

MODELE " DEFECT POOL " ET PHOTOCONDUCTIVITE EN REGIME STATIONNAIRE DANS LE SILICIUM AMORPHE HYDROGENE (a-Si:H)

Reçu le 30/01/2005 – Accepté le 28/06/2005

Résumé

Le présent travail consiste en la simulation numérique de la Photoconductivité en régime Stationnaire (PCS) dans le Silicium Amorphe Hydrogéné (a-Si:H) en prenant pour structure électronique du matériau la distribution énergétique des états des défauts calculée par le modèle "defect pool" (MDP). Ce calcul tient en compte les réactions d'équilibre chimique intervenant dans le mécanisme de conversion des liaisons faibles en liaisons pendantes. La réponse du matériau à une excitation optique continue est ensuite modélisée dans les conditions de quasi-équilibre du système. Les résultats de la PCS obtenues par simulation montrent un bon accord avec les résultats expérimentaux correspondants. L'interprétation de l'allure générale de la PCS en fonction de la température dans le cas du a-Si:H intrinsèque est faite en examinant la dépendance de température des différentes charges et taux de recombinaisons dans les états des queues de bande de conduction et de valence et des liaisons pendantes.

Mots clés: Defect pool, photoconductivité stationnaire, a-Si:H.

Abstract

This work consists of the numerical simulation of steady state photoconductivity (SPC) in a-Si:H by taking for electronic structure of material the energy distribution of the defects states calculated by the model " defect pool " (MDP). This calculation holds in account the reactions of chemical equilibrium intervening in the mechanism of conversion of the weak bands to dangling bands. The response of material to a continuous optical excitation is then modeled under the conditions of quasi-equilibrium of the system. The results of the SPC obtained by simulation show a good agreement with corresponding experimental results. The interpretation of the general pace of the SPC according to the temperature in the case of the intrinsic a-Si:H is made by examining the dependence of temperature of the various loads and rate of recombination in the states of the conduction and valence band tail and the dangling bands.

Keywords: Defect pool, steady state photoconductivity, a-Si:H.

**HEDIBI AB.
MEFTAH AF.
MERAZGA A.
MEFTAH AM.**

Faculté des Sciences,
Département de Physique
Université de Batna
Batna, Algérie.

ملخص

La photoconductivité présente un intérêt fondamental dans la caractérisation des propriétés du a-Si:H en particulier sa densité des états. Celle-ci a été décrite par plusieurs modèles théoriques et le modèle choisi dans notre étude est le modèle *defect pool* MDP avec ces deux versions développées par Powell et Deane [1,2]. Ce modèle est basé sur l'équilibration des réactions chimiques élémentaires entre les différentes espèces de défauts assurée par l'hydrogène. Selon la première version du MDP, la densité des états des liaisons pendantes est déterminée à partir d'équilibre chimique entre les liaisons faibles et les liaisons pendantes en se basant sur la conversion des liaisons faibles en liaisons pendantes, avec l'implication de l'hydrogène sous forme d'un terme influençant l'entropie du défaut. Dans la deuxième version du MDP, la densité des états des liaisons pendantes est déterminée par l'équilibration des réactions chimiques élémentaire basée sur la conversion des liaisons faibles en liaisons pendantes et le rôle de l'hydrogène est fondamental dans l'apparition des défauts. Il se comporte comme un agent mobile intermédiaire entre les liaisons faibles et liaisons pendantes.

La photoconductivité stationnaire est considérée comme étant fonction de plusieurs processus : génération, supposée être inter-bande, recombinaison, piégeage et transport. On reprenant le modèle développé par Main et al [3] qui repose sur la présence de deux types d'états localisés, les queues de bande et les liaisons pendantes. Et les équations constitutives qui décrivent la capture et l'émission des porteurs dans une distribution arbitraire des états de queue, sont développées par Simmon et Taylor [4], en se basant sur les statistiques de Shockley Read [5].

En appliquant la densité des états calculée suivant le MDP dans la simulation numérique de la photoconductivité en régime stationnaire PCS, et en comparant les résultats obtenus avec les résultats expérimentales de la PCS pour le a-Si:H. Nous commençons par une comparaison entre les PCS simulées suivant les deux versions du MDP en fonction de $1/T$, en choisissant l'effet du dopage de type n et p sur l'allure de la PCS observé expérimentalement comme une référence de comparaison [6]. Ensuite, on va analyser la PCS simulée en fonction de $1/T$ pour différentes intensités lumineuses suivant la version choisie. Finalement, les variations des différentes densités de charge dans le gap en fonction de $1/T$ vont être exploitées pour donner une explication qualitative du comportement de la PCS comme fonction de $1/T$.

MODELE DE DENSITE DES ETATS ELECTRONIQUES

La densité des états utilisée est divisée en états de queue provenant des liaisons faibles et qui sont des états monovalents (liants dans la queue de bande de valence QBV et anti-liants dans la queue de bande de conduction QBC), et des états de défaut provenant des liaisons pendantes (LP) et qui sont des états divalents déterminés soit par la première version du MDP ou par la deuxième [1,2]. La densité des états $D(E)$ est calculée dans le cas du a-Si:H intrinsèque selon la première et la deuxième version du MDP, et en prenant en compte que l'énergie de Fermi $E_F = 0.967$ eV, est calculée à partir de l'équation de neutralité de charge [7]

$$\int_{E_V}^{E_C} (f^+(E) - f^-(E)) D(E) dE = 0 \quad (1)$$

Fig.1 montre, la densité des états de queue et des états des liaisons pendantes à $T=300$ K, selon les deux versions du MDP où la première version est marquée par (o) et la deuxième par (●).

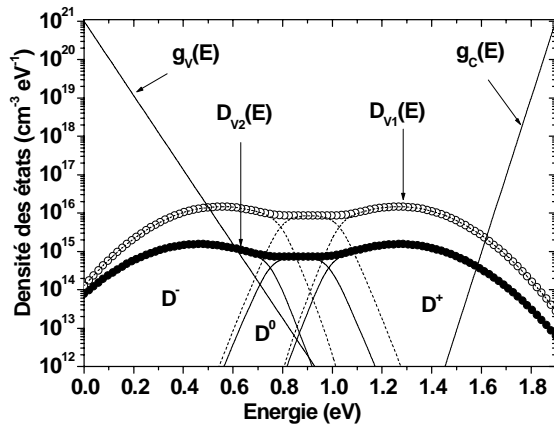


Figure 1: Densité des états de queue et des états des liaisons pendantes dans le a-Si:H intrinsèque à $T=300$ K

$D(E)$ est tracée avec ses trois composantes des densités de charge D^+ , D^0 et D^- définis par :

$$D^+(E) = D(E) f^+(E)$$

$$D^0(E) = D(E) f^0(E) \quad (2)$$

$$D^-(E) = D(E) f^-(E)$$

Où: f^+ , f^0 et f^- : Fonctions d'occupations des LP pour chaque état de charge; D^+ , D^0 et D^-

COMPARAISON ENTRE LES DEUX VERSIONS DU MDP

D'après fig.2 qui présente la PCS simulée (σ_{ph}) selon les deux versions du MDP dans le cas du a-Si:H intrinsèque pour une excitation $G = 7 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ et une température de 300 K, la dépendance en température de la PCS apparaît avec trois régimes :

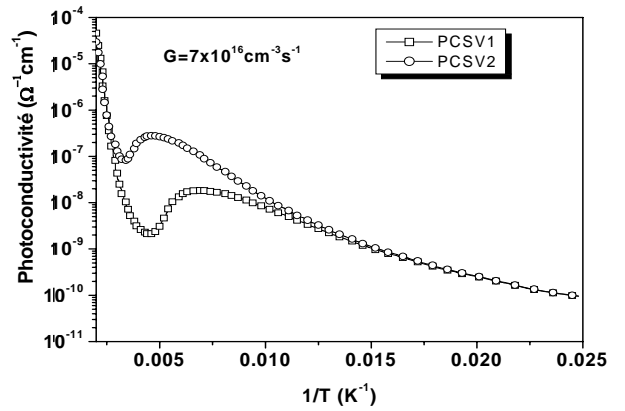


Figure 2: Simulation de la PCS en fonction de $1/T$ selon les deux versions du MDP dans le cas du a-Si:H intrinsèque.

(i) à basses températures σ_{ph} tend à devenir constante, (ii) aux températures intermédiaires σ_{ph} augmente avec T par plusieurs ordres de grandeurs, (iii) à très hautes températures où la concentration des porteurs thermiques dépasse celle des porteurs photogénérés, σ_{ph} augmente fortement avec la température. Les deux courbes sont caractérisées par une région faiblement activée à basse température, un maximum de σ_{ph} à la température T_M et un minimum à la température T_m . La région dans laquelle σ_{ph} diminue avec $1/T$ est appelée la région de la trempe thermique "thermal quenching". La différence entre les deux courbes apparaît dans la région où σ_{ph} commence à se saturer suivit par la trempe thermique, qui est contrôlée par la recombinaison au niveau des liaisons pendantes. Ceci est dû à la différence entre les densités des liaisons pendantes de chaque version. Puisque la densité d'état de la deuxième version du MDP est inférieure à celle de la première version, le taux de recombinaison qui lui correspond est inférieur à celui qui correspond à la densité d'états de la première version. Par conséquent, σ_{ph} de la deuxième version sera plus élevée.

Maintenant, on va chercher laquelle des deux versions reproduit mieux l'effet du dopage sur l'allure de la PCS. Fig.3 montre des mesures expérimentales de σ_{ph} en fonction de $1/T$ du a-Si:H de type n et de type p pour différentes concentrations de dopage et un échantillon intrinsèque [6]. La caractéristique importante qu'on peut déceler est le déplacement de la région de la trempe thermique vers des températures et des valeurs de σ_{ph} plus faibles quand le dopage du type n diminue jusqu'à ce que le matériau devienne intrinsèque et puis de type p. La région de la trempe thermique ne sera plus observée dans les échantillons de type n ou p fortement dopés puisque dans ce cas les concentrations des porteurs thermiques dépasseront celles des porteurs photogénérés.

Si on compare ces mesures avec les courbes de la PCS simulées suivant les deux versions du MDP (Fig.4 (a) et (b)), il est facile de constater que la deuxième version a mieux reproduit l'effet du dopage. Pour cette raison, c'est la densité d'états de la deuxième version du MDP qui va être adoptée dans la simulation de la PCS.

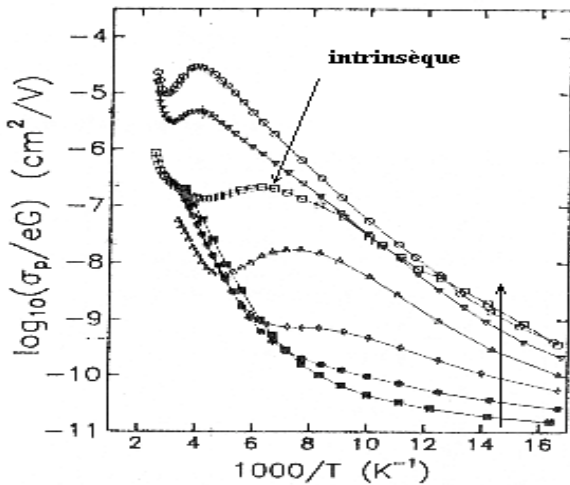


Figure 3 Dépendance en température de la PCS mesurée pour le a-Si:H dopé de type n et de type p [6].

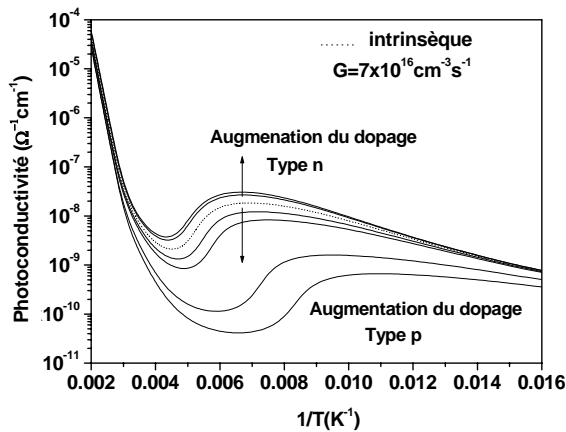


Figure 4-a (1^{ère} version du MDP) : L'effet de dopage sur l'allure de la PCS simulée en fonction de $1/T$

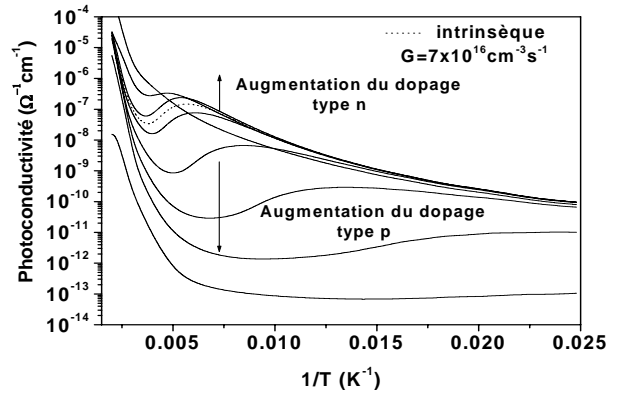


Figure 4-b (2^{ème} version du MDP) : L'effet de dopage sur l'allure de la PCS simulée en fonction de $1/T$

RESULTATS ET DISCUSSIONS

Fig.5 présente la variation de la PCS en fonction de $1/T$ pour trois valeurs de l'excitation G . Dans les courbes présentées, on distingue les aspects suivants selon les valeurs de l'excitation :

- Une région de pente faible (0.058 eV) pratiquement indépendante de l'excitation G apparaît aux températures basses et moyennes.
- Un maximum de σ_{ph} à T_M qui se déplace vers les hautes températures quand on augmente l'excitation G , activé thermiquement par une énergie de 0.36 eV qui est proche de la valeur obtenue par T. Smail et T. M. Brahim (0.40 eV)[8]. (Fig.6)
- Un minimum de σ_{ph} à T_m qui se déplace aussi de la même manière du maximum vers les hautes températures avec l'accroissement de G , activé thermiquement par une énergie de 0.5 eV. Cette valeur est aussi proche de celle obtenue par T. Smail et T. M. Brahim (0.47 eV)[8]. (Fig.6).
- Une région d'augmentation rapide de σ_{ph} à haute températures ($T > T_m$) qui se déplace vers les températures plus élevées avec l'augmentation de G .

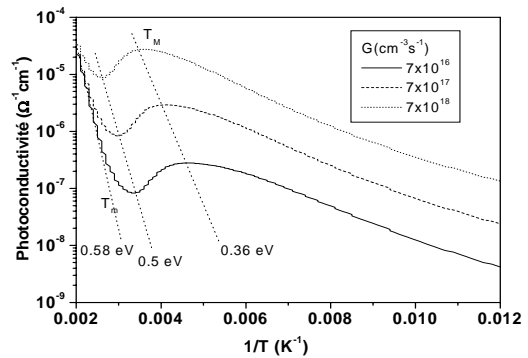


Figure 5 : Variation de σ_{ph} en fonction de $1/T$ simulée pour trois valeurs de l'excitations G

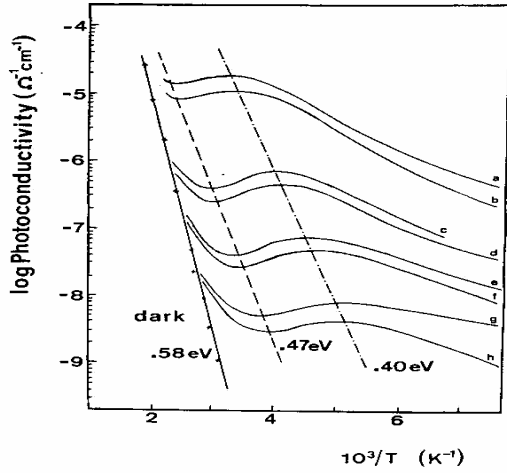


Figure 6 : Mesures expérimentales de la PCS en fonction de $1/T$ pour différentes valeurs de G de 4.5×10^{14} à $2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ [8].

Ces aspects sont les caractéristiques essentielles de la PCS qui se manifestent pratiquement dans toutes les mesures expérimentales. A titre d'exemple, les résultats expérimentaux obtenus par YOON [9] et par G. Erdogaan [10] présentés, respectivement, par Fig.7 et Fig.8.

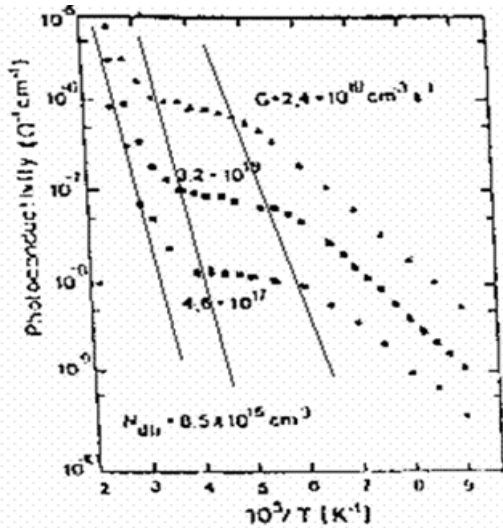


Figure7 : Données expérimentales de σ_{ph} en fonction de $1/T$ pour trois valeurs de l'excitations G obtenues par Yoon[9].

La discussion de la dépendance de la température obtenue est possible en étudiant Fig.9 (a), (b) et Fig.10. Fig.9 (a) et Fig.10 présentent, respectivement, σ_{ph} en fonction de $1/T$ pour $G = 7 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ et les concentrations des électrons et trous libres en fonction de $1/T$ pour la même excitation. La concentration des électrons libres est plus grande que celle des trous, et elle a la même allure de la PCS. Ainsi le comportement de $\sigma_{ph}(1/T)$ est étudié en analysant la recombinaison des électrons libres. Les centres de recombinaison qui peuvent capturer les électrons sont les états D^+ avec une densité de

charge Q_{db}^+ , les états D^o avec une densité Q_{db}^o , les pièges à trous occupés de la QBV avec une densité Q_v , et les pièges à électrons vides de la QBC avec une densité $(1 - Q_c)$. Par la suite on s'intéresse à tracer ces différentes densités de charges en fonction de $1/T$ (Fig.9 (b)) pour décrire le processus de recombinaison et obtenir une analyse qualitative de la courbe $\sigma_{ph}(1/T)$.

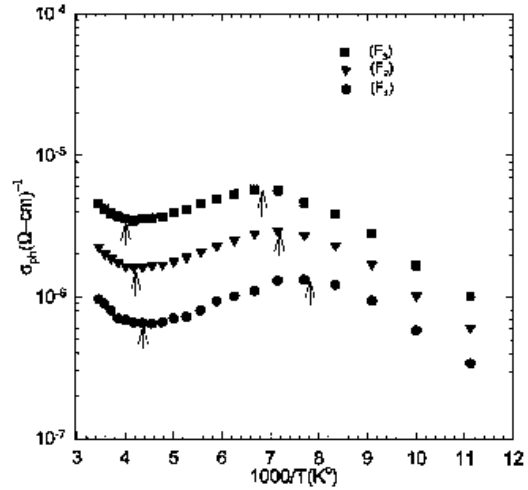


Figure 8 : Données expérimentales de σ_{ph} en fonction de $1/T$ pour différentes excitations F_1 , F_2 et F_3 obtenues par G.Erdogaan [10].

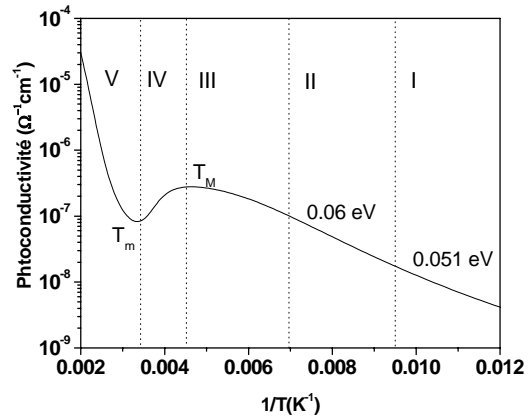


Figure9-a : Variation de σ_{ph} en fonction de $1/T$ simulée pour le a-Si:H intrinsèque.

La courbe $\sigma_{ph}(1/T)$ comporte cinq régions différentes :

Région I : c'est la région de très basses températures où σ_p augmente avec la température avec une énergie d'activation très faible de l'ordre de 0.051 eV. Concernant

les charges, cette région est caractérisée par la diminution de Q_v , Q_c , qui ont les mêmes ordres de grandeur, et Q_{db}^o . Cependant, Q_{db}^+ est presque constante. σ_p augmente du fait que la diminution de la somme $Q_v + Q_{db}^o$ réduit le taux de recombinaison, R . cette réduction dépasse l'accroissement dans R attribué à la diminution de Q_c .

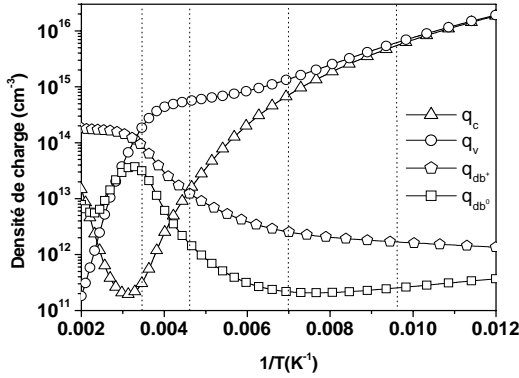


Figure9-b : Variation des densités de charge en fonction de $1/T$.

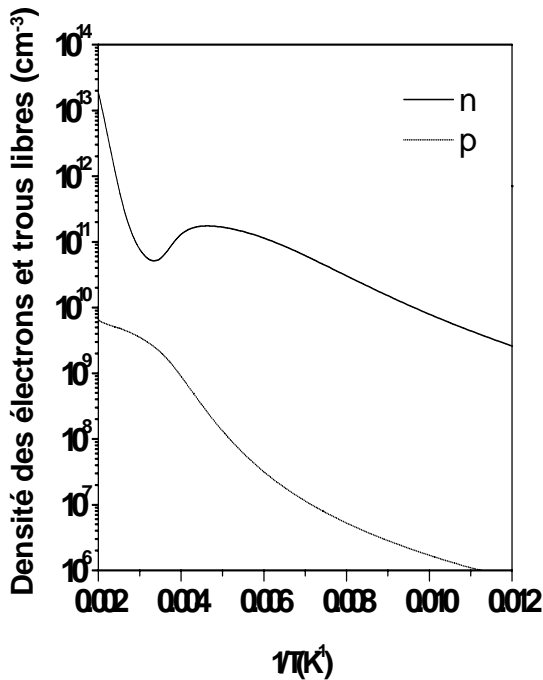


Figure10 : Variation de la concentration des électrons et des trous libres en fonction de $1/T$.

Région II : une faible énergie d'activation est aussi trouvée pour la région II, mais qui dépasse celle de la région I. Quand la température augmente, Q_c continue à diminuer de la même façon que dans la région précédente. Cependant, Q_v décroît avec une énergie d'activation

similaire à celle avec laquelle σ_{ph} augmente. Dans cette région Q_v commence à dépasser Q_c et par conséquent, la contribution de Q_{db}^o dans l'augmentation de σ_{ph} ne sera pas importante. Q_{db}^+ commence à augmenter dans cette région mais très lentement de façon à ce que son influence sur σ_{ph} n'est guère observée.

Région III : cette région s'étend de la fin de la région précédente jusqu'à T_M qui est la température du maximum de la PCS. σ_{ph} continue à croître mais lentement jusqu'à ce qu'elle se stabilise à T_M . Q_v reste toujours la charge dominante, mais sa diminution devient de plus en plus lente et presque constante lorsqu'elle s'approche de T_M . Dans cette région la recombinaison des électrons est due essentiellement à la QBV. Q_{db}^o et Q_{db}^+ commencent à croître en contribuant faiblement à la stabilisation de σ_p , cependant Q_c décroît rapidement.

Dans les trois régions I, II et III qui correspondent aux températures inférieures à T_M , $\sigma_{ph}(1/T)$ est gouvernée par la charge Q_v et son profil est inversement superposé à $Q_v(1/T)$. Une telle remarque confirme le fait que la recombinaison des électrons dans ces régions est contrôlée principalement par la QBV avec une contribution des liaisons pendantes qui commence à apparaître lorsqu'on s'approche de T_M .

Région IV : dans cette région σ_{ph} décroît d'une façon importante avec $1/T$. Ce phénomène est appelé la trempe thermique, *thermal quenching*, de la PCS. Une contribution effective des liaisons pendantes dans le processus de recombinaison caractérise cette région. La quantité par laquelle Q_v décroît est plus petite que celle correspondante à l'augmentation à la fois dans Q_{db}^o , Q_{db}^+ et à la diminution dans Q_c . La concentration des centres de recombinaison augmente et par conséquent, σ_{ph} décroît pour $T > T_M$.

Région V : Cette région s'étend du minimum de la PCS, T_m , vers les hautes températures. L'augmentation de σ_{ph} dans cette région est due à une décroissance rapide dans Q_v , et moins rapide suivit par une faible augmentation dans Q_{db}^o , une stabilisation dans Q_{db}^+ expliquée par l'émission des électrons à partir des états D^o et une augmentation dans Q_c . Tout ceci indique une décroissance importante dans les densités des centres de recombinaison et par conséquent, une augmentation rapide de σ_{ph} .

Tous ce qu'on vient de dire est confirmé aussi par Fig.11 qui montre que la recombinaison des électrons est contrôlée effectivement par la QBV pour les trois première régions ensuite c'est la recombinaison au niveau des liaisons pendantes qui domine.

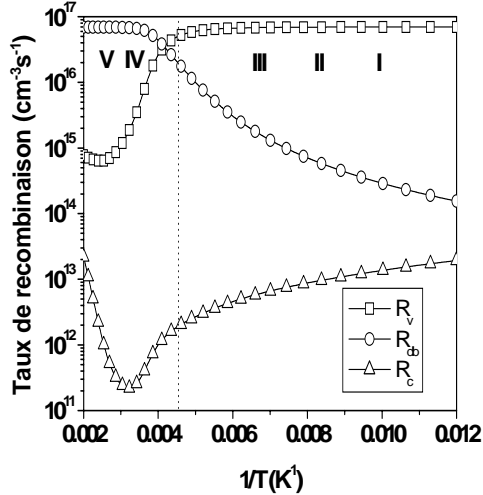


Figure11 : Variation du taux de recombinaison des électrons libres en fonction de $1/T$

CONCLUSION

Dans cette étude, on a présenté:

La simulation numérique de la photoconductivité en régime stationnaire (PCS) sur la base du MDP. La dépendance de température de la PCS dans le a-Si:H de type n et de type p, simulée en appliquant la deuxième version du MDP, reflète mieux les données expérimentales de la littérature.

Un bon accord de la PCS simulée avec l'allure générale de la PCS mesurée en montrant toutes les caractéristiques observées, en particulier:

- la région faiblement activé à basse température.
- Les extremums à hautes températures et les énergies d'activation de ces extremums (dans la dépendance de température à différentes excitations).

Une explication qualitative de l'allure générale de la PCS dans le cas intrinsèque en étudiant le profile des différentes charges et taux de recombinaison dans la QBV, les LP et la QBC

REFERENCES

- [1] Powell, M.J. and Deane, S.C. Phys Rev B48 10815 (1993).
- [2] Powell, M.J. and Deane, S.C. Phys Rev B53 10121 (1996).
- [3] Main, C. Berkin, J. and Merazga, A. New Physical Problem in Electronic Material. Ed. N. Kirov World Scientific (1990).
- [4] J.G. Simmons and G.W. Taylor, Phys Rev B4 502 (1971).
- [5] W. Shockley and Jr. W.T. Read, Phys Rev B7 835 (1952).
- [6] H. Fritzsche, B. Yoon, D.Z. Chi and M.Q. Tran. Non-Cryst Solids 141 (1992).
- [7] Schumm, G. and Bauer, G.H. Philos Mag B64 515 (1991).
- [8] T. Smail et T.M. Brahim, Phil Mag B64 675 (1991).
- [9] J.K. Yoon, J. Jang and C. Lee, J. Appl. Phys 64 6951 (1988).
- [10] G. Erdogaan, Low Temperature of Hydrogenated Amorphous Silicon (a-Si:H) Thin Films, Master of Science, Izmir, Turkey (2001).