

APPLICATION DU MODELE "DEFECT POOL" POUR LA SIMULATION DE LA PHOTOCONDUCTIVITE TRANSITOIRE DANS LE a-Si:H INTRINSEQUE ET DOPE PAR LE PHOSPHORE

Reçu le 19/10/2002– Accepté le 12/06/2004

Résumé

Le profil d'énergie de la densité des états le long du gap du a-Si:H est déterminé conjointement par le modèle *defect pool* (MDP) et la queue de bande de conduction (QBC) calculée par la transformé de Fourier de la photoconductivité transitoire (PCT). La PCT obtenue par la simulation numérique est comparée avec les données expérimentales pour le cas du a-Si:H intrinsèque et le a-Si:H dopé par le phosphore. Les caractéristiques observées dans les courbes de la PCT à différentes températures permettent de calculer la fréquence d'émission au bord de la mobilité, le minimum de la queue de la QBC dans le a-Si:H intrinsèque et le pic de la bande des donneur dans le a-Si:H dopé

Mots clés: Densité des états, "Defect pool", photoconductivité transitoire

Abstract

The energy profile of the density of states over the gap of the a-Si:H is determined jointly by the defect pool model and the Fourier transform of the transient photoconductivity (TPC). The TPC obtained from numerical simulation is compared with experimental data for the intrinsic and P-doped a-Si:H. The observed characteristics in the transient photoconductivity curves at various temperatures allow the calculation of the attempt to escape frequency at the mobility edge, the conduction band tail minimum in intrinsic a-Si:H and the donor band peak in doped a-Si:H.

Keywords: Density of states, Defect pool, transient photoconductivity.

A.F. MEFTAH
A.M. MEFTAH
A. MERAZGA
Faculté des Sciences
Laboratoire des Matériaux
Semi-conducteurs et Métalliques
Université Mohammed Khider
B.P. 145, Biskra 07000 (Algérie)

ملخص

يحدد شكل كثافة الحالات الممتدة على طول النطاق الطاقى للسليسيوم اللامتبلور المهدرج بكل من نموذج مسبح العيوب وطريقة تحويل فورييه للناقلية الضوئية الانتقالية. تقارن الناقلية الضوئية الانتقالية المحصل عليها من خلال المحاكاة الرقمية مع النتائج التجريبية للسليسيوم اللامتبلور المهدرج الجوهري وكذا المطعم بالفسفور. الخصائص المميزة لمنحنيات الناقلية الضوئية من اجل درجات حرارة متغيرة، تسمح بتحديد تواتر الففز عند حدود الحركية، القيمة الصغرى لذيل عصابة النقل في للسليسيوم اللامتبلور المهدرج الجوهري وقمة عصابة المانحات في الآخر المطعم بالفسفور.

الكلمات المفتاحية: كثافة الحالات، مسبح العيوب، الناقلية الضوئية الانتقالية.

La distribution de la densité d'état des défauts a été déterminée en utilisant une description simple de l'équilibre chimique entre les niveaux d'énergie des liaisons faibles dans la queue de bande de valence (QBV) et les niveaux d'énergie au milieu du gap où on s'attend à ce que les défauts soient formés [1-6]. Le mécanisme a été identifié comme une conversion des liaisons faibles aux liaisons pendantes et la diffusion de l'hydrogène à travers les défauts fait partie d'un tel mécanisme [2]. Dans les premières versions du MDP [1,3,5], l'implication de l'hydrogène était sous forme d'un terme influençant l'entropie du défaut. Cependant, dans la version récente du modèle [6], l'hydrogène est inclus non seulement comme élément équilibrant mais aussi comme élément fournissant, par son mouvement; l'entropie supplémentaire nécessaire à la formation du défaut. En effet, c'est cette dernière version du modèle qu'on a utilisé pour calculer la densité d'état des défauts. Les états de la QBV sont supposés avoir une distribution exponentielle pour le calcul de densité des défauts; cependant, les états de la QBC ne sont pas déterminés par le MDP. Des méthodes de calcul différentes [7-10] sont utilisées pour déterminer la distribution de cette dernière qui est généralement de forme exponentielle pour le a-Si:H intrinsèque, tandis que pour le a-Si:H dopé par le phosphore, la densité est constituée de deux régions de pentes différentes séparées par le pic de la bande des donneurs.

Dans cet article, nous allons utiliser le MDP en considérant une QBV de forme exponentielle pour calculer la densité des défauts des liaisons pendantes (LP) au milieu du gap. La QBC utilisée, dans les deux cas du a-Si:H intrinsèque et dopé, est celle calculée par la technique de la transformé de Fourier dans un travail précédent [10]. La densité des états

résultante comprenant les trois types des états différents (QBV, LP et QBC) est utilisée dans la simulation de la PCT. Une comparaison avec les données expérimentales est faite pour prouver la conformité de la densité obtenue par le MDP avec la forme de la QBC utilisée. La simulation de la PCT pour différentes températures est exploitée pour déterminer la fréquence d'émission au bord de la mobilité, le minimum de la QBC pour le a-Si:H intrinsèque et le pic de la bande des donneurs pour le a-Si:H dopé. Ces paramètres sont aussi comparés avec les valeurs déterminées expérimentalement.

TECHNIQUES EXPERIMENTALES

L'échantillon utilisé est préparé par la méthode de déposition par décharge lumineuse. Elle consiste en la production d'un plasma à basse pression de gaz par un champ RF. Le plasma contient des électrons avec des énergies entre 1 et 10 eV dont la température est 100 fois plus grande que celle du gaz SiH₄ introduit. Les électrons vont briser les liaisons moléculaires du gaz qui se décompose et se dépose en couche mince sur le substrat avec des radicaux SiH_x et Si [11]. La caractérisation du matériau est effectuée par la technique de la PCT dans laquelle l'échantillon de configuration coplanaire est exposé à une excitation laser très rapide (5 ns) avec une longueur d'onde de 630 nm [10]. Suite à l'excitation, des paires électrons-trous sont créées et séparées par le champ électrique appliqué (~10⁴V/cm) ce qui induit un photocourant mesurable.

SIMULATION

Le profil d'énergie de la QBC a été obtenu comme densité d'état modèle à partir d'une interpolation des données de la densité d'état qui est déterminée à son tour au moyen de la technique de la transformé de Fourier [7]. Elle est de forme exponentielle pour le cas du a-Si:H intrinsèque:

$$g_c(E) = G_c \exp\left(\frac{E - E_c}{K_B T_c}\right) \quad (1)$$

Les paramètres G_c et T_c sont tels que déterminés par l'interpolation; 10²¹ cm⁻³ eV⁻¹ et 246°K ce qui donne à la QBC une largeur de 21 meV [10].

Pour le cas du a-Si:H dopé par le phosphore, la QBC est constituée de deux régions de pentes différentes séparées l'une de l'autre par le niveau E_d qui représente le pic de la bande des donneurs :

$$g_c(E) = G_c \exp\left(\frac{E - E_c}{K_B T_{c1}}\right) \cdot \left(1 - \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_d - E}{K_B T_{co}}\right)}\right) \quad (2)$$

où T_{c1} , T_{co} et E_d ont, respectivement, les valeurs 2143°K, 194°K et 1.74eV ce qui donne à la QBC une largeur de 15 meV [10].

Pour la QBV et la densité des LP, nous utilisons la version du MDP améliorée par Powell *et al.* [6]. Les réactions élémentaires qu'ils ont proposé pour décrire

l'émission et la capture de l'hydrogène sont les suivantes:



Dans la première réaction, l'atome de l'hydrogène est capturé par un liaison faible SiSi en formant le défaut SiHD. Dans la deuxième réaction, un second atome d'hydrogène est capturé par le défaut SiHD. L'espèce SiHHSi formée est une liaison typique appartenant à la bande de valence. La déformation imposée par les deux atomes d'hydrogène affaiblit une liaison forte SiSi voisine en la transformant en une liaison faible qui appartiendra aux états de la QBV. L'application de la loi de l'effet de masse à la première réaction en considérant une probabilité de création des défauts de distribution gaussienne suivant le MDP [5,6]; $P(E) = (1/\sigma\sqrt{2\pi}) \exp[-(E - E_p)^2/2\sigma^2]$ et une distribution exponentielle pour la QBV;

$g_v(E) = G_v \exp\left(\frac{E_v - E}{K_B T_v}\right)$ permet la détermination de la densité d'état des défauts en fonction de l'énergie qui a comme expression :

$$D(E) = \gamma \left[\frac{2}{f^o(E)} \right]^{K_B T / 2 E_{vo}} P \left[E + \frac{\sigma^2}{2 E_{vo}} \right],$$

avec

$$\gamma = \left[\frac{G_v 2 E_{vo}^2}{[2 E_{vo} - K_B T]} \right] \cdot \left[\frac{H}{N_{SiSi}} \right]^{K_B T / 4 E_{vo}} \exp \left[\frac{-1}{2 E_{vo}} \left[E_p - E_v - \frac{\sigma^2}{4 E_{vo}} \right] \right], \quad (5)$$

$E_{vo} = K_B T_v$ est la pente de la QBV, G_v est la densité d'états à E_v , H et N_{SiSi} sont, respectivement, les concentrations des atomes d'hydrogène et de Si dans le matériau. E_p et σ sont, respectivement, le maximum et la largeur de la gaussienne. $f^o(E)$ est la fonction d'occupation des états neutres des LP.

Ces composants de la densité des états forment le modèle de la structure électronique utilisée pour la simulation de la PCT. Les états de la QBC et la QBV sont considérés, respectivement, comme des accepteurs et des donneurs. Pour les états divalents des LP, on utilise une densité équivalente d'états monovalents [12]:

$$g_d(E) \approx D(E + K_B T \ln 2) + D(E - U - K_B T \ln 2) \quad (6)$$

Les paramètres utilisés pour le calcul de la densité des états selon le modèle defect pool sont groupes dans le tableau 1.

Paramètres	Ordre de grandeur
E_{vo} (meV)	43
G_v (cm ⁻³ eV ⁻¹)	10 ²¹
H (cm ⁻³)	5×10 ²¹
N_{SiSi} (cm ⁻³)	2×10 ²³
E_p (eV)	1.27
σ (eV)	0.178

Tableau 1: Paramètres du MDP utilisés pour le calcul de la densité des états.

RESULTATS ET DISCUSSIONS

La figure 1 montre la distribution totale de la densité des états obtenue par le MDP et la transformé de Fourier de la PCT pour le cas du a-Si:H intrinsèque et le cas du a-Si:H dopé par le phosphore: les trois composantes de la densité sont en lignes pointillées et la distribution totale est en ligne continue.

Dans le premier cas, la QBC présente un minimum situé autour du niveau d'énergie $E_{\min} \sim 1.58$ eV avec une densité de l'ordre de $10^{15} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$. Dans le deuxième cas, l'effet du dopage sur la forme de la QBC est remarquable; la densité des états d'énergie autour du niveau $E_d \sim 1.74$ eV [13] augmente avec la concentration du dopage en présentant une queue étroite au dessous de E_d et une distribution large au dessus. Il a été affirmé dans un travail précédent [9], que la diminution de la largeur de la QBC est due à un effet de désordre imposé par le dopage sur sa forme et qui a lieu autour du niveau des donneurs. De plus, il a été prévu que cet effet est en accord qualitatif avec le MDP puisque ce dernier prévoit une densité basse au minimum de la QBC [10].

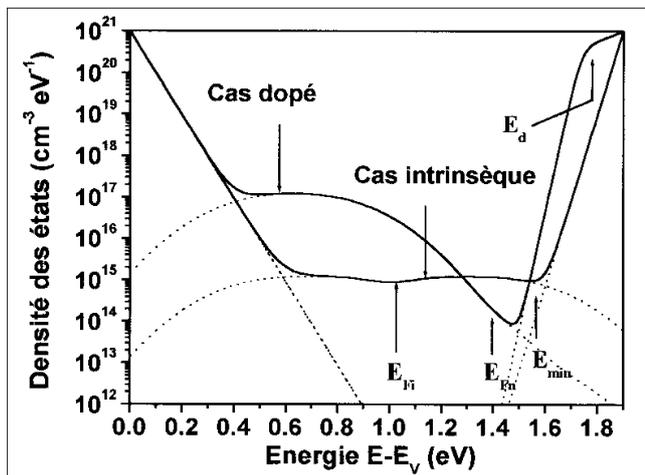


Figure 1: Densité des états totale dans le gap avec ces composants pour les deux cas du a-Si:H intrinsèque et dopé.

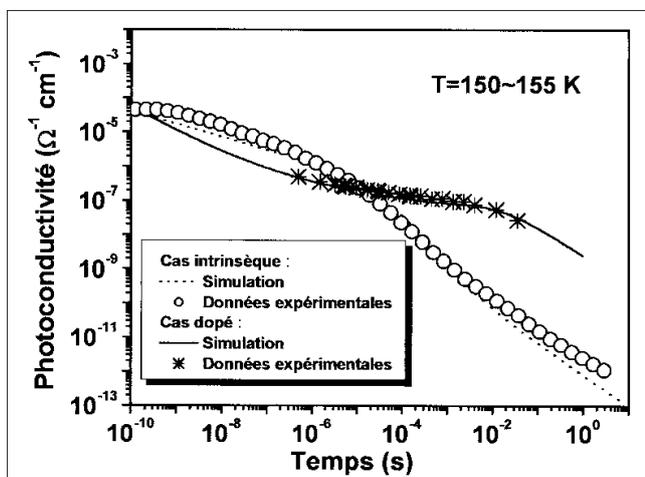


Figure 2: Reconstitution de la PCT expérimentale par simulation en utilisant les modèles de la densité des états de la Fig.1 pour le a-Si:H intrinsèque et dopé.

D'après la figure 2, la simulation numérique de la PCT obtenue en utilisant la densité totale des états dans le gap présente une fidèle reconstitution des données expérimentales pour le a-Si:H intrinsèque aussi bien que pour le dopé. Pour l'intrinsèque, la courbe de la PCT est caractérisée par deux régions. La première, au dessous de 10^{-5} sec, reflète la thermalisation des porteurs libres à travers les états de la queue. La deuxième est au-delà de 10^{-5} sec où l'allure de la PCT présente une certaine courbure qui indique un piégeage des porteurs libres par les états profonds des liaisons pendantes. Cependant, pour le a-Si:H dopé, les deux régions de thermalisation et de piégeage profond sont séparées par une région stationnaire dans laquelle la PCT est presque constante, reflétant un transport non dispersif où les porteurs libres sont en équilibre thermique avec les états autour d'un certain niveau d'énergie.

Les figures 3 (a-b) et 4 (a-b) montrent, respectivement, les courbes mesurées et simulées de la PCT à différentes températures. Nous pouvons remarquer que les particularités expérimentales sont reproduites par la simulation, en particulier, les taux d'abaissement de la PCT et le déplacement vers la droite de la courbure associée au piégeage profond avec la diminution de la température.

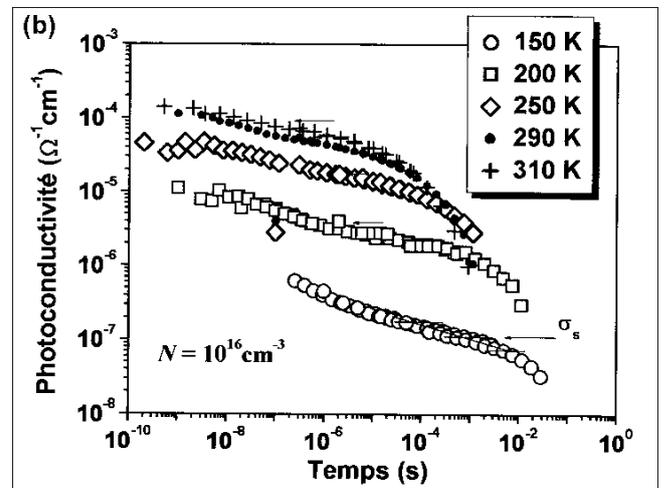
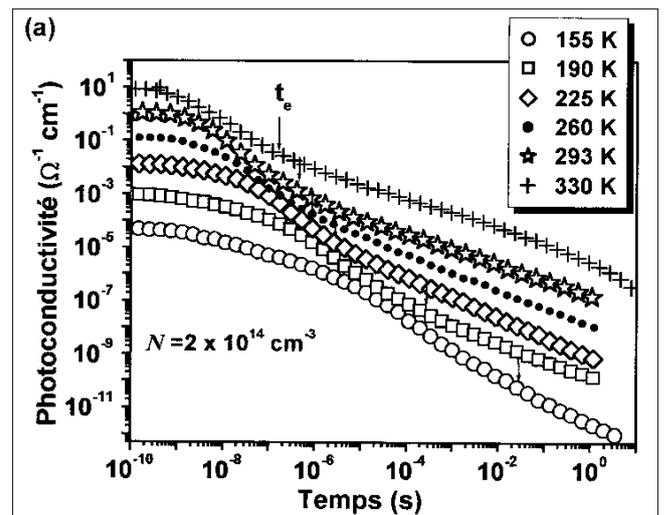


Figure 3: PCT expérimentale mesurée à différentes température: (a) a-Si:H intrinsèque; (b) a-Si:H dopé par le phosphore.

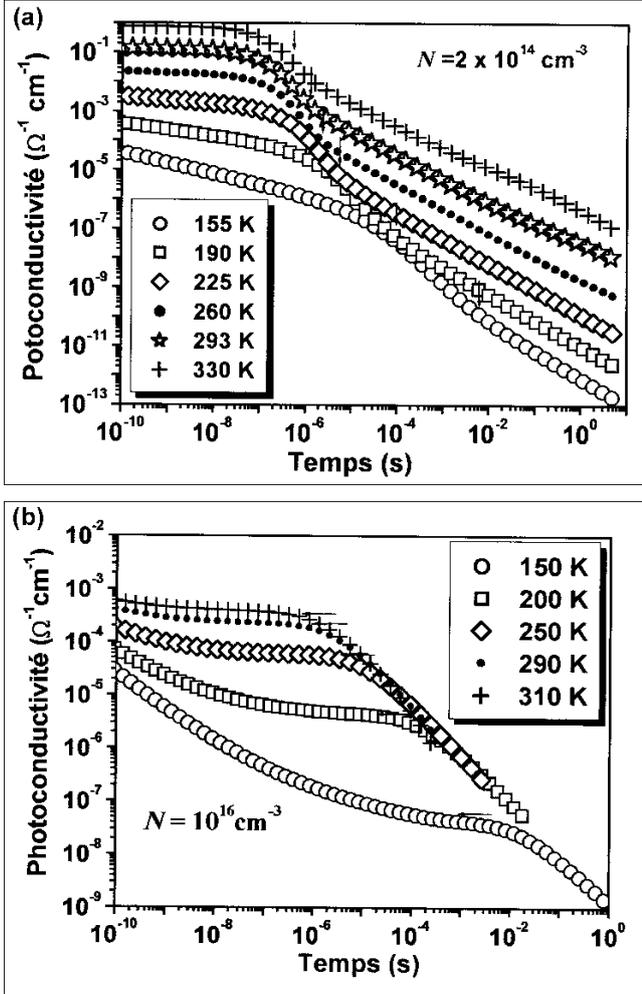


Figure 4: PCT simulée pour différentes température: (a) a-Si:H intrinsèque; (b) a-Si:H dopé par le phosphore.

Le point d'inflexion dans la courbe de la PCT pour le cas du a-Si:H intrinsèque, t_e , indique le temps à partir duquel commence le processus d'émission à partir des pièges profonds d'énergie E tel que $E \leq E_{\min}$. Le tracé de la courbe $\ln(t_e) = f(1/T)$ (tracé d'Arrhenius) permet selon l'équation:

$$t_e = \nu^{-1} \exp\left(\frac{\Delta E}{K_B T}\right) \quad (7)$$

de calculer graphiquement la fréquence d'émission au bord de la mobilité ν et la différence d'énergie ΔE qui peut être une estimation raisonnable de la position du minimum de la QBC, E_{\min} , par rapport à E_c (Fig.5). Pour le cas du a-Si:H dopé par le phosphore, le tracé de la courbe $\ln(\sigma_s)$, qui est la valeur de la PCT dans la région où elle devient presque constante, en fonction de $(1/T)$, permet de déterminer, par rapport à E_c , la position du niveau d'énergie autour duquel se concentre le paquet des électrons photogénérés au cours du transport non dispersif (Fig.6).

D'après la figure 5, on peut tirer les valeurs moyennes de E_{\min} et ν qui sont, respectivement, 1.58 eV et $3 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$. Cela signifie qu'effectivement E_{\min} est le niveau d'énergie à partir duquel débutent les pièges profonds. D'après la figure 6, le niveau d'énergie autour duquel se concentre le paquet des électrons en effectuant un transport non dispersif est

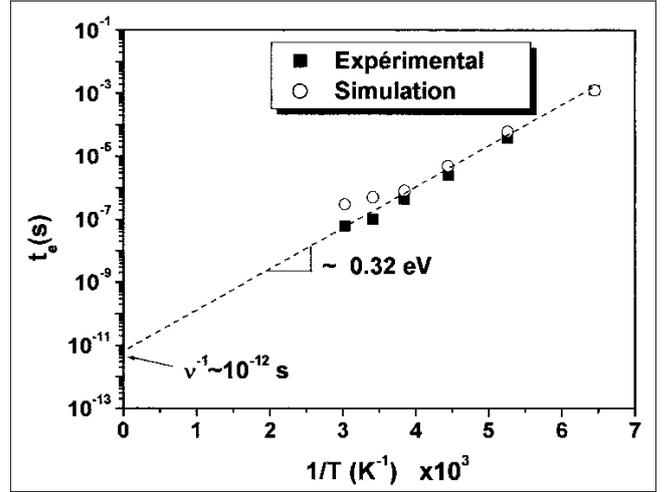


Figure 5: Tracé de la fonction $\ln(t_e) = f(1/T)$ pour la PCT mesurée et simulée à différentes températures dans le a-Si:H intrinsèque.

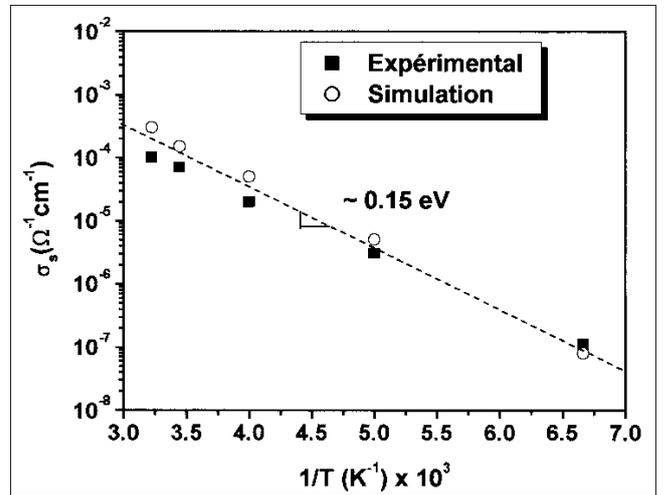


Figure 6: Tracé de la fonction $\ln(\sigma_s) = f(1/T)$ pour la PCT mesurée et simulée à différentes températures dans le a-Si:H dopé par le phosphore.

situé à 0.15 eV au-dessous de E_c ce qui correspond à peu près à 1.74 eV. Ce dernier n'est autre que le niveau des donneurs qui sépare les deux régions de pentes différentes.

CONCLUSION

La distribution de la densité d'état des défauts calculée par le MDP et la distribution de la QBC déterminée par la transformé de Fourier donnent le modèle de la densité des états du gap pour la simulation numérique de la PCT. La comparaison de la PCT simulée à différentes températures avec les données expérimentales dans les deux cas du a-Si:H intrinsèque et dopé par le phosphore a permis d'une part, de prouver la consistance entre la distribution des liaisons pendantes déterminée par le MDP et le profil de la QBC déterminé par la transformé de Fourier, et d'une autre part, de calculer la fréquence d'émission au bord de la mobilité, la position du minimum de la QBC pour le a-Si:H intrinsèque et la position du niveau d'énergie des donneurs pour le a-Si:H dopé par le phosphore.

REFERENCES

- [1]- Winer K., "Defect formation in a-Si:H", *Phys. Rev.* B41, (1990), p.12150.
- [2]- Street R.A., "Hydrogen diffusion and electronic metastability in amorphous silicon", *Physica B.*, 170, (1991), p.69.
- [3]- Shumm G., Bauer G.H., "Thermodynamical equilibrium gap-state distribution in undoped a-Si:H", *Philos. Mag. B*, 64, (1991), p.515 .
- [4]- Shumm G., "Chemical equilibrium description of stable and metastable defect structure in a-Si:H", *Phys. Rev.* B49, (1994), p.2427.
- [5]- Powell M.J., Deane S.C., "Improved defect-pool model for charged defects in amorphous silicon", *Phys. Rev.* B49, (1993), p.10815.
- [6]- Powell M.J., Deane S.C., "Defect-pool model and the hydrogen density of states in hydrogenated amorphous silicon", *Phys. Rev.* B53, (1996), p.10121.
- [7]- Webb D.P., "Optoelectronic properties of amorphous semiconductors," Ph.D. thesis, University of Abertay Dundee, (1994).
- [8]- Main C., Reynolds S., "An enhanced resolution technique for determination of the distribution of localized states in semiconductors from transient photocurrents", *Appl. Phys. Letters*, 76, (2000), p.3085.
- [9]- Merazga A., Belgacem H., Main C., Reynolds S., "Transient photoconductivity, density of tail states and doping effect in amorphous silicon", *Solid State Comm.*, 112 (1999), p.535.
- [10]- Merazga A., Meftah A.F., Meftah A.M., Main C., Reynolds S., "Defect pool model based transient photoconductivity and the conduction band tail profile in a-Si:H", *J. Phys. Condens. Matter.*, 13, (2001), p.10969.
- [11]- Elliot S.R., "Physics of Amorphous Materials", Second Edition, Longman Scientific & Technical (1990).
- [12]- Longeaud C., Kleider J.P., "Trapping and recombination via dangling bonds in amorphous and glassy semiconductors under steady-state conditions: Application to the modulated photocurrent experiment", *Phys. Rev.* B48, (1993), p.8715.
- [13]- Street R.A., "Hydrogenated Amorphous Silicon", Cambridge University Press, Cambridge, (1991), pp.150-153. □