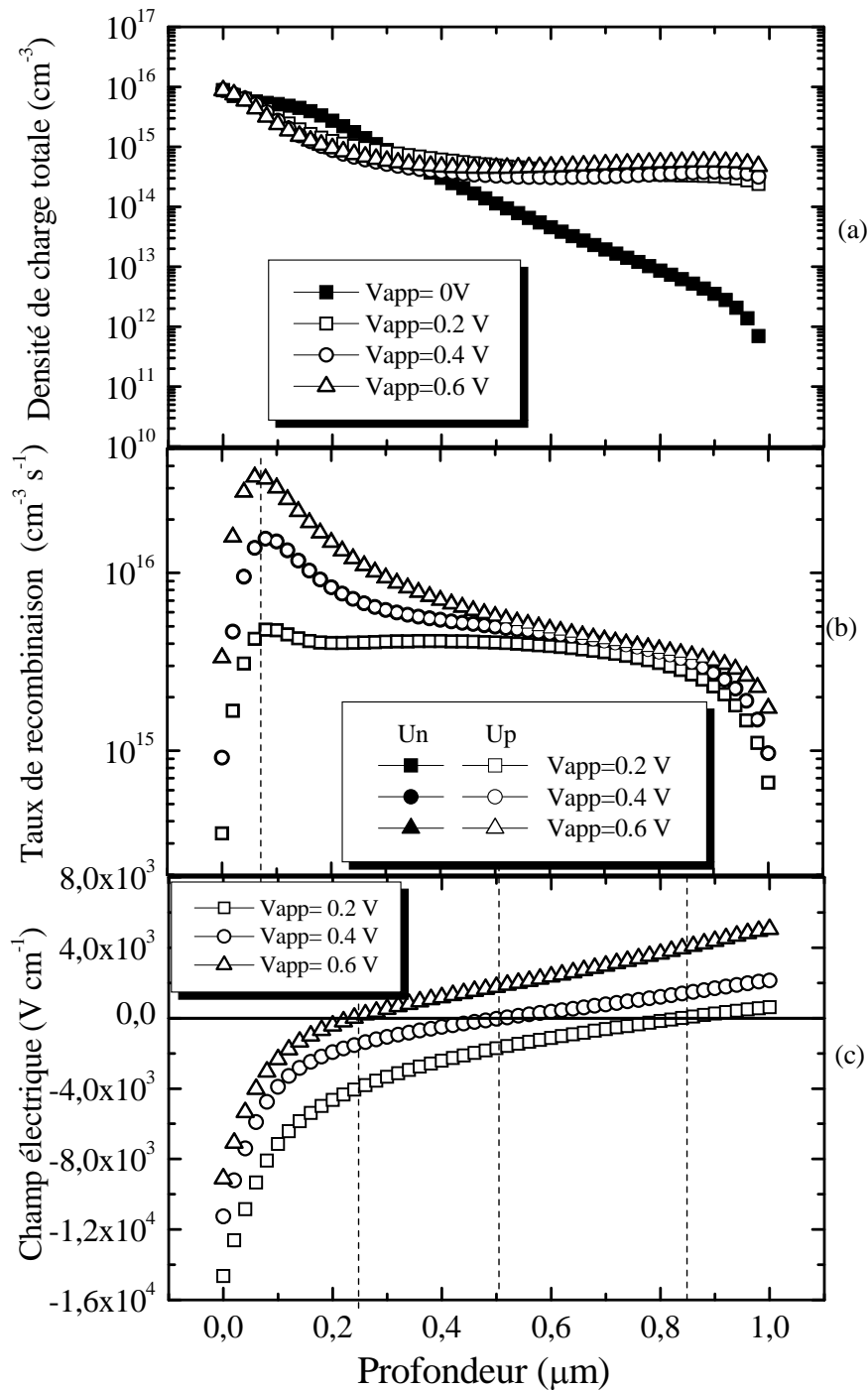
**Figure(IV.18)** Densité de charge totale, concentrations des  $D^+$  et  $Q_{vt}$  pour deux polarisations positives sous éclaircissement.

La figure (IV.19 (a)) montre que l'augmentation de la polarisation appliquée à pour effet de diminuer la densité de charge totale dans le volume et donne naissance à une accumulation de charge dans la zone proche de la surface arrière.

Les taux de recombinaison des électrons et des trous sont égaux et présentent un maximum qui est fixe en position  $x=0,07 \mu\text{m}$  ( figure (IV.19 (b))) et augmente en fonction de la polarisation.

La répartition précédente de la densité de charge totale donne naissance aux profils de champs électriques présentés sur la figure (IV.19 (c)). Dans la zone proche de la surface arrière règne un champs électrique de valeurs positives importantes. Pour  $V_{app}=0,2 \text{ V}$  cette zone est comprise entre la position  $x=0,8 \mu\text{m}$  et la position  $x=1\mu\text{m}$ . Cette zone est d'autant plus large que la polarisation appliquée est importante. Dans le

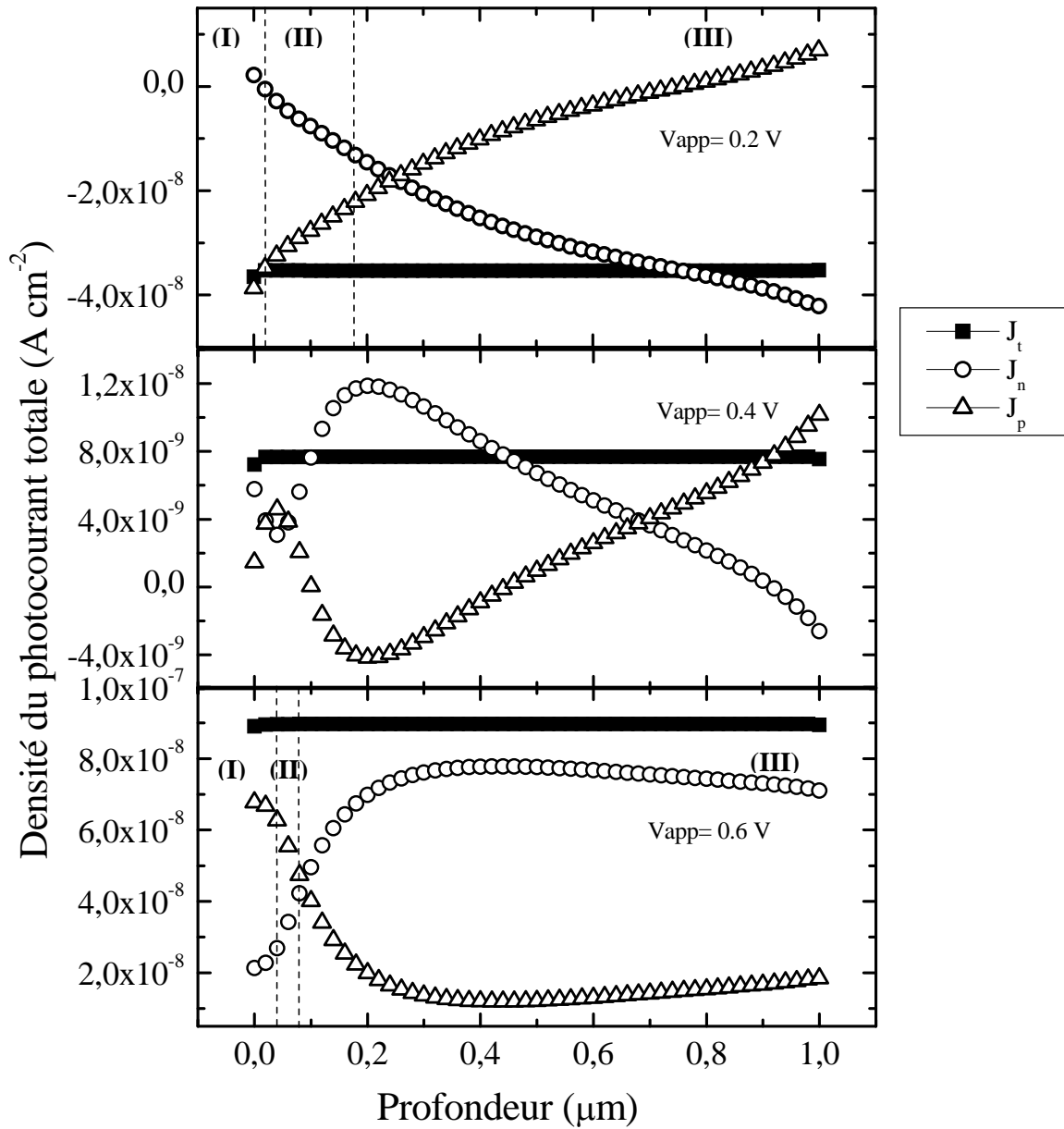
cas de la polarisation  $V_{app}=0,4$  V cette zone s'étend de  $x=0,5\mu\text{m}$  jusqu'à  $x=1\mu\text{m}$ . Pour la polarisation  $V_{app}=0,6$  V cette zone s'étale davantage et elle est limitée par la position  $x=0,24\mu\text{m}$  et la position  $x=1\mu\text{m}$ .



**Figure(IV.19)** Structure métal/a-Si:H à l'état stationnaire à différentes polarisations positives.

(a) Densité de charge totale, (b) Taux de recombinaison, (c) Champ électrique.

La densité du photocourant total présenté sur la figure (IV.20) est la superposition de la densité de courant de la structure polarisée positivement à l'obscurité et la réponse de la structure à l'excitation lumineuse.



**Figure(IV.20)** Distributions spatiales de  $J_t$ ,  $J_n$  et  $J_p$  pour des polarisations négatives.

Pour la polarisation  $V_{app}=0,2\ V$  la prédominance de la densité de courant due aux électrons est marquée par une large région (III) de la structure. Dans la région (II) on trouve la contribution des deux courants. Dans la région (I) on constate la prédominance du courant dû aux trous.

Pour la polarisation  $V_{app}=0,4$  V, la densité du photocourant due aux trous est aussi importante que la densité du photocourant due aux électrons. Dans ces conditions on s'approche de la polarisation pour laquelle la densité du photocourant est nulle. Ceci correspond à la tension en circuit ouvert.

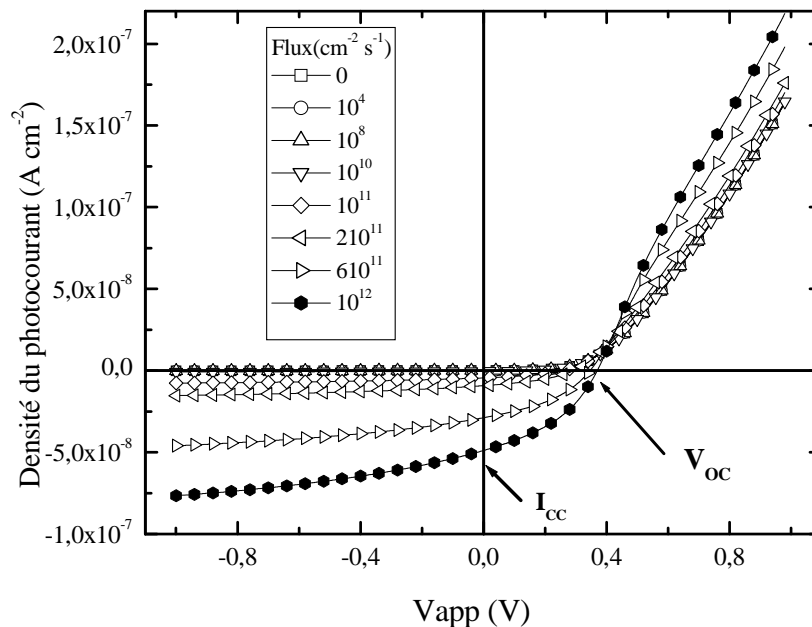
Pour la polarisation  $V_{app}=0,6$  V la prédominance de la densité de courant due aux électrons est constatée dans la région (III) proche de la surface arrière.

#### IV.2.4. Caractéristique courant-tension sous lumière

Sur la figure (IV.21) nous traçons la caractéristique courant-tension pour différentes valeurs de flux. A partir de telles caractéristiques on peut tirer des paramètres fondamentaux de la structure qui sont les suivants :

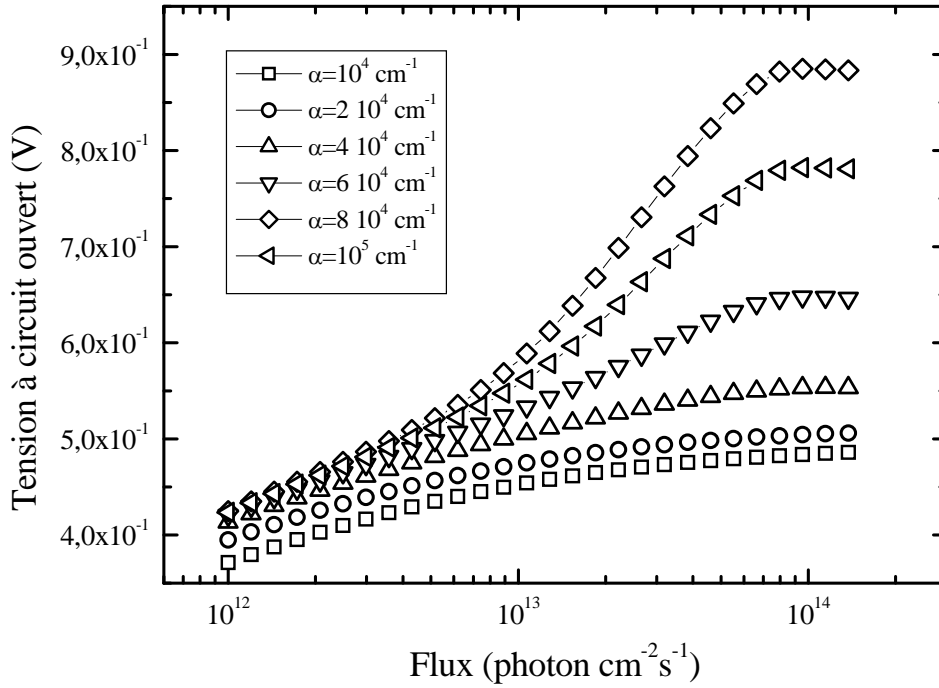
-La tension en circuit ouvert  $V_{oc}$ : c'est la tension pour laquelle le courant qui traverse la structure est nul ( figure (IV.22)).

-Le courant de court circuit  $I_{cc}$ : c'est le courant généré par la structure pour laquelle la tension est nulle ( figure (IV.23)).

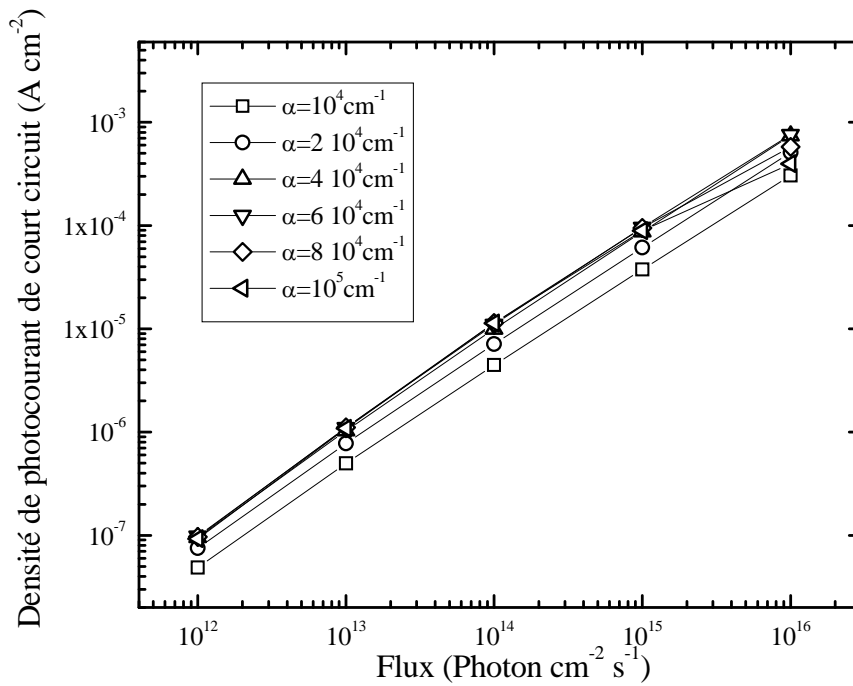


**Figure(IV.21)** Caractéristiques courant-tension sous lumière de la structure obtenues avec les paramètres donnés dans le tableau (IV.1) pour différents flux de lumière.





**Figure(IV.22)** Tension à circuit ouvert en fonction du flux pour plusieurs valeurs de coefficient d'absorption.



**Figure(IV.23)** Densité de photocourant de court circuit en fonction du flux pour plusieurs valeurs du coefficient d'absorption.

La tension en circuit ouvert correspond à une densité de photocourant nulle. C'est à dire:  $J_t(x) = J_n(x) + J_p(x) = 0$

Nous présentons sur la figure (IV.22) la tension en circuit ouvert  $V_{oc}$  calculée pour différentes valeurs du coefficient d'absorption  $\alpha$  en fonction du flux de lumière.

Pour les faibles coefficients d'absorption, la tension en circuit ouvert augmente, alors que pour les fortes valeurs du coefficient d'absorption  $V_{oc}$  montre une croissance rapide pour atteindre une saturation.

Sur la figure (IV.23) nous présentons l'allure du courant de court circuit en fonction du flux pour différentes valeurs du coefficient d'absorption  $\alpha$ . La présentation logarithmique du courant de court circuit montre une allure linéaire en fonction du flux de lumière pour les différentes valeurs du coefficient d'absorption. On peut voir à partir de cette figure que la relation entre  $I_{cc}$  et le flux est linéaire [41].

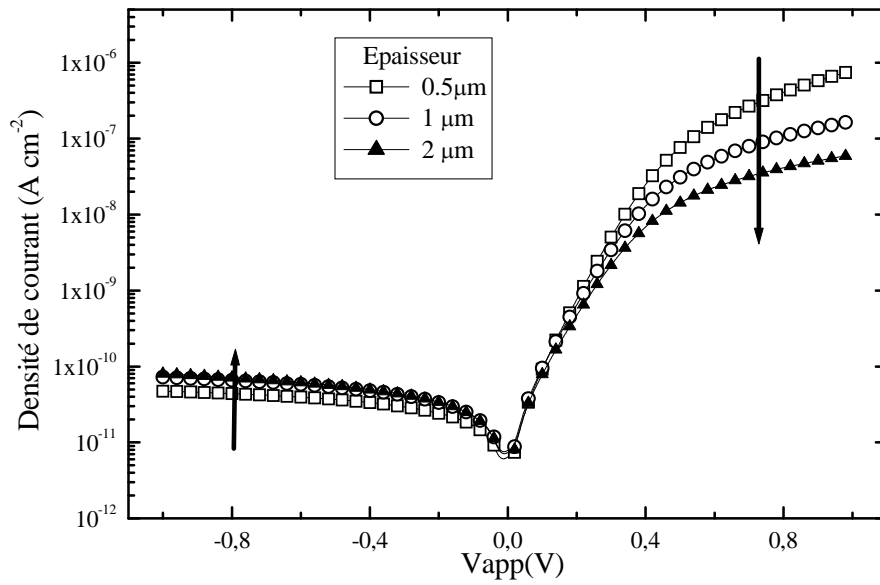
#### **IV.2.5. Etude de l'influence des paramètres sur la caractéristique**

Dans cette partie nous allons voir l'influence de certains paramètres sur la caractéristique courant-tension sous obscurité et sous lumière.

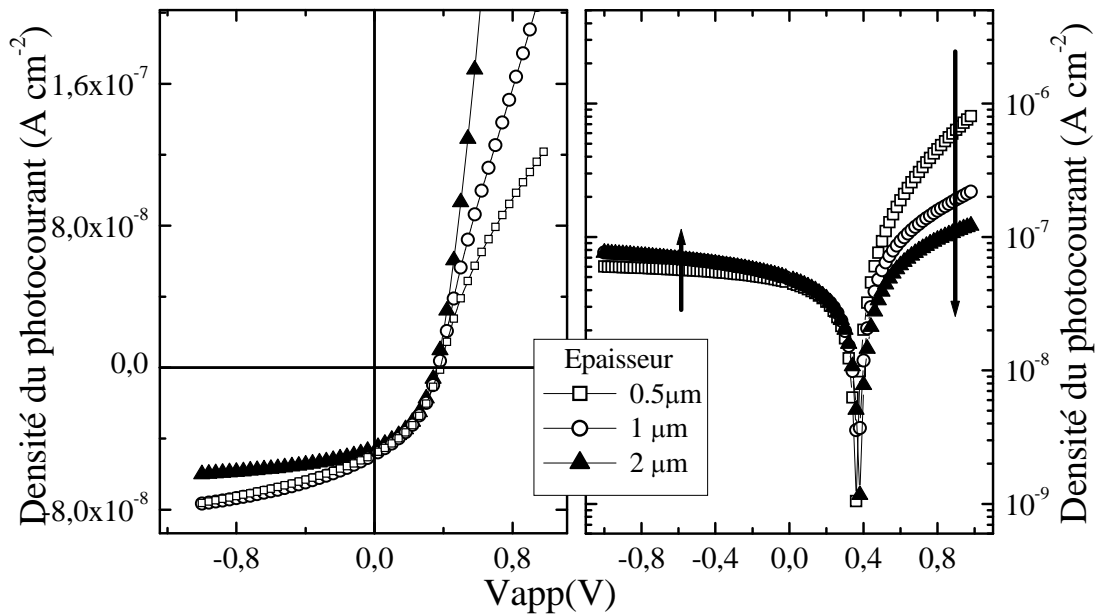
##### **IV.2.5.a. Influence de l'épaisseur de la structure métal/a-Si:H**

Afin d'étudier l'influence de l'épaisseur de la structure sur la caractéristique courant-tension, nous présentons sur les figures (IV.24 et 25) la caractéristique courant-tension de la structure sous obscurité et sous lumière pour trois valeurs d'épaisseurs  $d_1=0.5\mu\text{m}$ ,  $d_2=1\mu\text{m}$  et  $d_3=2\mu\text{m}$ . Nous remarquons que la variation de l'épaisseur a un effet similaire sur la caractéristique courant-tension sous obscurité et sous lumière.

Les allures de la caractéristique montrent qu'en polarisations négatives la densité de courant total est peu modifiée par l'épaisseur. La structure est bloquante dans ce cas.



**Figure(IV.24)** Caractéristique courant-tension pour différentes épaisseurs de la structure sous obscurité.



**Figure(IV.25)** Caractéristique courant-tension pour des valeurs d'épaisseurs de la structure sous lumière

Sous polarisation positive la densité de courant total augmente lorsque l'épaisseur diminue. Cette augmentation apparaît davantage pour les fortes polarisations positives.

Pour des polarisations positives, la densité de courant décroît en fonction de l'épaisseur de la structure métal/a-Si:H.

Sur le tableau (IV.2) nous reportons la tension  $V_{oc}$  et de la densité de courant  $I_{cc}$  pour les trois épaisseurs de la structure.

Epaisseur ( $\mu\text{m}$ )	$V_{oc}$ (V)	$I_{cc}$ ( $\text{Acm}^{-2}$ )
0,5	0,38	$4,88 \cdot 10^{-8}$
1	0.37	$4,84 \cdot 10^{-8}$
2	0,36	$4,88 \cdot 10^{-8}$

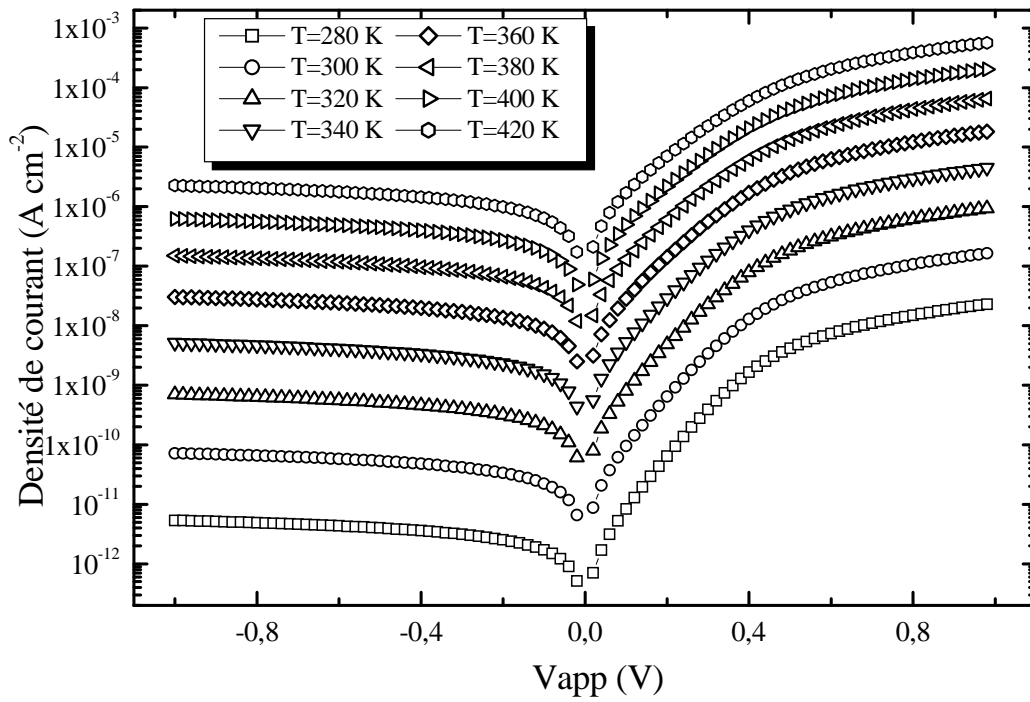
Tableau (IV.2):  $V_{oc}$  et  $I_{CC}$  pour trois épaisseurs de la structure.

#### IV.2.5.b. Influence de la température

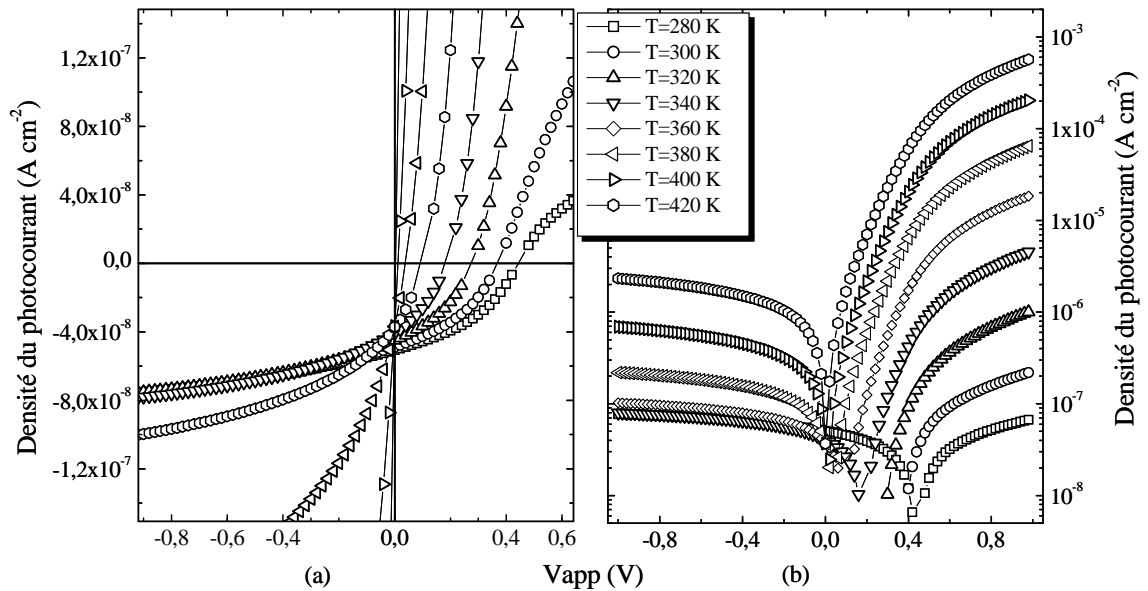
Sur la figure (IV.26) nous présentons la caractéristique courant-tension à différentes températures dans l'intervalle 280K à 420K avec un pas de 20K. Nous remarquons que la densité de courant augmente progressivement de  $T=280\text{K}$  à  $T=420\text{K}$ .

En polarisation négative, dans la zone de charge d'espace, il y a génération thermique de porteurs. Lorsqu'on augmente la température la génération thermique augmente. Ceci fait augmenter la densité de courant en polarisation négative.

Pour des températures supérieures à  $T_c$  et  $T_v$  les approximations des expressions analytiques de la densité de charge  $Q_{ct}$  et de la densité de charge  $Q_{vt}$  et les taux de recombinaison sur les états des queues de bandes  $U_{ct}$  et  $U_{vt}$  ne sont plus valables. Dans ce cas, les densités de charge et les taux de recombinaison sont calculés numériquement.



Figure(IV.26) Caractéristique courant-tension pour différentes températures sous obscurité.



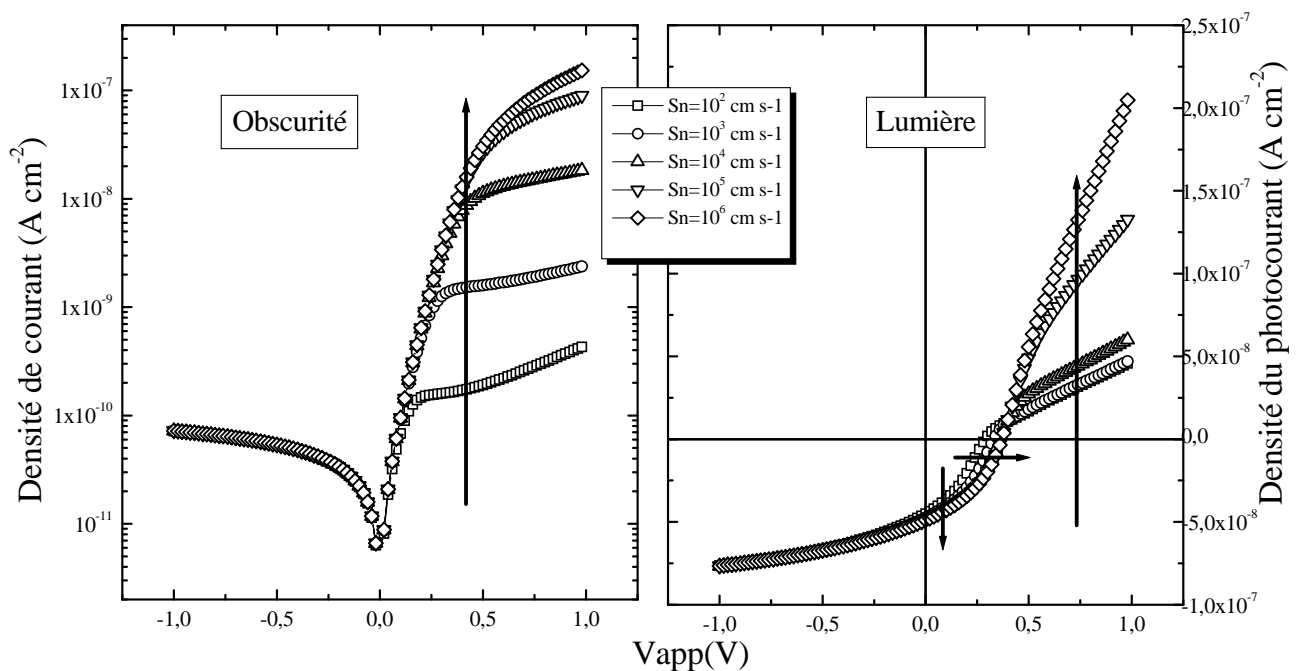
Figure(IV.27) Caractéristique courant-tension pour différentes températures sous lumière  
 (a) Echelle linéaire, (b) Echelle logarithmique.

### IV.2.5.c. Influence de la vitesse de recombinaison à la surface arrière

Dans le chapitre III nous avons considéré le contact Ohmique à la surface arrière de la structure métal/a-Si:H avec une vitesse de recombinaison des porteurs. Nous étudions ici l'effet de la recombinaison des électrons ( $S_n$ ) et de la recombinaison des trous ( $S_p$ ).

#### IV.2.5.c.1 Vitesse de recombinaison des électrons $S_n$

Nous présentons sur la figure (IV.28) l'allure des caractéristiques courant-tension sous obscurité et sous lumière pour différentes valeurs de la vitesse de recombinaison des électrons à la surface arrière  $S_n$ . La valeur de  $S_n$  est prise entre  $10^2 \text{ cm s}^{-1}$  et  $10^6 \text{ cm s}^{-1}$ .



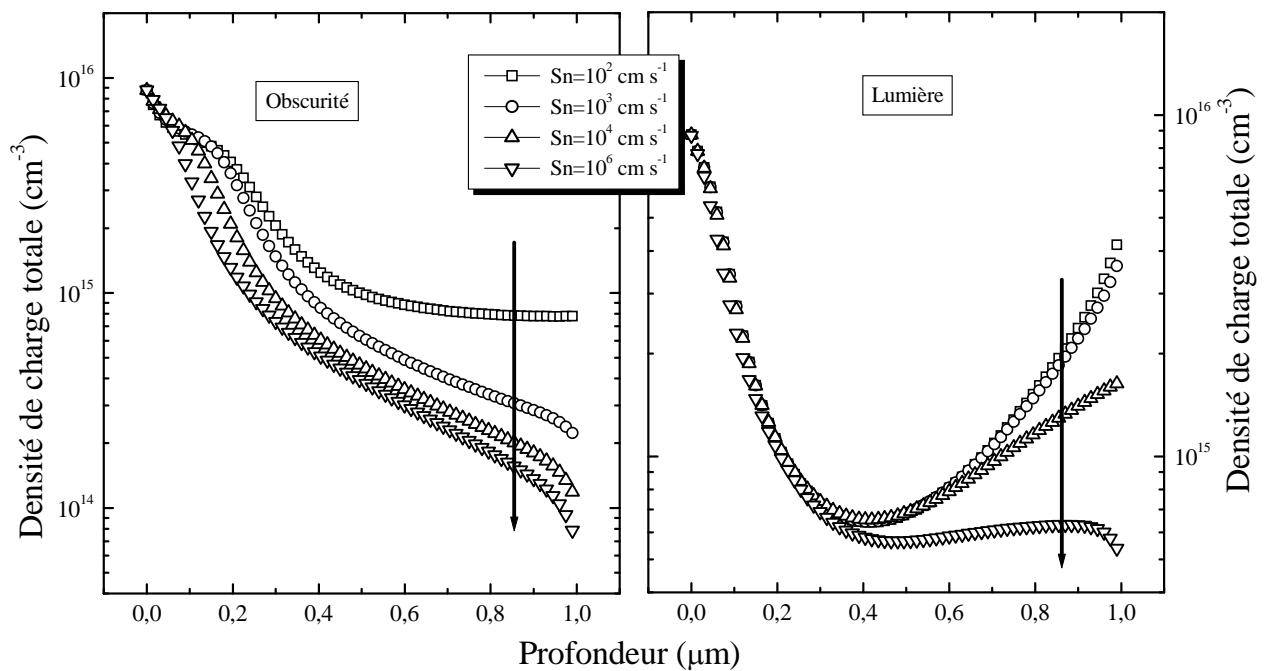
**Figure(IV.28)** Caractéristique courant-tension pour différentes vitesses de recombinaison des électrons à la surface arrière.

Sous polarisation négative, la caractéristique courant-tension montre que la densité de courant est insensible à  $S_n$  sous obscurité et sous lumière.

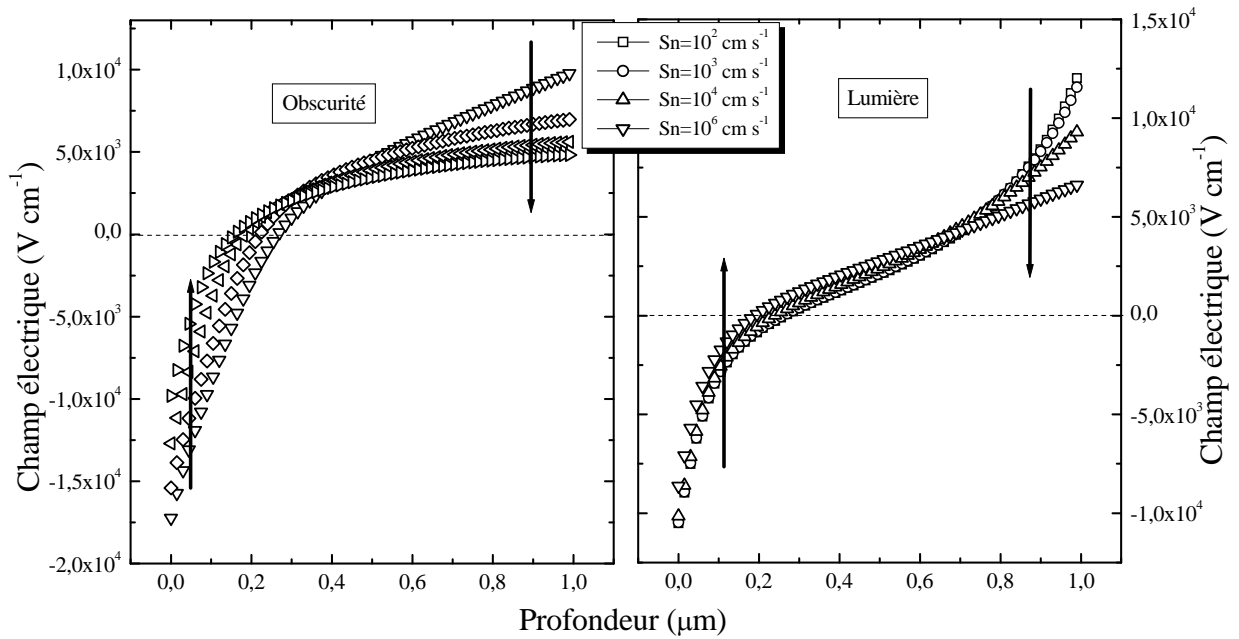
Pour les polarisations positives et sous obscurité on constate que l'augmentation de  $S_n$  a pour effet d'augmenter la densité de courant total. Sous éclaircissement, l'augmentation de  $S_n$  a pour effet d'augmenter la densité de courant total en valeur absolue dans le cas de faible polarisation positive ainsi que dans le cas de forte polarisation positive.  $I_{cc}$  et  $V_{oc}$  augmente quand  $S_n$  augmente.

Afin de comprendre l'effet de  $S_n$ , nous étudions le profil de la densité de charge (figure (IV.29)) et le profil du champs électrique ( figure ((IV.30))).

Les figures (IV.29 et 30) montrent l'effet de la variation de  $S_n$  sur le profil de la densité de charge totale et sur le profil du champ électrique pour une polarisation positive  $V_{app}=0.7$  V. On constate que la densité de charge totale est conditionnée par la vitesse de recombinaison des électrons  $S_n$ . La densité de charge totale décroît au voisinage de la surface quand  $S_n$  augmente, sous obscurité et sous lumière.



**Figure(IV.29)** Profils de la densité de charge totale pour différentes vitesses de recombinaison des électrons à la surface arrière pour une polarisation  $V_{app}=0.7$  V.



**Figure(IV.30)** Profils du champ électrique pour différentes vitesses de recombinaison des électrons à la surface arrière pour une polarisation  $V_{app}=0.7$  V.

La présence de la densité charge à la surface arrière donne naissance au champ électrique qui est d'autant plus élevé que l'accumulation de charge est importante

#### **IV.2.5.c.2** *Vitesse de recombinaison des trous $S_p$*

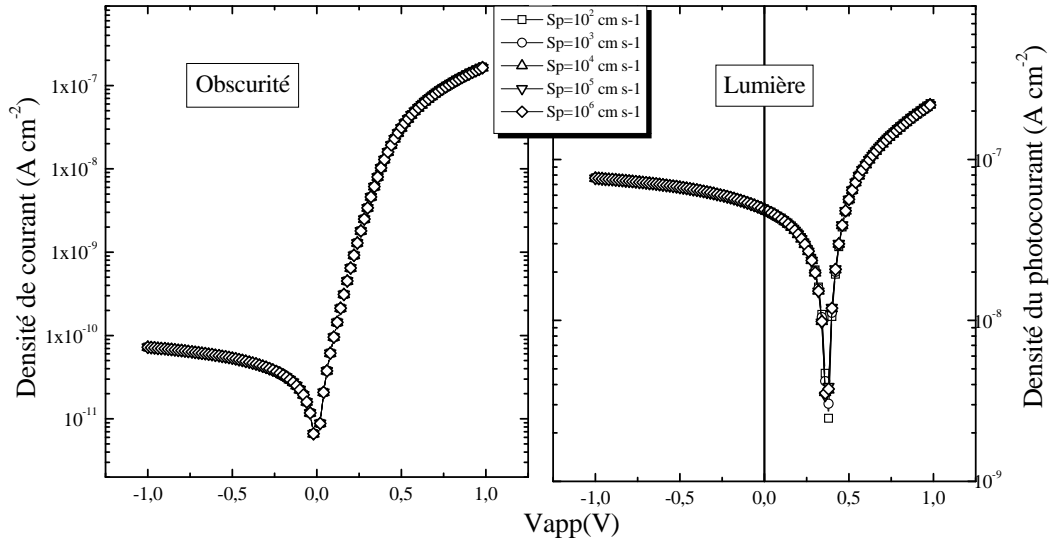
Nous avons représenté dans la figure(IV.31) la caractéristique courant-tension sous obscurité et sous lumière pour des valeurs de vitesse de recombinaison des trous à la surface arrière  $S_p$  comprises entre  $S_p= 10^2$  cm s<sup>-1</sup> et  $S_p= 10^6$  cm s<sup>-1</sup>.

Nous avons constaté que la variation de  $S_p$  influe légèrement la caractéristique courant-tension. Les figures (IV.32 et 33) montrent l'évolution de la densité de charge totale ainsi que le champs électrique le long de la structure pour des valeurs de vitesse de recombinaison des trous en surface. La polarisation appliquée est de  $V_{app}=+0.7$  V.

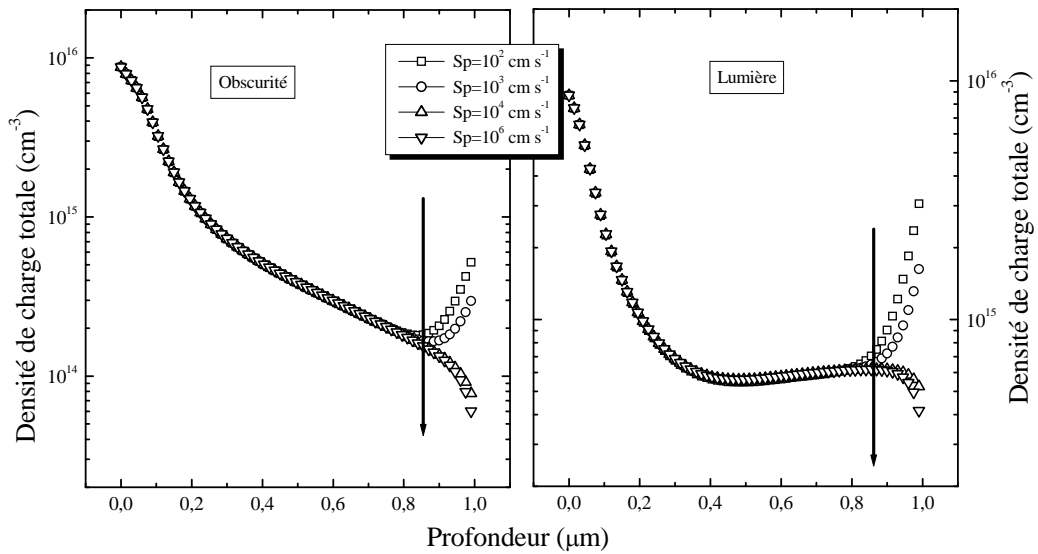
Les fortes valeurs de  $S_p$  vérifient la condition de neutralité électrique à la surface arrière, alors que pour de faibles valeurs de  $S_p$ , on remarque qu'il y a accumulation de charges à la surface arrière. Le profil du champ électrique est peu modifié par cette accumulation. L'invariance de la densité de courant totale est due au fait que la



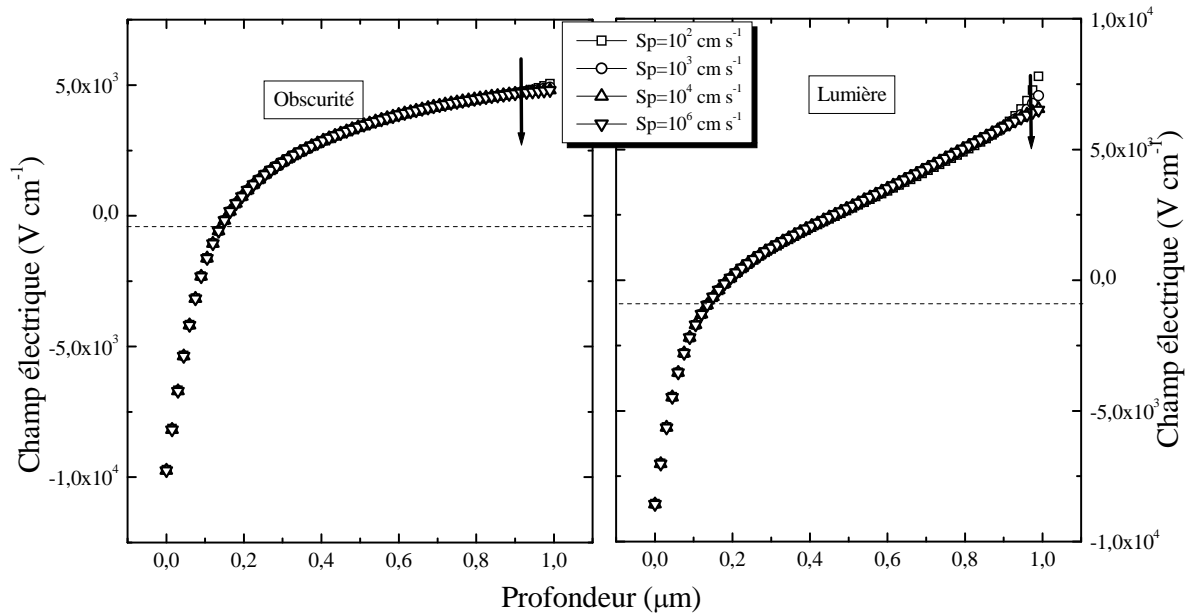
concentration des trous dans la zone proche de la surface est inférieure à la concentration des électrons



**Figure(IV.31)** Caractéristique courant-tension pour différentes vitesses de recombinaison des trous à la surface arrière.



**Figure(IV.32)** Densité de charge totale pour différentes vitesses de recombinaison des trous à la surface arrière pour une polarisation positive  $V_{app}=0.7$  V.



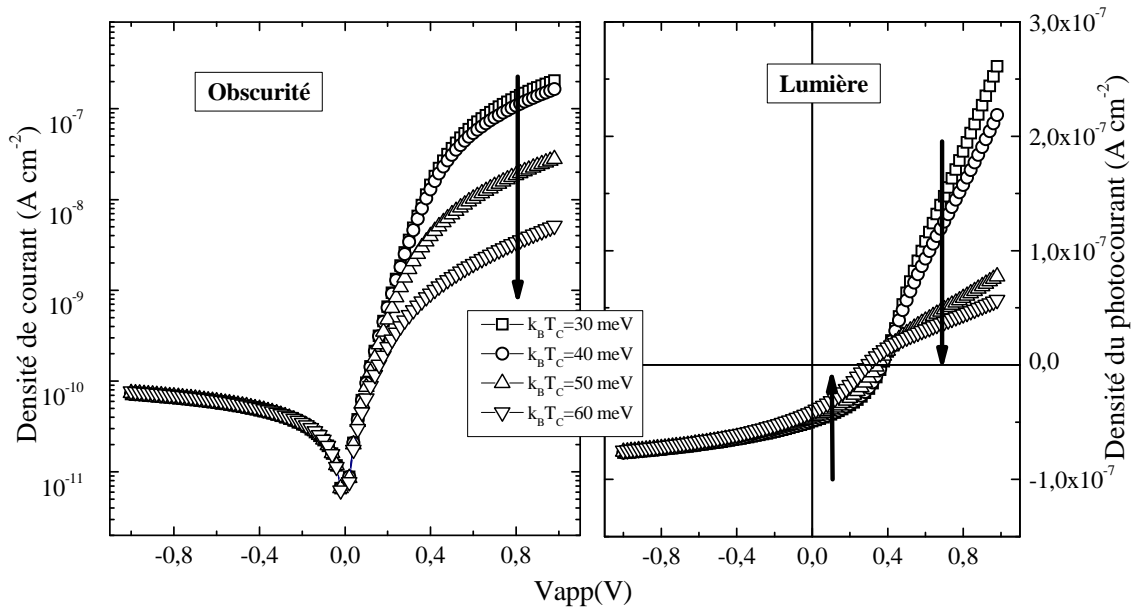
**Figure(IV.33)** Champs électrique pour différentes vitesses de recombinaison des trous à la surface arrière à  $V_{app}=0.7$  V.

#### IV.2.5.d. Influence des paramètres du matériau

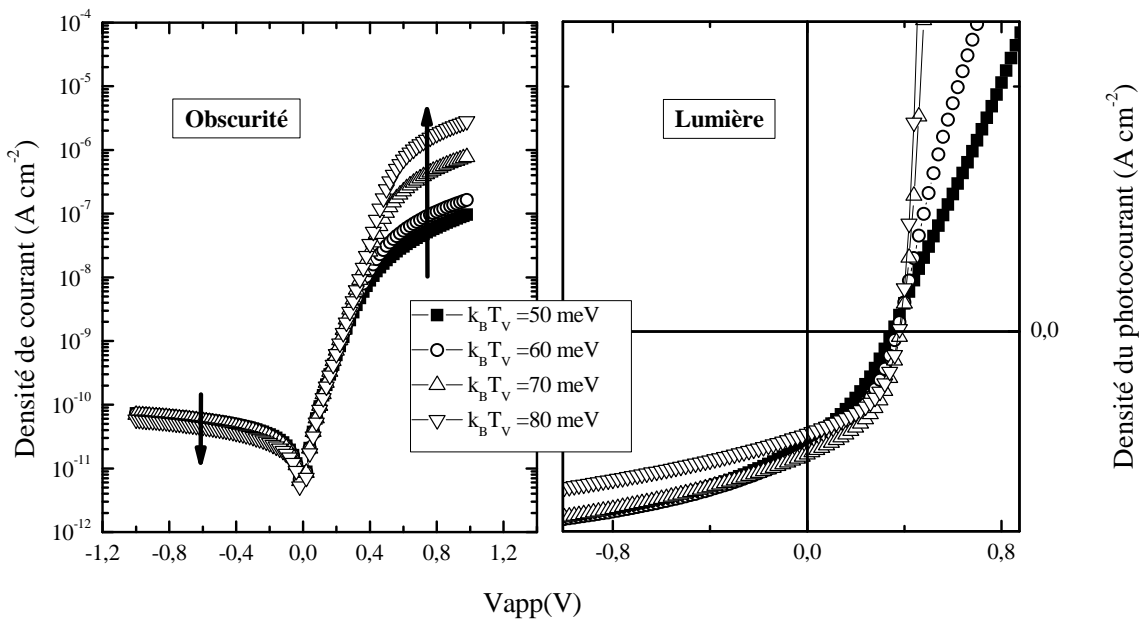
La figure (IV.34) présente la variation de la caractéristique sous obscurité et sous lumière pour différentes valeurs de pentes caractéristiques de la QBC comprises entre  $k_B T_c = 30$  meV et  $k_B T_c = 60$  meV. En polarisation positive, l'augmentation de la pente caractéristique  $k_B T_c$  entraîne la diminution de la densité de courant.

La figure (IV.35) présente la variation de la caractéristique pour différentes valeurs de pentes caractéristiques de la QBV. En polarisation directe, la densité de courant augmente lorsqu'on augmente la pente caractéristique  $k_B T_v$ .

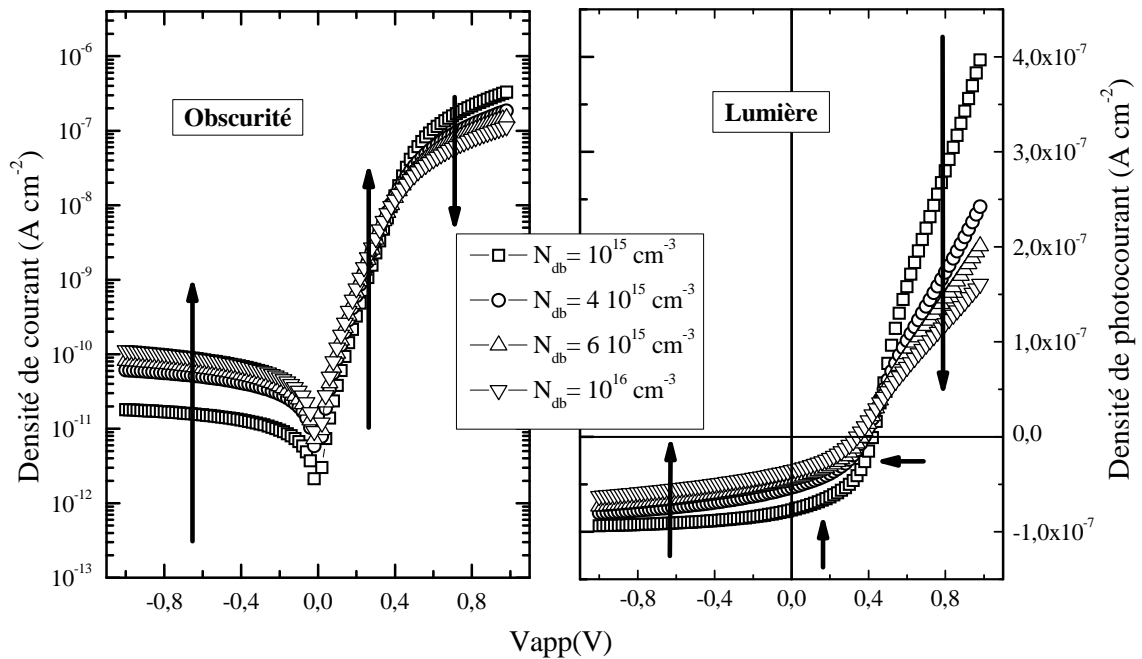
Sur la figure (IV.36) nous présentons la variation de la caractéristique courant-tension pour différentes concentrations de liaisons pendantes. L'augmentation de la concentration des liaisons pendantes a pour effet de diminuer la densité de courant total dans le cas de polarisation positive.



**Figure(IV.34)** Caractéristique courant tension pour différentes valeurs de la pente caractéristique de la QBC.



**Figure(IV.35)** Caractéristique courant-tension pour différentes valeurs de la pente caractéristique de la QBV.

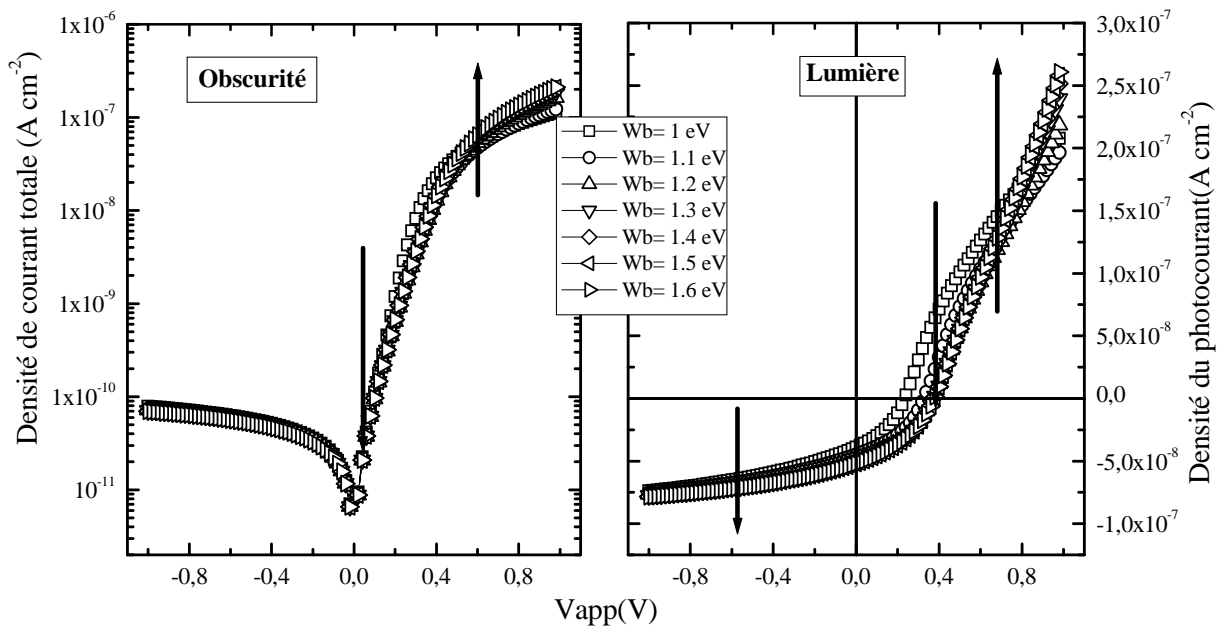


**Figure(IV.36)** Caractéristique courant-tension pour différentes densités totales de liaisons pendantes.

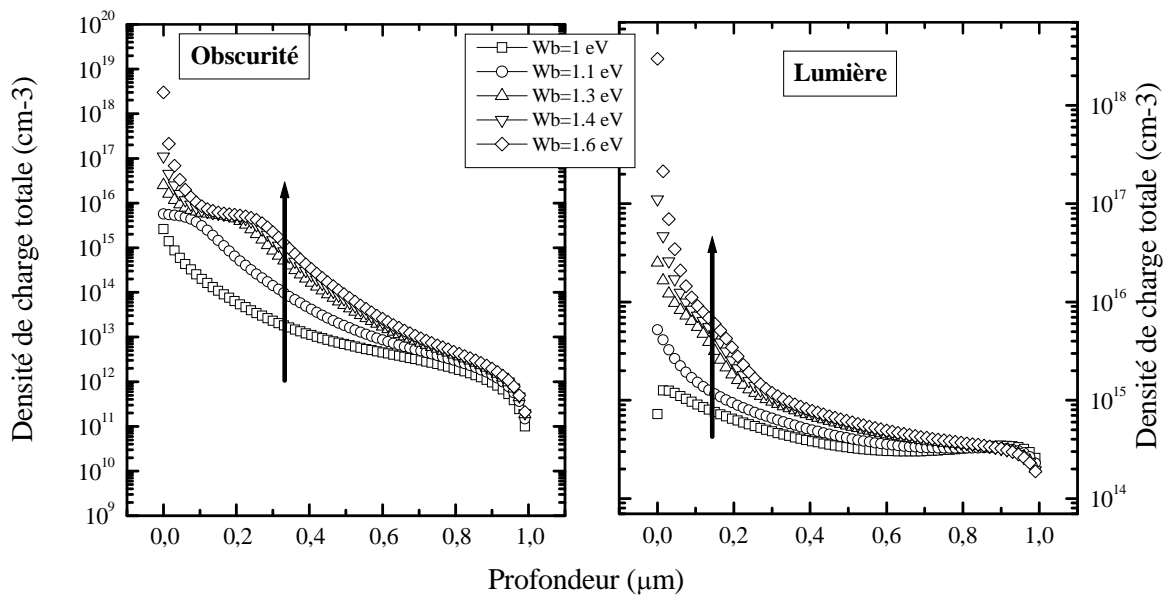
L'ensemble des courbes présentées sur les figures (IV.34 à 36) montre que la densité de courant sous polarisation négative est fortement affectée par la densité totale de liaisons pendantes, et que les pentes caractéristiques  $k_B T_c$  et  $k_B T_v$  affectent peu la densité de courant.

#### IV.2.5.e. Influence de la barrière de potentiel métal/a-Si:H

Sur la figure (IV.37) nous présentons la caractéristique courant-tension de la structure métal/a-Si:H sous obscurité ou sous lumière pour différentes valeurs de la hauteur de la barrière métal/semiconducteur comprise entre  $W_b=1$  eV et  $W_b=1,6$  eV.



**Figure(IV.37)** Caractéristique courant-tension pour différentes hauteurs de la barrière de potentiel métal/semiconducteur à la surface avant.



**Figure(IV.38)** Profils de la densité de charge totale pour différentes hauteurs de la barrière  $W_b$  à  $V_{app}=0.2V$ .

Sur la caractéristique à l'obscurité, l'augmentation de la hauteur de la barrière  $W_b$  provoque une augmentation de la densité de courant totale dans le cas de fortes polarisations positives. Aux faibles polarisations positives, la densité de courant diminue.

Sous éclairage, en polarisation négative, l'augmentation de la hauteur de la barrière provoque l'augmentation de la densité de courant. La répartition spatiale de la densité de charge totale, pour différentes valeurs de la barrière de potentiel à la surface avant  $W_b$  et pour une polarisation de  $V_{app}=0,2$  V, sont présentées sur la figure (IV.38).

Dans la région proche de la surface avant, la densité de charge d'espace est d'autant plus importante que la hauteur de la barrière de potentiel à la surface  $W_b$  est grande.

### IV.2.6. Structure métal/a-Si:H en régime transitoire

Dans le modèle du multiépiage, chaque type de porteurs interagit avec un ensemble de pièges. Lors de la traversée de la structure, les porteurs libres qui rencontrent des centres profonds demeurent plus longtemps que ceux qui rencontrent des centres peu profonds. De ce fait, la réponse transitoire des porteurs peut donner des informations concernant la distribution des états localisés dans le gap.

Dans cette partie nous allons étudier la variation temporelle de la densité du photocourant causée par un changement d'état stationnaire. Nous étudions la réponse transitoire de la structure métal/a-Si:H à la rupture de l'éclairement.

#### IV.2.6.a. Réponse transitoire de la structure métal/a-Si:H

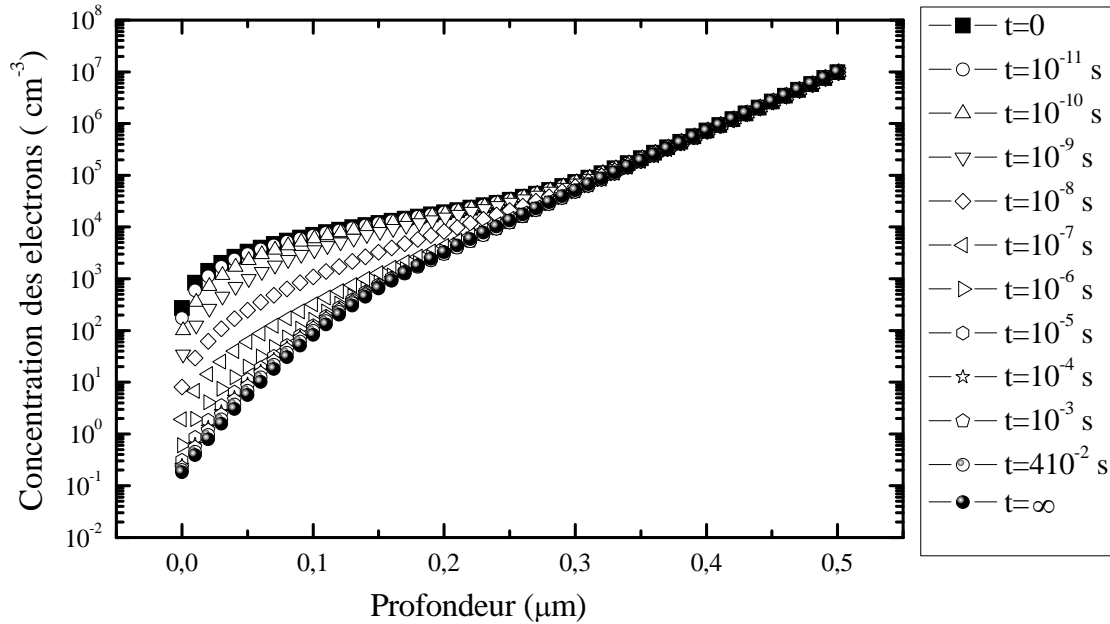
Nous considérons une structure métal/a-Si:H éclairée par un flux de photon. Le premier calcul consiste à suivre l'évolution temporelle des différentes grandeurs dans la structure après la rupture de l'éclairement. Dans cette partie, la polarisation appliquée aux bornes de la structure métal/a-Si:H est nulle. Le taux de génération avant la rupture de l'éclairement est pris égal à  $10^{14} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ , et l'épaisseur  $d$  est égale à  $0.5 \text{ } \mu\text{m}$ .

Sur les figures (IV.39 et 40), nous présentons l'évolution dans le temps de la concentration des porteurs libres ( électrons et trous respectivement ) le long de la structure. Ces courbes indiquent que la concentration des électrons décroît rapidement. Cette évolution est monotone pour les électrons. Pour les trous, l'évolution montre une variation faible jusqu'à  $t=10^{-7} \text{ s}$ . ensuite la concentration décroît pour s'approcher de l'état stationnaire final.

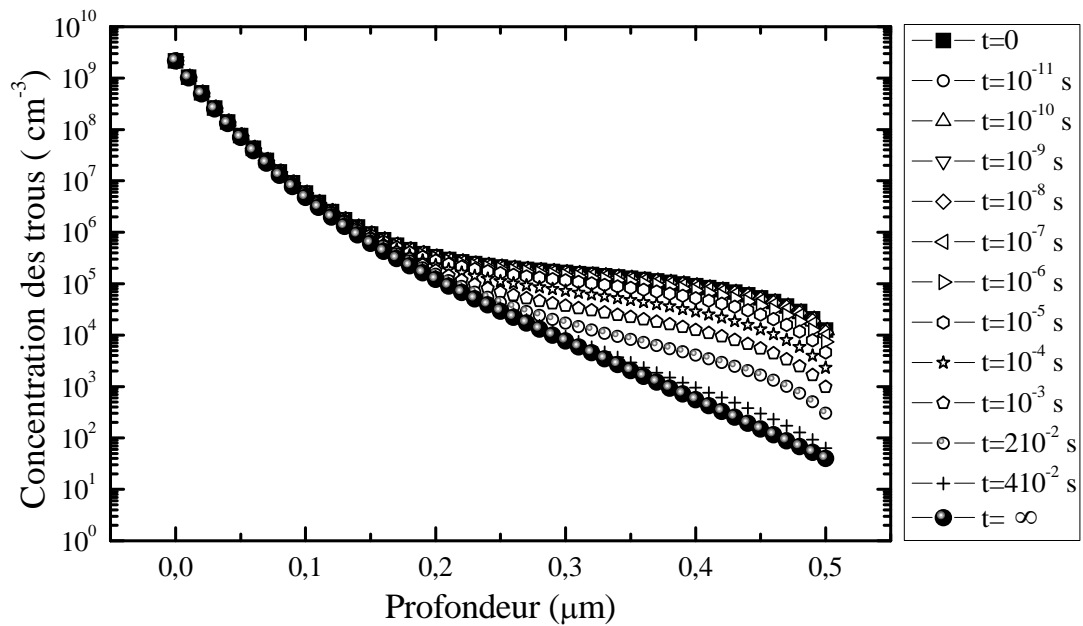
La distribution du potentiel électrochimique des électrons  $V_n$  le long de la structure au cours du temps est présentée sur la figure (IV.41). Elle évolue à partir d'un état stationnaire à  $t=0 \text{ s}$  en se rapprochant de l'état stationnaire finale. On peut dire qu'à l'instant  $t=410^{-2} \text{ s}$  le potentiel est très proche de celui de l'état stationnaire final sous obscurité.

Sur la figure (IV.42) nous présentons l'évolution du potentiel électrochimique des trous  $V_p$  le long de la structure au cours du temps. On remarque que le potentiel électrochimique des trous évolue peu. On peut dire que la concentration des trous reste

inchangée pendant l'intervalle de temps ( $0 \text{ s}, 10^{-7} \text{ s}$ ). Au delà de  $t=10^{-7} \text{ s}$  le potentiel électrochimique des trous chute pour se rapproche de l'état stationnaire final.

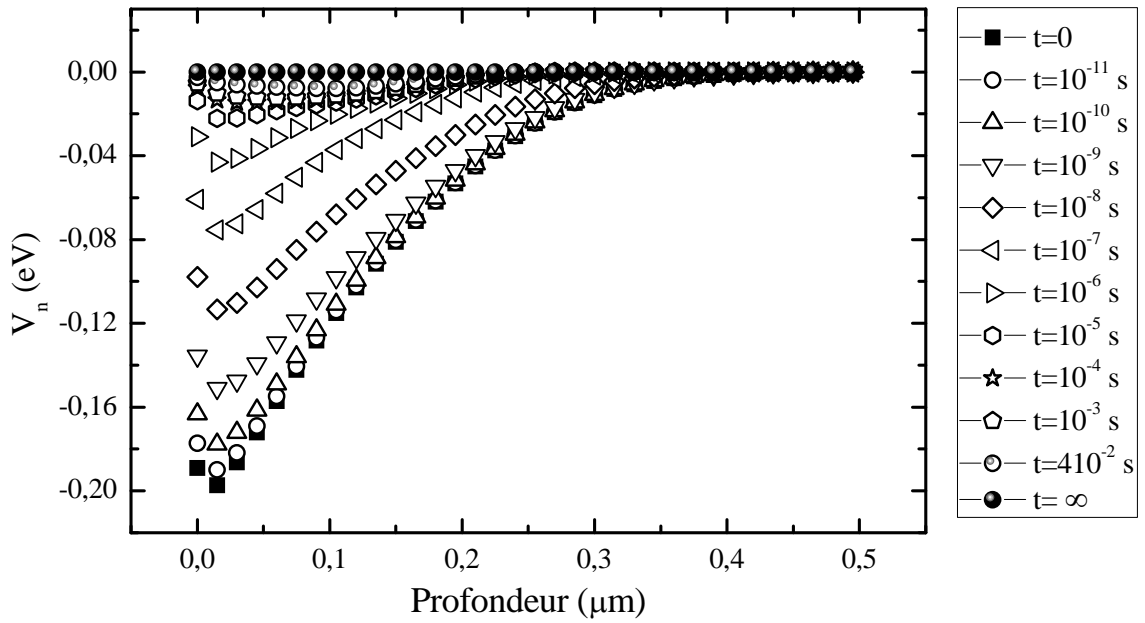


Figure(IV.39) Profil de concentration des électrons dans la structure à différents instants.

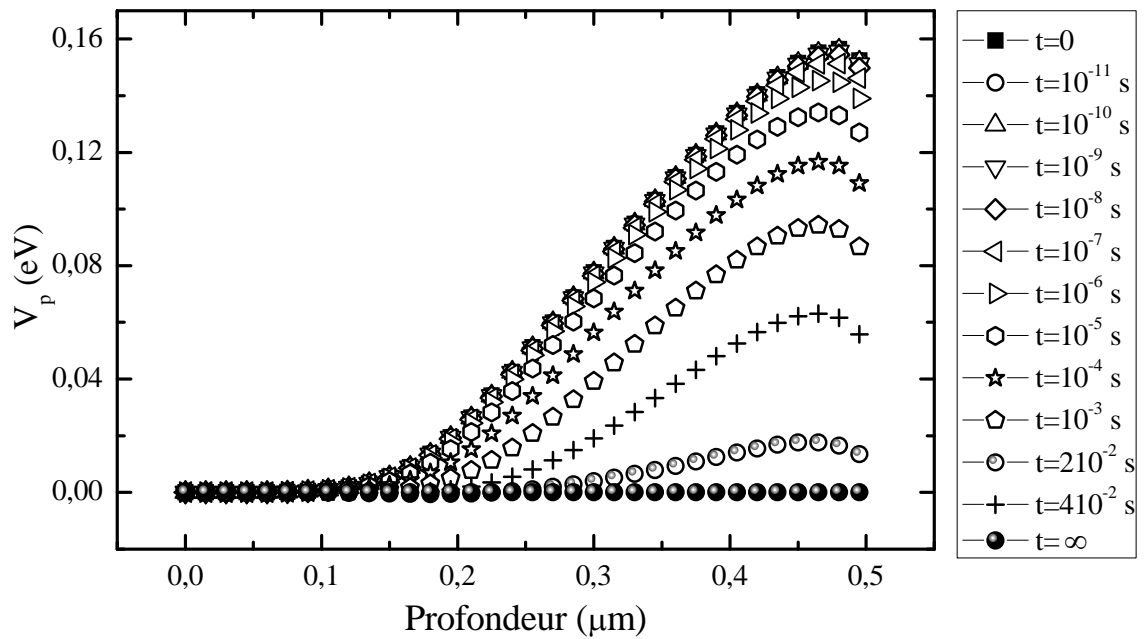


Figure(IV.40) Profil de concentration des trous dans la structure à différents instants.





Figure(IV.41) Profil du potentiel électrostatique des électrons dans la structure à différents instants.



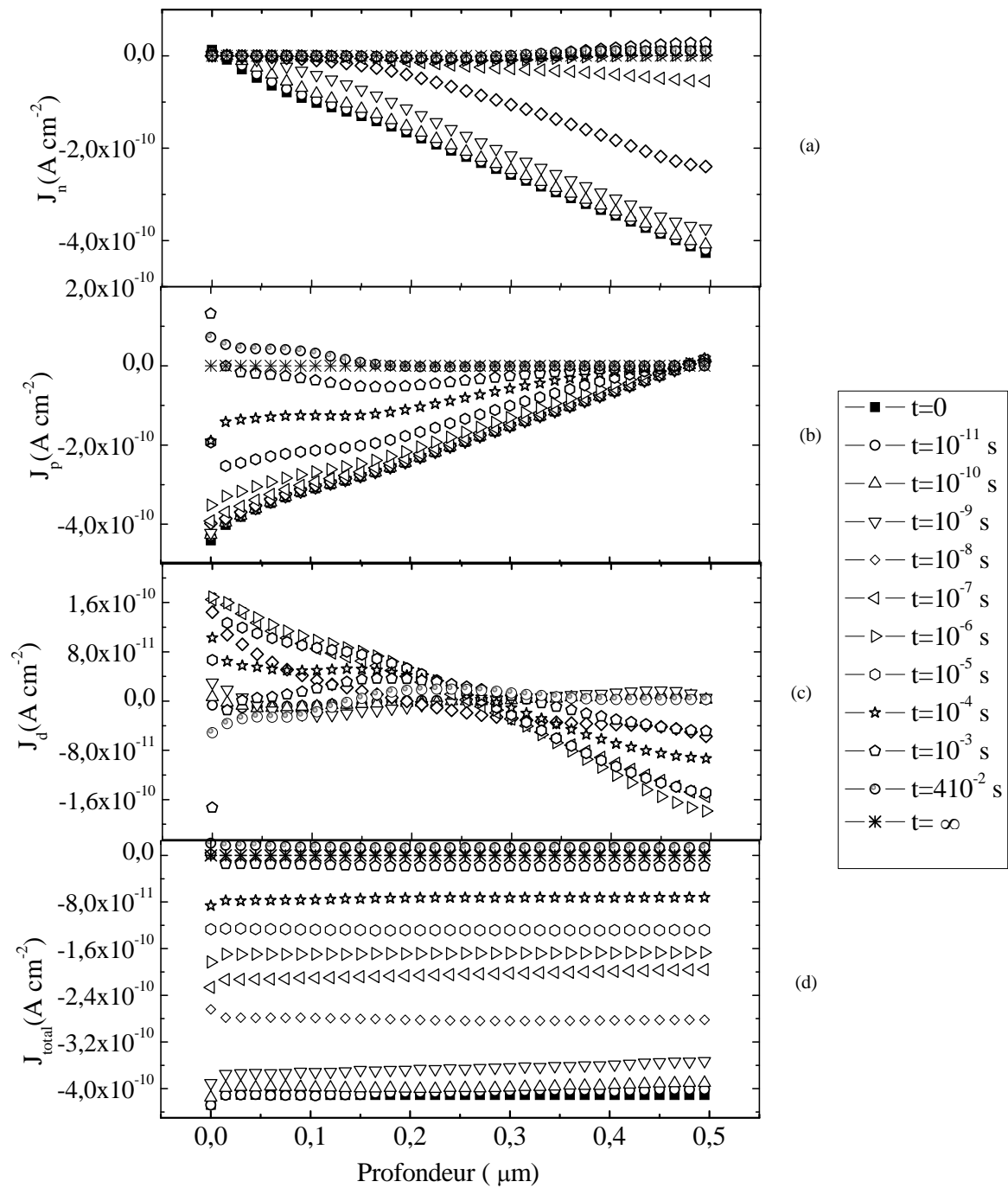
Figure(IV.42) Profil du potentiel électrostatique des trous dans la structure à différents instants.

Sur la figures (IV.43) nous présentons le profil de la densité de courant des électrons, celui des trous, celui de la densité de courant de déplacement et enfin celui de la densité de courant total.

Le profil de la densité de courant des électrons évolue à partir d'un état stationnaire à  $t=0$  s de façon monotone en se rapprochant de l'état stationnaire final.

La densité de courant des trous évolue de l'état stationnaire initial pour ce rapprocher de l'état stationnaire final.

La densité de courant total présente une allure constante le long de la structure. Au cours du temps cette densité diminue en valeur absolue pour s'approcher de l'état stationnaire final.

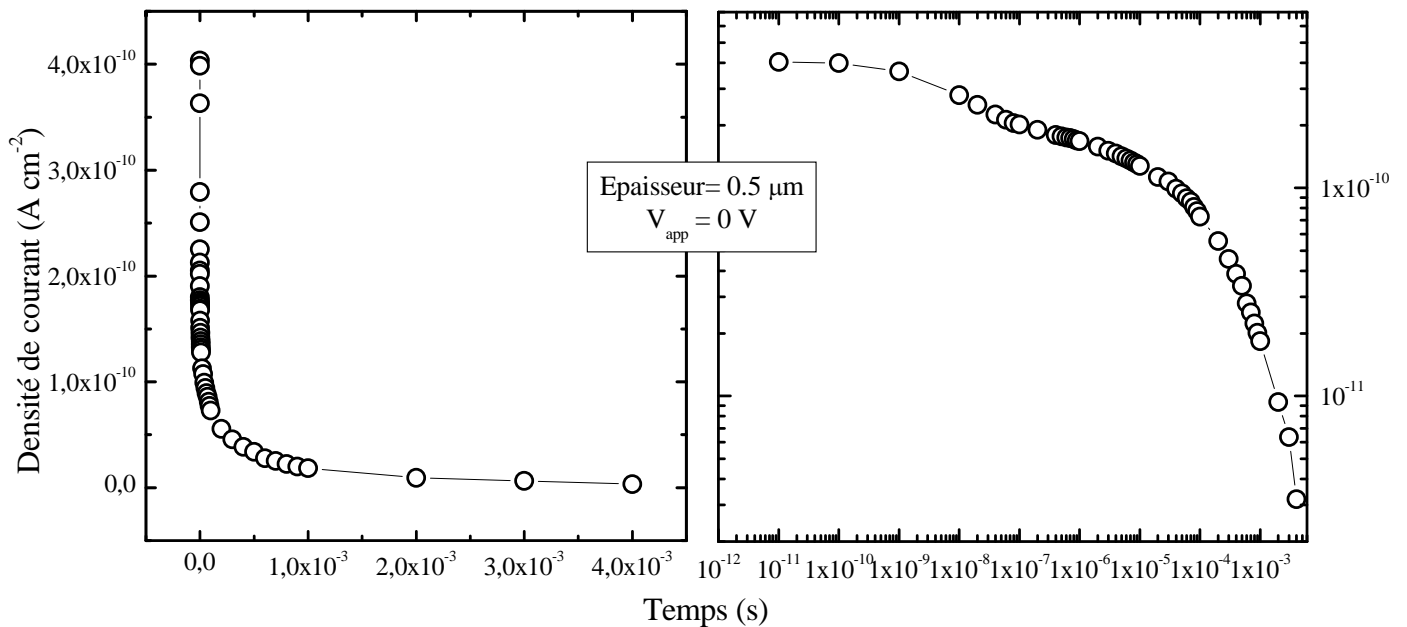


**Figure(IV.43)** Profil de la densité de courant des électrons (a), la densité de courant des trous (b), la densité de courant de déplacement (c) et la densité de courant total (d) dans la structure à différents instants.

### IV.2.6.a.1 Décroissance de la densité du photocourant

L'étude de la décroissance du photocourant a été faite pour la première fois par Tiedje et Rose [26], et Orenstein et Kastner [32] dans le cadre de la théorie de multipliéage. Expérimentalement les mesures du transitoire du photocourant permettent la détermination de la densité d'états localisés dans le gap du matériau a-Si:H. C'est la méthode du transitoire du photocourant [42-44,30].

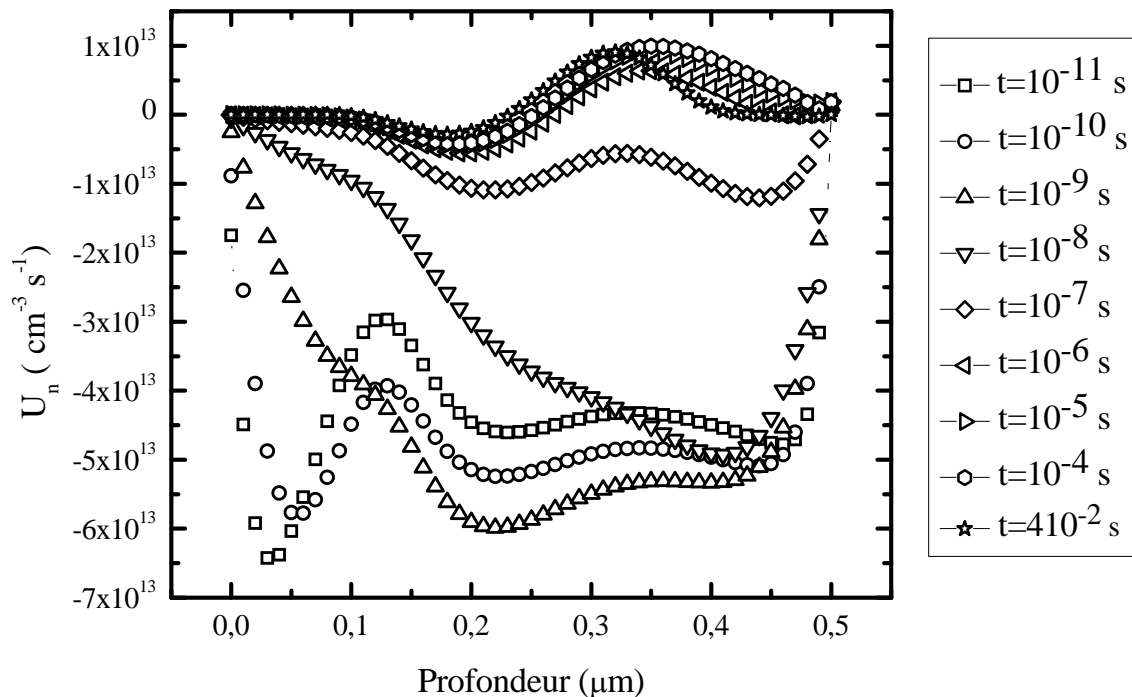
La figure (IV.44) montre l'évolution de la densité de courant calculée au cours du temps.



**Figure(IV.44)** Décroissance de la densité de courant après la rupture de l'éclairement.

L'allure du transitoire du photocourant obtenue par notre calcul est similaire à celle obtenue expérimentalement par la technique du transitoire du photocourant [45,46].

Dans la figure (IV.45) nous représentons le profil du taux net de recombinaison des électrons au cours du temps. Le taux net de recombinaison  $U_n$  est négatif qui correspond à une génération thermique des porteurs dans la zone de charge d'espace.



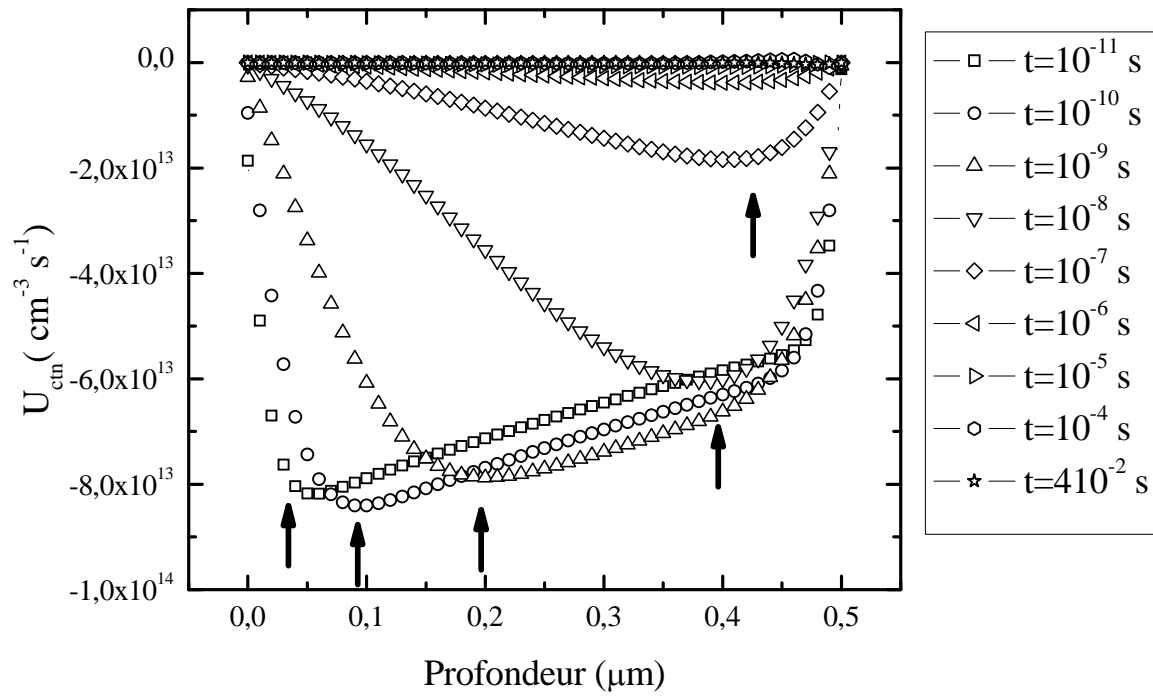
**Figure(IV.45)** Profil de taux net de recombinaison des électrons dans la structure à différents instants.

La figure (IV.46) nous donne l'évolution du taux de recombinaison des électrons sur la QBC le long de la structure à différents instants, qu'on note  $U_{ctn}$ . Le calcul montre que  $U_{ctn}$  est négatif et présente un maximum. Ce maximum de génération thermique se déplace le long de la structure en diminuant en valeur absolue au cours du temps. Dans ce cas, les électrons qui interagissent avec les états de la QBC vont subir un processus de dépiégeage.

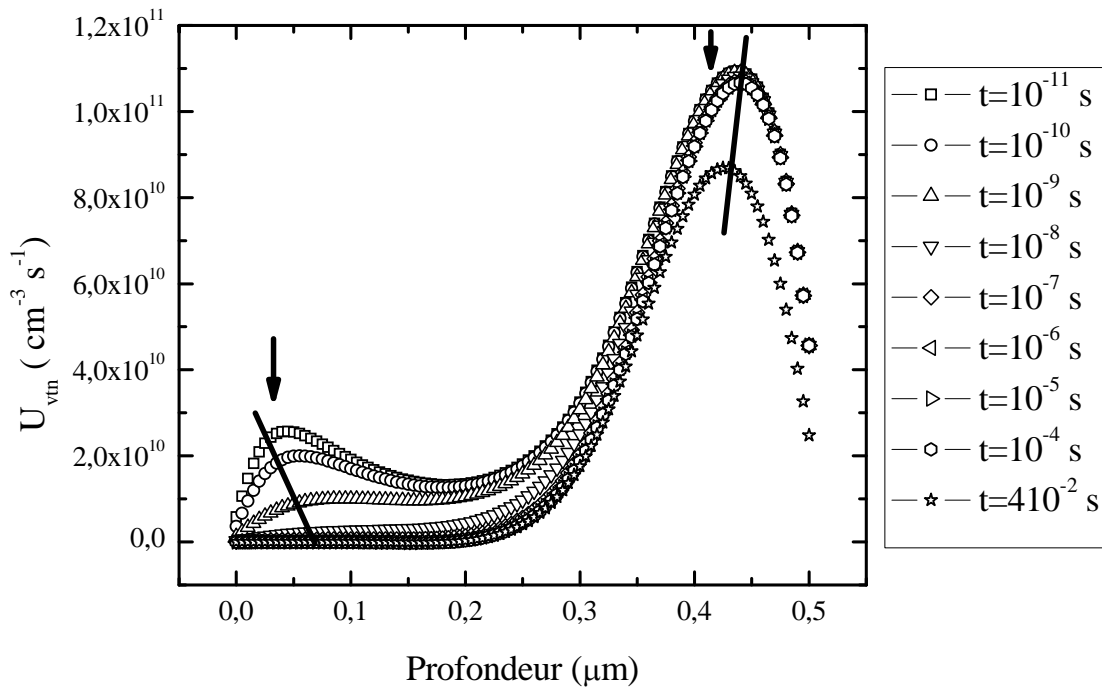
Dans la figure (IV.47) nous portons l'évolution du taux de recombinaison  $U_{vtn}$  des électrons sur la QBV le long de la structure au cours du temps. Nous constatons que  $U_{vtn}$  est positif. Il présente un maximum proche de la face arrière qui se déplace le long de la structure et diminue au cours du temps. Les électrons qui interagissent avec les états de la QBV vont subir un processus de piégeage.

Dans la figure (IV.48) nous avons présenté la variation du taux de recombinaison des électrons sur les liaisons pendantes  $U_{dbn}$  en fonction de la profondeur au cours du temps.

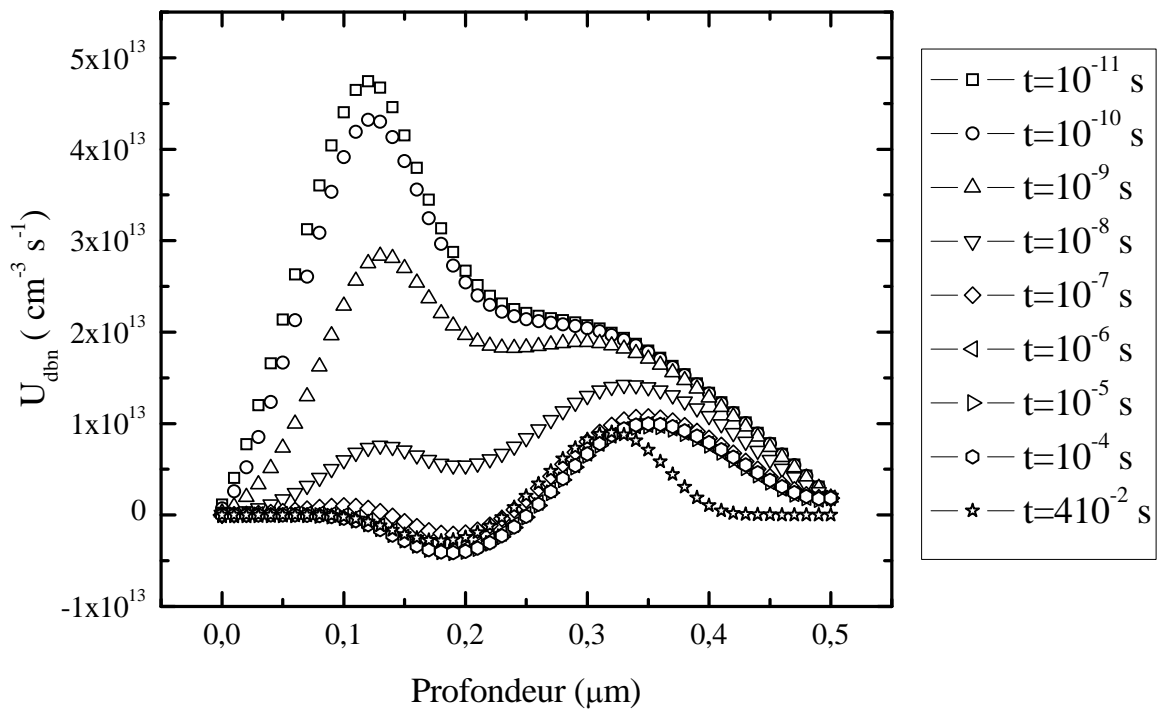
$U_{\text{dbn}}$  a des valeurs positives. Ceci correspond à la capture des électrons. La recombinaison des électrons sur les états des liaisons pendantes diminue au cours du temps.



**Figure(IV.46)** Profil du taux net de recombinaison sur les états de la queue de bande de conduction dans la structure à différents instants.



**Figure(IV.47)** Profil du taux net de recombinaison sur les états de la queue de bande de valence dans la structure.

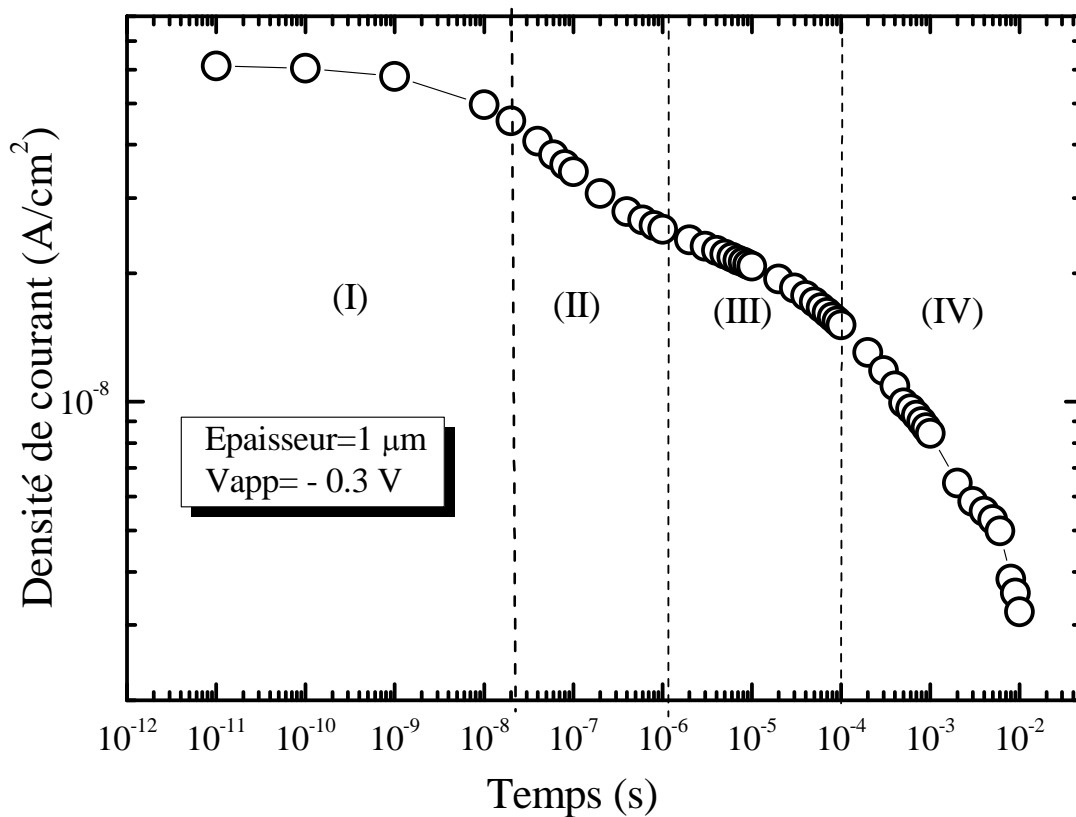


**Figure(IV.48)** Profil du taux net de recombinaison sur les liaisons pendantes dans la structure à différents instants.

### IV.2.6.b. Etude du transitoire du photocourant

L'évolution de la densité de courant est conditionnée par la recombinaison des porteurs libres sur les états localisés du gap de mobilité. On considère un taux de génération dans le régime stationnaire de départ  $G_e=10^{16} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ . Afin d'étudier le fonctionnement de la structure en mode photoconducteur, nous avons considéré une polarisation de  $V_{app}=-0.3 \text{ V}$ .

La figure (IV.49) montre la décroissance de la densité de courant ainsi obtenue. Cette décroissance de la densité de courant calculée peut être subdivisée en quatre intervalles de temps limités par les abscisses  $t_0=0 \text{ s}$ ,  $t_1=2 \cdot 10^{-8} \text{ s}$ ,  $t_2=10^{-6} \text{ s}$ ,  $t_3=10^{-4} \text{ s}$  et  $t_4=10^{-2} \text{ s}$ .



**Figure(IV.49)** Décroissance de la densité de courant pour une polarisation appliquée de  $V_{app}=-0.3\text{V}$ .



Phase (I) définie par l'intervalle  $[t_0=0, t_1=210^{-8} \text{ s}]$  : La densité de courant présente une allure constante. Ceci est due au fait qu'il y ait des porteurs photogénérés qui traversent l'échantillon et atteignent la surface arrière.

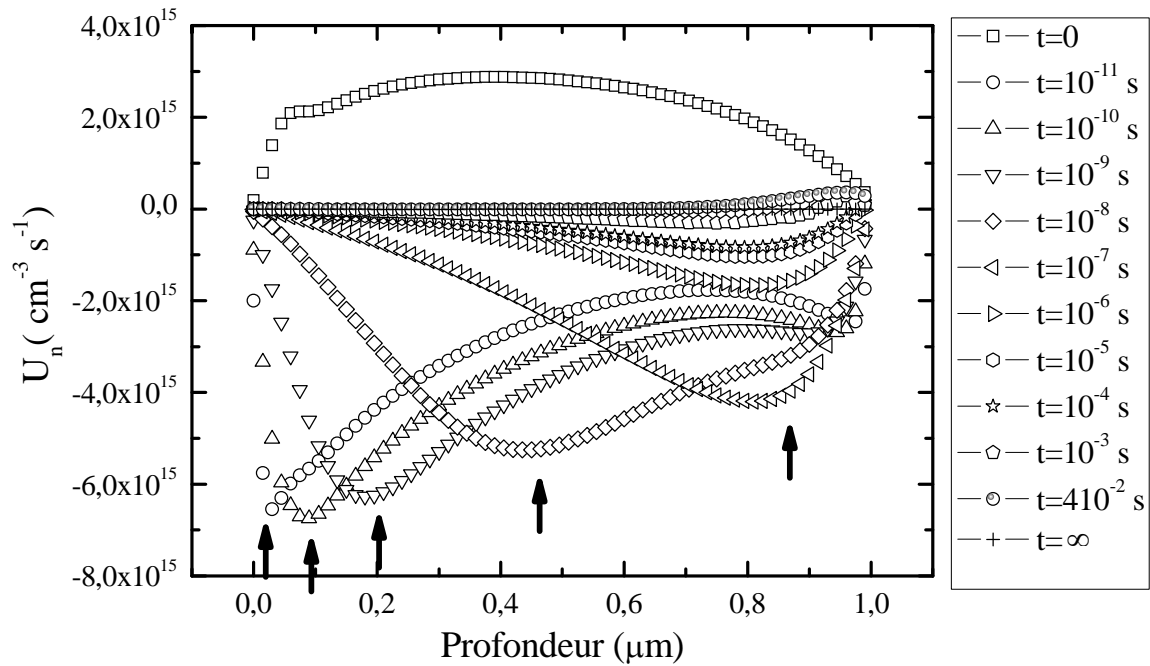
Phase (II) définie par l'intervalle  $[t_1=210^{-8} \text{ s}, t_2=10^{-6} \text{ s}]$  : A partir de la date  $t_1$  un nombre considérable de porteurs est collecté à la surface arrière. Il en résulte une chute de la densité de photocourant. Le temps  $t_1$  noté généralement  $t_T$  est appelé le temps de transit. Il correspond au moment où le nombre de porteurs libres est réduit à moitié [44].

Phase (III) définie par l'intervalle  $[t_2=10^{-6} \text{ s}, t_3=10^{-4} \text{ s}]$  : La décroissance du photocourant présente un palier où elle décroît lentement.

Phase (IV) définie par l'intervalle  $[t_3=10^{-4} \text{ s}, t_4=10^{-2} \text{ s}]$  : La densité de courant subit une décroissance plus rapide et s'approche finalement de la valeur de la densité de courant à l'obscurité.

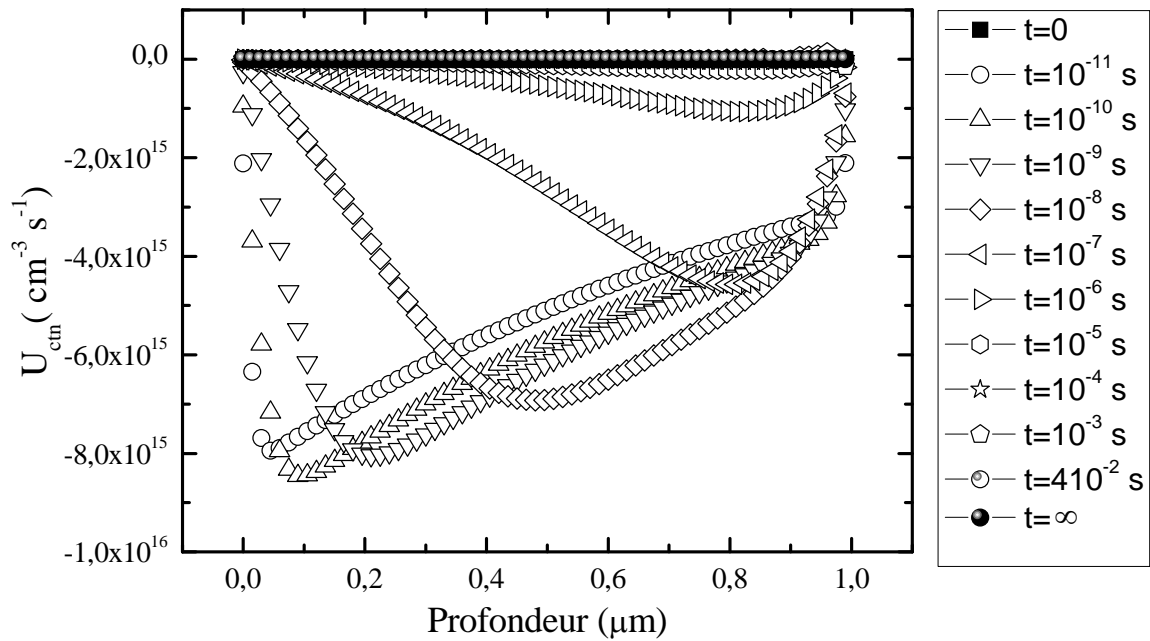
Dans le but d'étudier l'allure de la décroissance de la densité du photocourant, nous allons décrire le processus de génération-recombinaison dans les quatre phases citées ci-dessus.

La figure (IV.50) montre l'évolution au cours du temps du profil du taux net de recombinaison des électrons. Le taux net de recombinaison bascule des valeurs positives dans l'état initial stationnaire vers des valeurs négatives juste après la rupture de l'éclairement. On constate que ces valeurs présentent un maximum. Ce maximum de génération thermique se déplace de la surface avant le long de la structure vers la surface arrière au cours du temps.

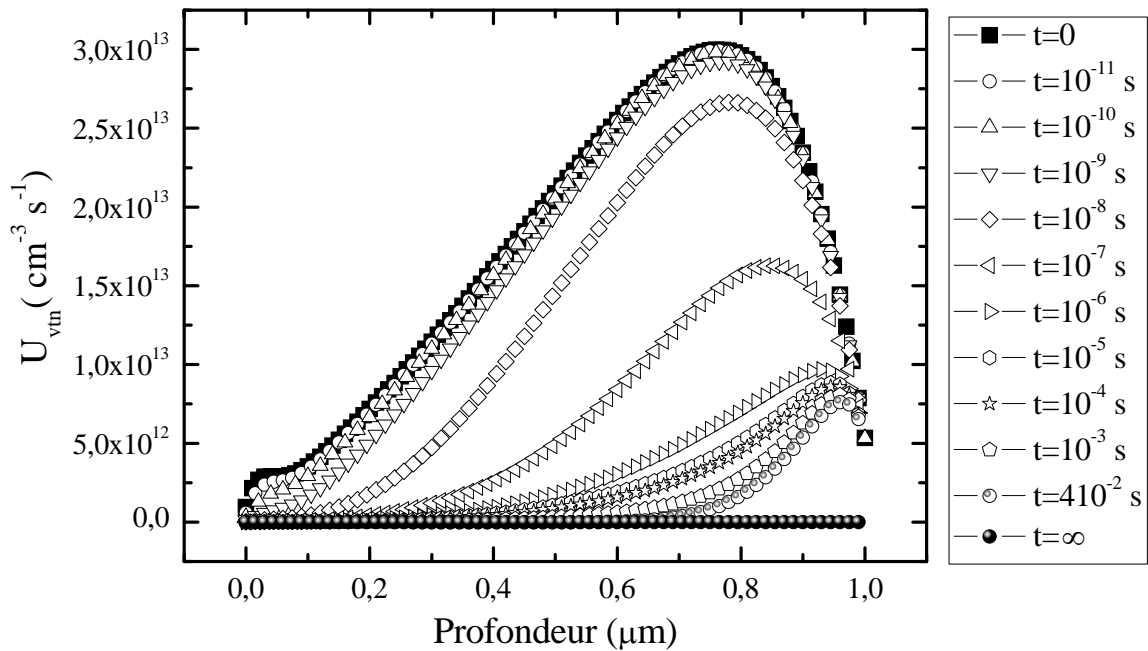


**Figure(IV.50)** Profil du taux net de recombinaison des électrons dans la structure à différents instants.

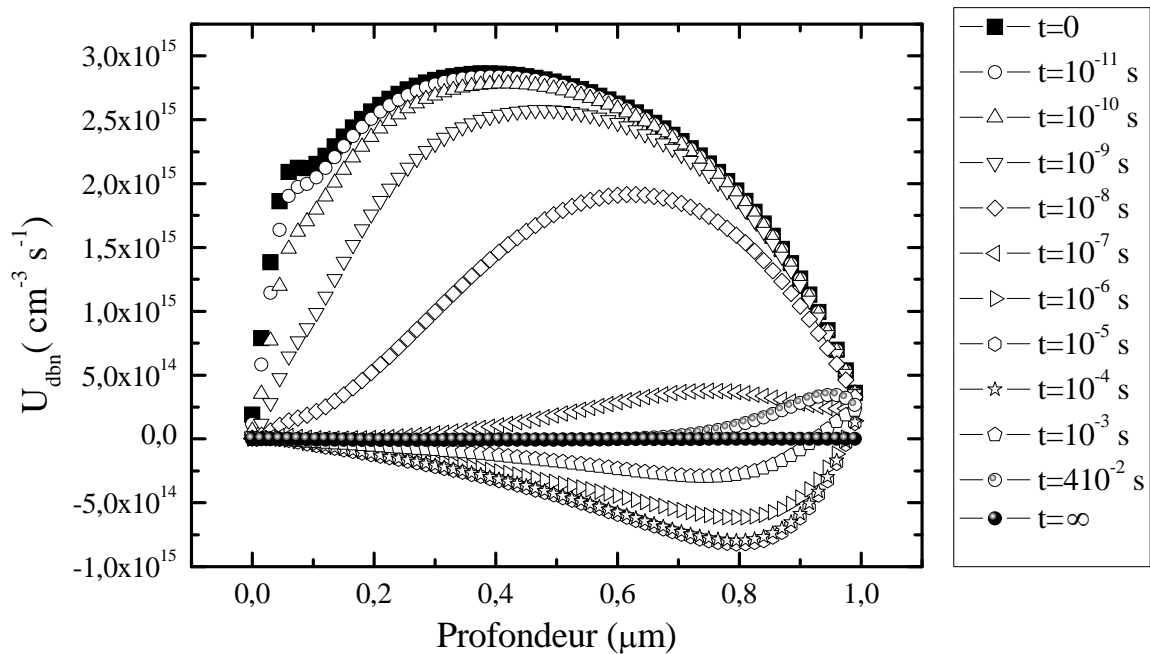
Sur les figures (IV.51 à 53) nous représentons respectivement les profils du taux de recombinaison des électrons sur la QBC, du taux de recombinaison des électrons sur la QBV et du taux de recombinaison des électrons sur les liaisons pendantes. Ces profils montrent la présence du processus de dépiégeage des électrons par les états de la QBC, du processus du piégeage des électrons par les états de la QBV, et du processus de piégeage des électrons par les états des liaisons pendantes.



**Figure(IV.51)** Profil de taux de recombinaison des électrons sur les états de la QBC en fonction de la profondeur.



**Figure(IV.52)** Profil du taux de recombinaison des électrons sur les états de la QBV en fonction de la profondeur.



**Figure(IV.53)** Profil du taux net de recombinaison des électrons sur les états des liaisons pendantes dans la structure à différents instants.

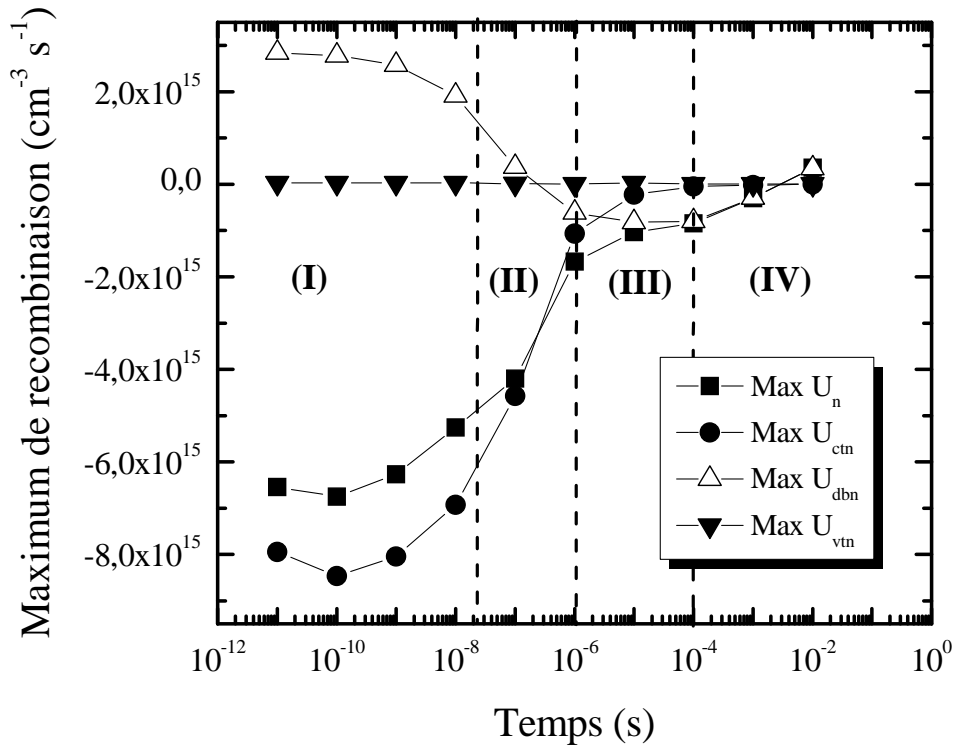
Nous représentons sur la figure (IV.54) l'évolution des maximums du taux net de recombinaison des électrons au cours du temps.

Dans la phase (I) de cette courbe on peut voir la capture des électrons sur les états des liaisons pendantes, la libération des électrons par les états de la QBC et la capture des électrons sur les états de la QBV. Dans cette phase le taux d'émission des électrons par les états de la QBC est nettement supérieur au taux de recombinaison sur les états des liaisons pendantes, alors que le piégeage des électrons sur les états de la QBV est négligeable.

La phase (II) est caractérisée par la chute de la génération thermique des électrons. Ceci explique la décroissance rapide de la densité de courant dans la phase (II). A la fin de cette phase le taux de recombinaison sur les états des liaisons pendantes change de caractère par le passage des valeurs positives aux valeurs négatives.

La phase (III) est marquée par la prédominance de l'émission des électrons par les états des liaisons pendantes.

Dans la phase (IV), la capture des électrons sur les états des liaisons pendantes l'emporte par rapport aux phénomènes de piégeage et de dépiégeage des électrons par les états des queues de bandes.



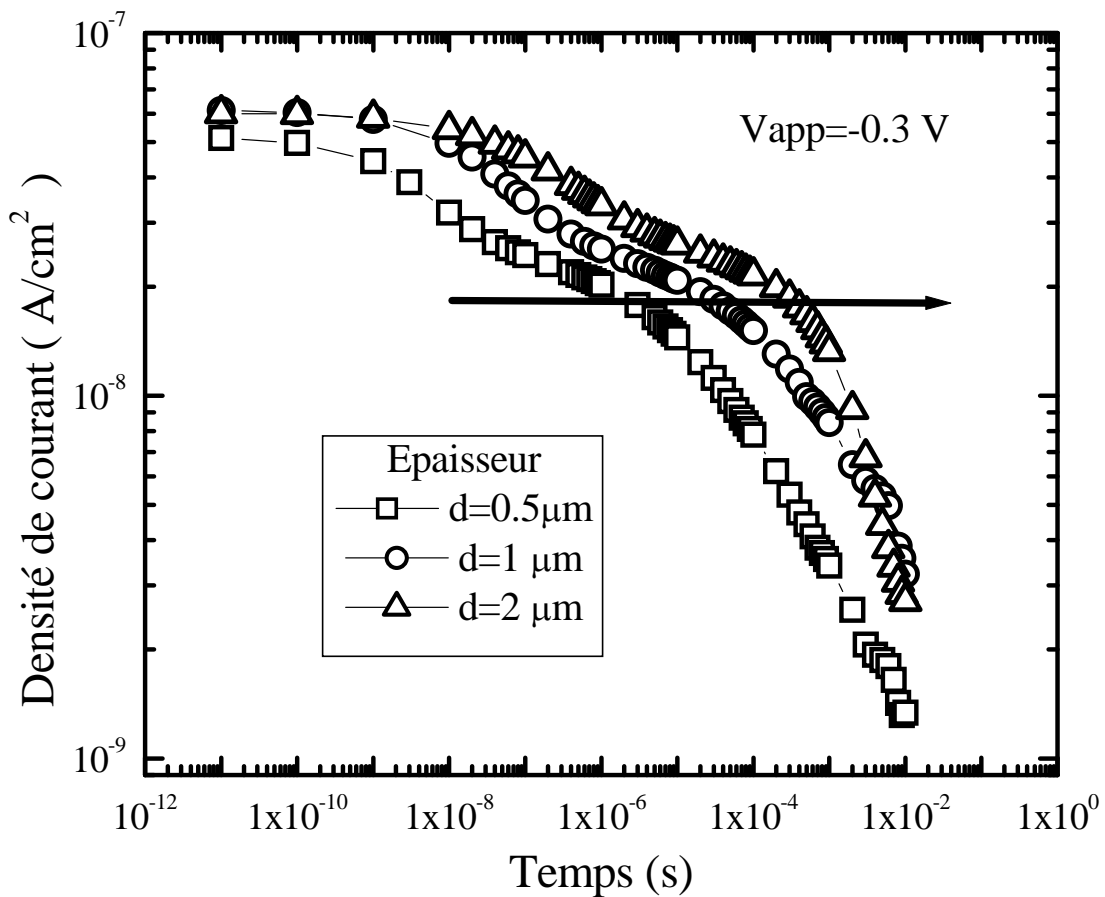
**Figure(IV.54)** Evolution dans le temps du maximum de recombinaison des électrons sur les états de la QBC, les états de la QBV et les états des liaisons pendantes.

En résumé, l'examen des courbes de recombinaison montre que les deux allures de décroissance de la densité du photocourant sont liées directement au piégeage, au dépiégeage, à la recombinaison et à la génération thermique des électrons sur les états localisés. La première allure de décroissance de la densité de courant est régie par la capture et l'émission des électrons par les états des queues de bandes et la recombinaison sur les liaisons pendantes. La deuxième allure de décroissance est régie par la capture des électrons sur les liaisons pendantes [45].

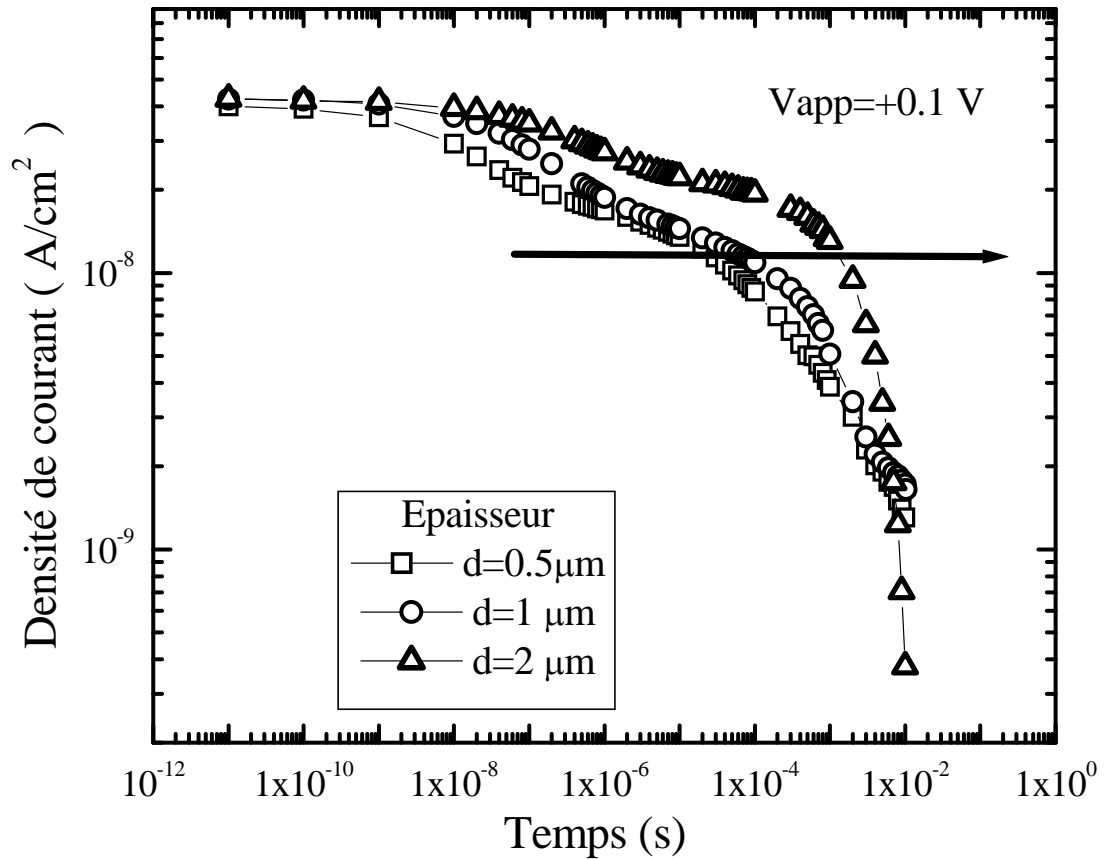
### IV.2.6.c. Influence de l'épaisseur de la structure métal/a-Si:H sur la décroissance du photocourant

Pour la suite de notre étude nous retenons le taux de génération à l'état stationnaire  $G_e=10^{16} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ . La polarisation appliquée est  $V_{app}=-0.3 \text{ V}$ . Nous avons calculé la décroissance du photocourant pour trois épaisseurs  $d_1=0.5\mu\text{m}$ ,  $d_2=1\mu\text{m}$  et  $d_3=2\mu\text{m}$ .

La figure (IV.55) présente la décroissance de la densité de courant pour les trois épaisseurs de la structure à une polarisation négative. Le même calcul a été fait avec les mêmes paramètres pour une polarisation faible positive  $V_{app}=+0.1 \text{ V}$  est présenté sur la figure (IV.56).



**Figure(IV.55)** Décroissance de la densité de courant pour une polarisation appliquée négative pour trois différentes épaisseurs de la structure.



**Figure(IV.56)** Décroissance de la densité de courant pour une polarisation appliquée positive à différentes épaisseurs de la structure.

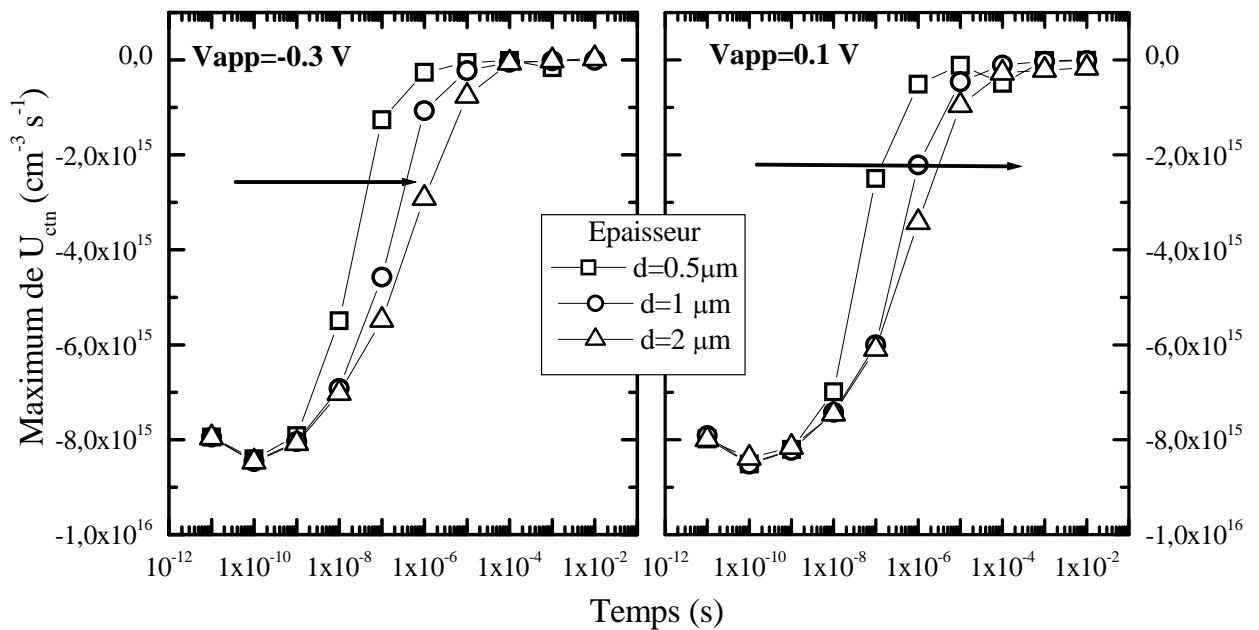
L'ensemble des figures présentées ci-dessus montre une influence de l'épaisseur. Les fronts de forte décroissance du courant se déplacent avec le temps. Ils sont retardés pour les fortes épaisseurs.

Pour expliquer ce résultat nous allons examiner les taux de recombinaison des électrons sur les états de la QBC et ceux sur les liaisons pendantes.

Nous avons remarqué précédemment que la recombinaison des électrons sur les états de la QBV est faible comparée à la recombinaison sur les états de la QBC et les états des liaisons pendantes.

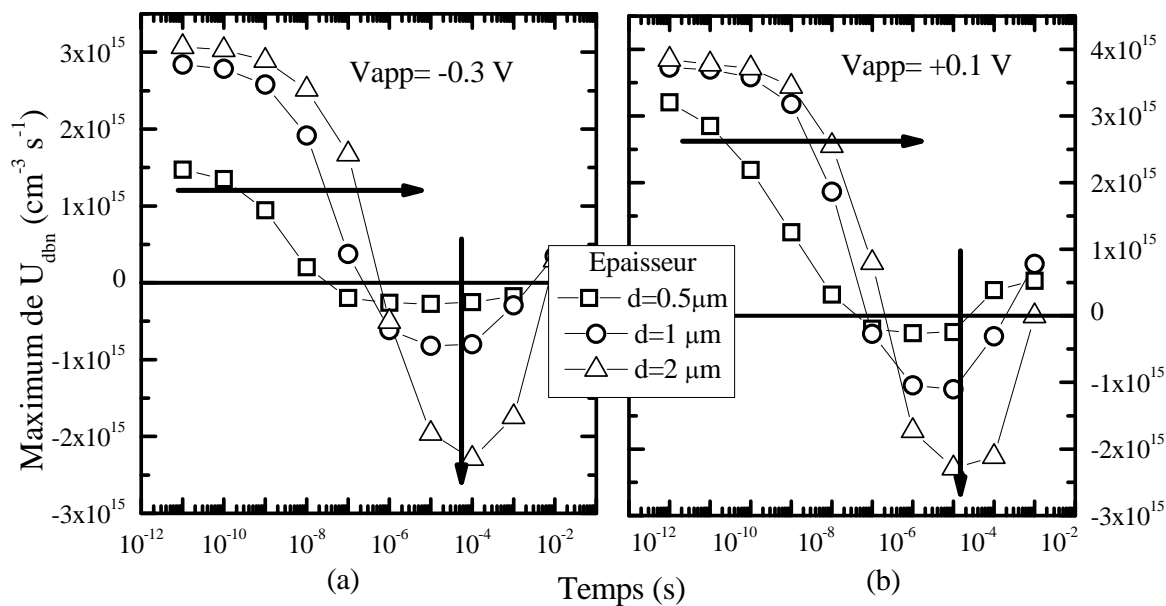
L'allure des différents taux de recombinaison présente un aspect commun pour les différentes épaisseurs de la structure. Pour voir l'influence de l'épaisseur de la structure sur le processus de recombinaison, nous nous sommes contentés de représenter sur les figure (IV.57 et 58) le maximum de taux de recombinaison sur les états de la QBC et sur les états des liaisons pendantes pour trois épaisseurs de la structure.

Ces deux figures montrent qu'aux premiers instants de la décroissance de la densité de courant, la génération thermique des électrons par la QBC est peu modifiée par l'augmentation de l'épaisseur de la structure. La deuxième allure de la décroissance de la densité de courant est caractérisée par l'augmentation de la génération thermique provenant des états des liaisons pendantes lorsque l'épaisseur augmente. En conclusion la chute de la décroissance de la densité de courant diminue en fonction de l'épaisseur.



**Figure(IV.57)** Evolution dans le temps du maximum de recombinaison sur la QBC pour différentes épaisseurs(a) sous une polarisation négative (b) sous une polarisation positive





**Figure(IV.58)** Evolution dans le temps du maximum de recombinaison sur les états des liaisons pendantes pour différentes épaisseurs (a) sous une polarisation négative (b) sous une polarisation positive

## **CHAPITRE V**

## **DISCUSSION**

L'objectif de ce travail est de résoudre numériquement l'équation de Poisson et les équations de continuité pour les électrons et pour les trous en régime stationnaire et en régime transitoire pour une structure métal/a-Si:H. La résolution est réalisée dans le but d'étudier la décroissance du courant après la rupture de l'éclairement.

## **V.1. Régime stationnaire**

La résolution numérique de l'ensemble des équations en régime stationnaire nous a permis de calculer la caractéristique courant-tension et de voir l'influence des différents paramètres sur la caractéristique.

### **V.1.1. Caractéristique courant-tension sous obscurité**

La caractéristique courant-tension sous obscurité obtenue par le calcul présente un effet de redressement.

En polarisation négative le taux de recombinaison est négatif. De ce fait la densité de courant est due à la génération thermique des porteurs libres. L'étude du taux de recombinaison et de ses composantes a montré que la génération thermique est régie par les états de liaisons pendantes. Ce résultat est confirmé par la conclusion de Sib [42] qui a montré que la génération thermique est prédominante par l'émission d'une bande étroite d'états localisés proche du milieu du gap de mobilité.

### **V.1.2. Caractéristique courant-tension sous lumière**

L'étude de la caractéristique sous lumière permet de tirer les paramètres fondamentaux de la structure : la tension en circuit ouvert  $V_{oc}$  et le courant de court circuit  $I_{CC}$ .

Nous nous sommes intéressés à la variation de  $V_{oc}$  en fonction du flux de photons pour différentes valeurs du coefficient d'absorption  $\alpha$ . Nous avons trouvé que pour les faibles valeurs de  $\alpha$ ,  $V_{oc}$  augmente en fonction du flux. Pour les fortes valeurs de  $\alpha$ ,  $V_{oc}$  présente une allure croissante puis atteint une saturation.

### **V.1.3. Effet de quelques paramètres sur la caractéristique courant-tension**

#### **V.1.3.a. Epaisseur de la structure**

L'étude de l'effet de l'épaisseur sur la caractéristique montre un effet considérable dans le cas de polarisation positive comparé au cas de polarisation négative. En polarisation négative la densité de courant est légèrement modifiée. En polarisation positive l'augmentation de l'épaisseur de la structure a pour effet de diminuer la densité de courant.

#### **V.1.3.b. Effet de la température**

Cette étude a montré que l'augmentation de la température fait augmenter la densité de courant. En polarisation négative la température fait augmenter la génération thermique des porteurs libres.

#### **V.1.3.c. Effet de la recombinaison de porteurs à la surface arrière**

La vitesse de recombinaison des trous affecte peu la caractéristique courant-tension. Ceci est expliqué par le fait que la concentration des trous est inférieure à la concentration des électrons à la surface arrière.

La vitesse de recombinaison des électrons  $S_n$  affecte considérablement la caractéristique, notamment pour la forte polarisation positive. L'augmentation de  $S_n$  diminue l'accumulation de charge à la surface arrière et donc augmente la densité de courant.

#### **V.1.3.d. Effet des paramètres du matériau sur la caractéristique**

En polarisation négative et sous obscurité, les pentes caractéristique  $k_B T_c$  et  $k_B T_c$  de la queue de bande de conduction et de la queue de bande de valence respectivement affectent légèrement la densité de courant, alors que l'augmentation de la densité totale des liaisons pendants  $N_{db}$  fait diminuer la densité de courant totale.

## V.2. Régime transitoire

Nous avons étudié la réponse transitoire de la structure métal/a-Si:H à la rupture de l'éclairement.

Cette étude nous permet d'accéder à la décroissance de la densité de courant provoquée par une excitation extérieure. En particulier nous avons étudié la décroissance de la densité de courant due à la rupture de l'éclairement. Dans les conditions considérées, l'allure de cette décroissance se présente sous forme de deux gammes de variations dans des intervalles de temps différents. L'étude du taux de recombinaison des électrons sur les états localisés montre que les électrons sont régis par l'émission par la queue de bande de conduction et la capture par la queue de bande de valence des électrons et l'émission ou la capture des électrons par les liaisons pendantes.

L'étude des allures des taux de recombinaison des électrons montre que la première gamme est régie par l'émission des électrons par la QBC et la capture des électrons par les liaisons pendantes. Le rôle de la QBV est négligeable dans ces conditions. La deuxième gamme de décroissance est régie par l'émission des électrons par les états des liaisons pendantes.

Nous avons également étudié l'effet de l'épaisseur sur la décroissance de la densité de courant. Cette étude a montré que l'augmentation de l'épaisseur de la structure a pour effet de retarder la décroissance de la densité de courant.

## **CONCLUSION**

Notre travail s'inscrit dans le cadre des recherches menées au laboratoire sur le silicium amorphe hydrogéné en couches minces.

L'équation de Poisson et les équations de continuité des électrons et des trous dans le régime stationnaire appliquée à une structure métal/a-Si:H ont été résolues numériquement.

Nous avons également adopté cette résolution numérique dans le but de calculer la tension en circuit ouvert  $V_{oc}$  en modifiant les conditions aux limites. Ceci nous a permis d'étudier la variation de  $V_{oc}$  en fonction du flux de photons pour différentes valeurs du coefficient d'absorption  $\alpha$ .

Ce calcul permet d'analyser la structure métal/a-Si:H en étudiant l'influence des différents paramètres sur la caractéristique courant-tension sous obscurité et sous lumière.

L'influence de l'épaisseur de la structure sur la caractéristique apparaît aux polarisations positives. La densité de courant diminue lorsque l'épaisseur de la structure augmente.

L'effet de la vitesse de recombinaison des électrons  $S_n$  à la surface arrière sur la caractéristique est considérable dans le cas de polarisation positive. L'augmentation de  $S_n$  fait augmenter le courant, alors que la variation de la vitesse de recombinaison des trous  $S_p$  à la surface arrière influe légèrement la caractéristique.

L'étude de l'influence des paramètres du matériau (la pente caractéristique  $k_B T_c$  de la queue de bande de conduction, la pente caractéristique  $k_B T_v$  de la queue de bande de valence et la densité totale des liaisons pendantes) sur la caractéristique a montré que la densité de courant en polarisation négative à l'obscurité est due essentiellement aux états des liaisons pendantes. Ce résultat est confirmé par la conclusion de Sib [42] qui a montré que la densité de courant sous polarisation négative à l'obscurité est due à l'émission d'une bande étroite d'états localisés proche du milieu du gap de mobilité.

L'étude de l'effet de l'ensemble des paramètres nous a permis de valider le programme dans le régime stationnaire. De ce fait nous avons abordé la résolution numérique des équations dans le cas transitoire.

La résolution du système d'équations dans le régime transitoire appliqué à la structure métal/a-Si:H nous a permis d'obtenir la décroissance de la densité de courant après la rupture de l'éclairement. Nous retrouvons la forme typique de cette décroissance dans les amorphes, qui se présente selon deux gammes de variations pour des intervalles de temps différents. La décroissance de la densité de courant est liée directement à la capture et à l'émission des électrons par les états localisés. Nous avons relié cette décroissance aux échanges cinétiques de porteurs de charges.

Nous avons étudié l'effet de l'épaisseur de la structure métal/a-Si:H sur la décroissance de la densité de courant après la rupture de l'éclairement. Cette étude a été faite pour deux polarisations : positive et négative.

Pour conclure, on peut dire que le programme ainsi réalisé pourra nous permettre de faire des essais sur la structure.



## Références

- [1] N.F. Mott, *Phil. Mag.* 19, 835 (1969)
- [2] P.W. Anderson, *Phys. Rev.* 109, 1492 (1958)
- [3] M.H. Cohen, H. Fritzsche, S.R. Ovishinsky, *Phys. Rev. Lett.* 22, 1065 (1969)
- [4] M.H. Cohen. *J. Non Cryst. Solids.* 2, 432 (1970)
- [5] M.H. Brodsky, R.S. Tittle, K. Weiser, G.D. Petit, *Phys. Rev. B* 1, 2632 (1970)
- [6] P.A. Thomas, M.H. Brodsky, D. Kaplan, D. Lepine, *Phys. Rev. B* 18, 3059 (1978)
- [7] W.B. Jackson, C.C. Tsai, S.M. Kelso *J. Non-Cryst. Solids.* 77, 78281 (1985)
- [8] J. Tauc, in: *Optical Properties of solids*, Ed. F. Abelès, North-Holland, Amsterdam 277 (1972)
- [9] F. Urbach, *Phys. Rev.* 92, 1324 (1953)
- [10] T. Tiedje, J.M. Cebulka, D.L. Morel, B. Abeles, *Phys. Rev. Lett.* 46, 1425 (1981)
- [11] S. Griep, L. Ley, *J. Non-Cryst. Solids* 59 & 60, 253 (1983)
- [12] C.B. Roxlo, B. Abeles, C.R. Wronski, G.D. Cody, T. Tiedje, *Solid State commun.* 48, 79 (1983)
- [13] R.A. Street, D.K. Biegelsen, *J. Non-Cryst. Solids* 35 & 36, 651 (1980)
- [14] H. Dersch, J. Stuke, J. Beichler, *Phys. Status Solidi. B* 105, 265 (1981)
- [15] D. Adler, *Sol. Cells* 9, 113 (1983)
- [16] Overhof, P. Thomas, *Electronique Transport in Hydrogenated Amorphous semionductor*, *Sprenger Tracts in Modern Physics.* 114 (Springer Verlag, Berlin) (1989)
- [17] R.A. Street, *Phil. Mag. B* 63, 1343 (1991)

- [18] W. Shockley, W.T. Read, Phys. Rev. 87, 835 (1952)
- [19] J.G. Simmons, G.W. Taylor, Phys. Rev. B 4, 502 (1971)
- [20] F. Vaillant, D. Jousse, J.C. Bruyère, Phil. Mag. B 75, 649 (1988)
- [21] E.I. Yoffa, D. Adler, Phys. Rev. B12, 2260 (1975)
- [22] H.K. Gummel, IEEE Transactions on Electron Devices ED-11, 455 (1964)
- [23] A. De Mari, Solid State Electronics 11, 33 (1968)
- [24] D.L. Sharfetter, H.K. Gummel, IEEE Trans. Electron Devices ED-16, 64 (1969)
- [25] J.M. Marshall, P.G. Le Comber, W.E. Spear. Solid St. Commun. 54, 11 (1985)
- [26] T. Tiedje, J.M. Cebulka, D.L. Morel and B. Abeles, Phys. Rev. Lett 46, 1425 (1984)
- [27] S. Reynolds, V. Smirnov, C. Main, R. Carius, F. Finger. Mat. Res. Soc. Symp. Proc. 762 (2003)
- [28] J.M. Hvam, M.H. Brodsky, Phys. Rev. Lett. 46, 371 (1981)
- [29] M. Gueorguieva, C. Main, S. Reynolds, R. Bruggemann, C. Longeaud, J. Non-Cryst. Solids 299, 541 (2002)
- [30] L. Ainouche, Thèse de magister U.S.T.H.B, Alger (2003)
- [31] T. Tiedje, A. Rose, Solid State Commun. 37, 49 (1981)
- [32] J. Orenstein, M.A. Kastner, V.A. Vaninov, Phil. Mag. B 46, 23 (1982)
- [33] C. Main, R. Russel, J. Berkin, J. Marshall, Phil. Mag Lett. 55, 189 (1987)
- [34] G. Gomila, O.M. Bulashenko, J.M. Rubi, Journal of Applied Physics 83, 2619 (1998)
- [35] S. Godounov, V. Riaenki, Schéma aux différences finies, Editions MIR (1977)
- [36] S. Selberherr, Analysis and Simulation of semiconductor Divies, SVW New York (1984)
- [37] T.D. Moustaka, C.R. Wronski, T. Tiedje, Appl. Phy. Lett. 39, 721 (1981)

- [38] R.A. Street, Appl. Phys. Lett. 41, 1060 (1982)
- [39] R.A. Street, Appl. Phys. Lett. 57,1334 (1990)
- [40] J.D. Sib, A. Boukra, Y. Bouizem, L. Chahed, Solid state Commun. 108, 813 (1998)
- [41] A. Allag, M. Aoucher, International Congress of Photovoltaic and Wind Energy, Tlemcen, Algérie (2003)
- [42] P. Pipoz, H. Beck, A.V. Shah. Phys Rev. B 55, 10528 (1997)
- [43] C. Main, R. Bruggemann, D.P. Webb, S. Reynolds, Solid State Commun. 83, 401 (1992)
- [44] G. Seynhave, G.J. Aderiaenssens, H. Michiel, H. Overhof, Phil.Mag. B58, 421 (1988)
- [45] A. Allage, M. Aoucher, IX<sup>èmes</sup> Journées Maghrébines des Sciences des Matériaux, Oran, Algérie (2004)