

LA DEPENDANCE EN TEMPERATURE DE LA PHOTOCONDUCTIVITE A L'ETAT STATIONNAIRE BASEE SUR LE MODELE "DEFECT POOL" DANS LE SILICIUM AMORPHE HYDROGENE (a-Si:H) INTRINSEQUE ET DOPE.

S. TOBBECHE, A. MERAZGA.

Laboratoire des matériaux semi-conducteurs et métalliques.
Faculté des Sciences et Sciences de l'ingénieur,
Université Mohammed Khider, BP 145, Biskra 07000, Algérie.
E-mail:souad.tobbeche@caramail.com

RÉSUMÉ

Ce travail est une étude par simulation numérique de la photoconductivité à l'état stationnaire (σ_p) en fonction de la température (T) dans le a-Si:H intrinsèque, dopé de type (n) et dopé de type (p). La densité des états (DOS) du matériau est formée par des queues de bande de valence (QBV) et de conduction (QBC) de formes exponentielles et une distribution de la densité des états des liaisons pendantes (LP) calculée à partir du modèle "defect pool" (MDP) en partant des réactions d'équilibre chimique qui décrivent le mécanisme de conversion des liaisons faibles SiSi en LP. Les transitions électroniques relatives aux états des QB sont décrites par les statistiques de Simmons–Taylor tan disque celles des LP sont décrites par des fonctions d'occupation propres aux LP. La dépendance de la photoconductivité à l'état stationnaire de la température basée sur le MDP ainsi simulée pour différents degrés de dopage est comparée à celle observée expérimentalement. On vérifie que le MDP constitue le modèle théorique le plus adéquat vis à vis des résultats expérimentaux. Les allures des courbes simulées sont en bon accord avec celles observées expérimentalement. A savoir la région de " thermal quenching" à hautes températures suivie d'une région faiblement activée à moyennes températures. L'interprétation des résultats est basée sur l'examen des variations simultanées des différentes charges dans le 'gap' a conduit à lier qualitativement les aspects de la photoconductivité à la structure du matériau.

ABSTRACT

In this paper, we report on the simulation of steady state photoconductivity (σ_p) with temperature (T) in undoped, n-type and p-type a-Si:H. The density of states (DOS) is constructed by exponential distributions of tail states and dangling bonds distributions determined by the defect pool model (DPM) calculation using chemical equilibrium reaction description as the conversion mechanism of weak bonds SiSi to DB. The electron transitions for localized states is described by Simmons-Taylor statistics and the statistics for correlated defects are included for DB. The experimentally observed features in the temperature dependence of the steady state photoconductivity in undoped and doped a-Si:H as the low activation region and the thermal quenching are all compared with simulated σ_p for intrinsic, n-type and p-type a-Si:H. It is shown that the improved defect pool DOS gives better agreement with the experimental observations. Interpretation of the results through examination of the simultaneous variations of the different charge densities in the gap has led to qualitative assignment of these features to the gap density of states (DOS).

1 INTRODUCTION

Depuis la réussite du dopage du silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) [1], ce matériau est devenu l'objet d'études extensives par des méthodes de photoconductivité à la fois expérimentales et à l'aide de simulation numérique. La photoconductivité qui dépend de plusieurs processus (génération, recombinaison, multi-piépage) est un bon outil de caractérisation des propriétés électriques et de détermination de la forme de la densité des états dans le 'gap', paramètre directement lié à la qualité du matériau.

Dans le cas de la photoconductivité en régime stationnaire, plusieurs modèles de recombinaison ont été développés pour expliquer les différents aspects des dépendances de température et intensité d'excitation [2-3-4]. Ces modèles se distinguent par la structure électronique (la densité des états) et le mécanisme de recombinaison et utilisent en général les statistiques de Simmons – Taylor [5].

Notre travail est une étude par simulation pour la dépendance de la photoconductivité stationnaire σ_p de la température (T) dans le a-Si:H intrinsèque, de type n et de type p qui repose sur une densité des états du 'gap' qui est

décrite par le MDP. Ce modèle est basé sur l'équilibre chimique entre les différentes espèces qui font partie de la structure atomique et électronique du matériau [6]. La densité des états calculée par le MDP est appliquée dans la simulation de la dépendance en T de σ_p pour différents degrés de dopages du a-Si:H. Nous montrerons les résultats de simulation de σ_p en fonction de $(1/T)$ et qui sont comparés à des données expérimentales pour le a-Si:H intrinsèque, de type n et de type p [7]. Notre interprétation des résultats de la dépendance en T de σ_p pour différents degrés de dopages du a-Si:H repose sur l'examen des variations des différentes densités de charges dans le 'gap' en fonction de la température.

2 THEORIE

2.1 Densité des états

La densité des états des LP et la densité des états de la QBV sont déterminées par le MDP décrit par Powell et Deane [6]. Dans cet approche, l'occupation par l'hydrogène est défini de telle sorte qu'une liaison faible SiSi peut capturer ou libérer un ou deux atomes d'hydrogène suivant les réactions chimiques (1) et (2). Les liaisons SiHD et SiHHSi sont respectivement les défauts (LP) formés à un certain niveau d'énergie du 'gap' et une liaison doublement occupée créée dans la QBV.



L'application de la loi de masse aux deux réactions chimiques précédentes selon le MDP permet la détermination de la densité des défauts $D(E)$:

$$D(E) = \nu \cdot \left(\frac{2}{f^o(E)} \right)^{K.T/2.E_{vo}} \cdot P \left(E + \frac{\sigma^2}{2.E_{vo}} \right) \quad (3)$$

avec

$$\nu = \left(\frac{G_v \cdot 2.E_{vo}^2}{(2.E_{vo} - K.T)} \right) \left(\frac{H}{N_{\text{SiSi}}} \right)^{K.T/4.E_{vo}}$$

$$\exp \left(\frac{-1}{2.E_{vo}} \left(E_p - E_v - \frac{\sigma^2}{4.E_{vo}} \right) \right)$$

Où E_{vo} est la pente caractéristique de la QBV, G_v est la densité d'états au niveau d'énergie E_v , H et N_{SiSi} sont respectivement les concentrations d'hydrogène et les atomes de silicium.

Dans l'équation (3), $P(E)$ est une distribution supposée de la forme gaussienne avec σ et E_p sont respectivement la largeur et la position du pic dans le 'gap'.

Les fonctions d'occupation f_0 , f_+ et f_- des états chargés des LP D_0 , D^+ et D^- sont définies par les relations suivantes [8]

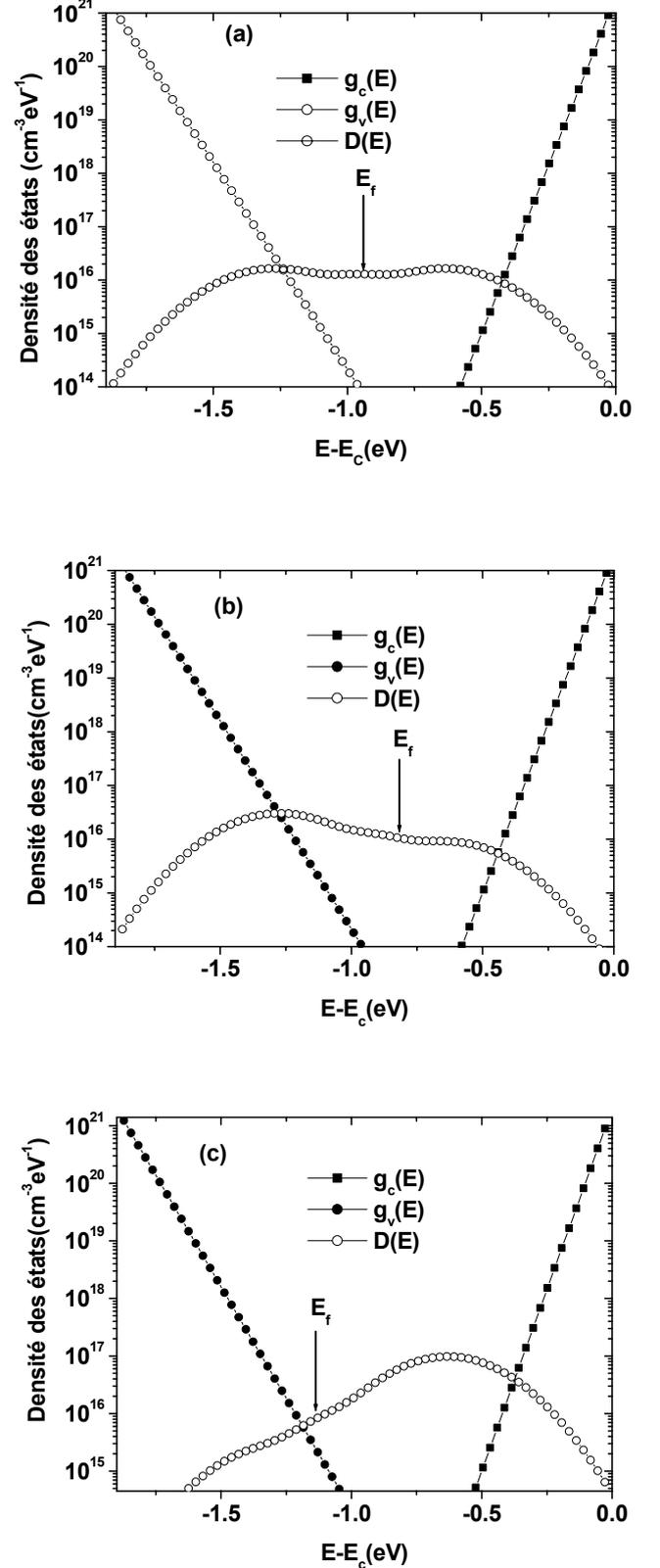


Figure 1 : Densité des états calculée par MDP dans le a-Si:H intrinsèque (a), dopé de type n (b) et dopé de type p (c)

$$f^+(E) = 1/[1 + 2 \exp([E_f E]/KT) + \exp([2E_f - E]/KT)] \quad (4a)$$

$$f^o(E) = 2 \exp([E_f - E]/KT) f^+(E) \quad (4b)$$

$$f^-(E) = \exp([2E_f - 2E - U]/KT) f^+(E) \quad (4c)$$

Les trois composantes de $D(E)$, D^+ , D^o et D^- sont définies par:

$$D^+(E) = D(E) \cdot f^+(E) \quad (5a)$$

$$D^o(E) = D(E) \cdot f^o(E) \quad (5b)$$

$$D^-(E) = D(E) \cdot f^-(E) \quad (5c)$$

La position du niveau de Fermi E_f dans le 'gap' est déterminé par simulation en considérant la neutralité de charge qui inclue toutes les charges libres, piégés et la concentration du dopage dans le cas du a-Si:H dopé.

Tableau 1: paramètres utilisés dans MDP pour le calcul de la densité des états.

E_v (eV)	-1.9
σ (eV)	0.19
E_p (eV)	-0.63
$Gv=G_c$ ($\text{cm}^{-3} \cdot \text{eV}^{-1}$)	2.10^{21}
E_{vo} (meV)	56
N_{SiSi} (cm^{-3})	2.10^{23}
H (cm^{-3})	
	5.10^{21}
U (eV)	0.2

La figure 1 représente la densité des états dans le 'gap' calculée par le MDP dans le cas du a-Si:H intrinsèque, dopé de type (n) et dopé de type (p) ainsi que la densité des états dans la QBC de forme exponentielle.

2.2 Simulation de la photoconductivité à l'état stationnaire

Pour une absorption uniforme de la lumière, le matériau doit être électriquement neutre lorsque le régime permanent est atteint. Ceci se traduit par la condition de neutralité de charges et le taux net de recombinaison des électrons doit être égal au taux de génération de paires électron-trou.

2.2.1 Equation de la neutralité de charges:

En terme de concentration de charges, la neutralité de charges s'exprime par l'équation suivante:

$$n - p + Q_c - Q_v + Q_{DB}^- - Q_{DB}^+ = Q \quad (6)$$

où n et p sont les concentrations des électrons et des trous libres, Q_c et Q_v sont les densités de charges en électrons et

en trous dans la QBC et dans la QBV respectivement, Q_{DB}^+ et Q_{DB}^- sont les densités de charges positives et négatives dans les états des LP D^+ et D^- respectivement, Q est positive et égale à la densité des électrons ajoutée par les atomes donneurs ionisés pour le a-Si:H de type n, elle est égale à zéro pour le a-Si:H intrinsèque et elle est négative et sa valeur absolue est égale à la densité des trous ajoutés par les atomes accepteurs ionisés pour le a-Si:H de type p. Q_c , Q_v , Q_{DB}^+ et Q_{DB}^- sont définies par:

$$Q_c = \int_{E_v}^{E_c} g_c(E) \cdot f_c(E) \cdot dE \quad (7)$$

$$Q_v = \int_{E_v}^{E_c} g_v(E) [1 - f_v(E)] \cdot dE \quad (8)$$

$$Q_{DB}^+ = \int_{E_v}^{E_c} D(E) \cdot F^+(E) \cdot dE \quad (9)$$

$$Q_{DB}^- = \int_{E_v}^{E_c} D(E) \cdot F^-(E) \cdot dE \quad (10)$$

Où $f_c(E)$, $f_v(E)$ sont les fonctions d'occupation en électrons et en trous dans les QB à l'état stationnaire [5]. $F^+(E)$, $F^-(E)$ sont les fonctions d'occupation à l'état stationnaire décrivant les états chargés positifs et négatifs des LP [4].

2.2.2 Taux net de recombinaison des électrons:

$$R_{ct} + R_{vt} + R_{DB} = G \quad (11)$$

où R_{ct} et R_{vt} sont les taux de recombinaison des électrons à travers la QBC et la QBV respectivement, R_{DB} est le taux de recombinaison des électrons à travers les LP et G est le taux de génération de paires électron-trou sous l'effet de la lumière. Ils sont définis par [4]:

$$R_{ct,vt}(n, p) = \int_{E_v}^{E_c} g_{c,v}(E) \cdot \frac{C_n^{c,v} \cdot C_p^{c,v} \cdot (n \cdot p - n_o \cdot p_o)}{n \cdot C_n^{c,v} + p \cdot C_p^{c,v} + e_n + e_p} \cdot dE \quad (12)$$

$$R_{DB}(n, p) = \int_{E_v}^{E_c} [n \cdot (F^+ \cdot C_n^+ + F^o \cdot C_n^o) - (F^o \cdot e_n^o + F^- \cdot e_n^-) D(E)] \cdot dE \quad (13)$$

où n_o , p_o sont les concentrations des électrons et des trous à l'équilibre thermique définies par $n_o = N_c \exp[(E_c - E_f)/K.T]$ et $p_o = N_v \exp[(E_f - E_v)/K.T]$, e_n et e_p sont les probabilités d'émission des électrons et des trous à partir de la QBC et e_n^o et e_n^- sont les probabilités d'émission des électrons à partir des LP D^o et D^- . C_n^c , C_n^v , C_p^c , C_p^v sont les coefficients de capture des électrons et des trous par la QBC et la QBV respectivement. C_n^o est le coefficient de capture de l'électron par l'état D^o , C_p^o est le coefficient de capture du trou par l'état D^o et C_n^+ est le coefficient de capture de l'électron par l'état D^+ .

La photoconductivité à l'état stationnaire σ_p est calculée après la résolution numérique du système formé par l'Eq.6 et l'Eq. 11 par la formule :

$$\sigma_p = e \cdot (\mu_n \cdot n + \mu_p \cdot p) \quad (14)$$

où e est la charge de l'électron libre, μ_n et μ_p sont les mobilités des électrons et des trous libres. Les paramètres utilisés dans le calcul de σ_p sont groupés dans Tab.2.

Tableau 1 : Paramètres utilisés dans le calcul de σ_p

$\mu_n(\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1})$	10
$\mu_p(\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1})$	0.3
$C_n^c = C_p^v(\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1})$	10^{-8}
$C_p^c = C_n^v(\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1})$	10^{-10}
$C_n^+ = C_p^- (\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1})$	10^{-7}
$C_n^o = C_p^o (\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1})$	10^{-8}

3 RESULTATS ET DISCUSSIONS

La figure 2 représente la variation en fonction de $(1/T)$ de la photoconductivité normalisée $\sigma_p/e.G$ pour le a-Si:H intrinsèque, de type n et de type p. La forme générale des courbes observées expérimentalement (fig.3) est bien reproduite par les courbes simulées (fig.2).

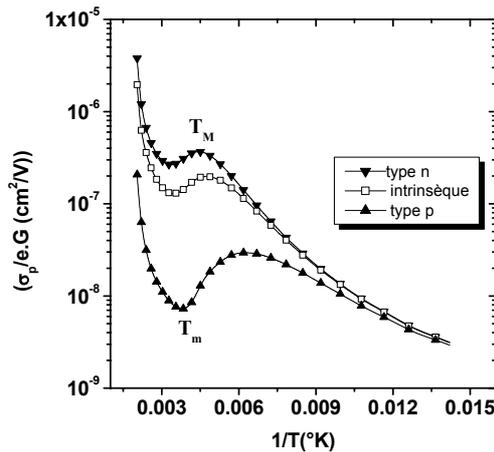


Figure 2 : La photoconductivité normalisée en fonction de $1/T$ simulée pour $G=3.10^{18} \text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$

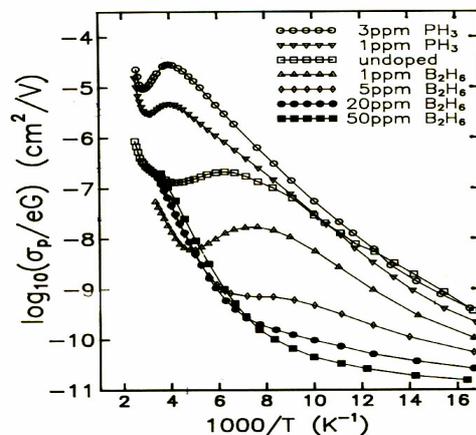


Figure 3 : La photoconductivité normalisée en fonction de $1/T$ mesurée pour $G=3.10^{18} \text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ [7]

Une région correspondante aux basses températures et s'étend jusqu'à la température T_M relative au maximum de σ_p , dans cette région σ_p augmente avec T et possède une énergie d'activation faible $\sim 0.09 \text{eV}$.

Une région où σ_p diminue avec T , elle débute à $T=T_M$ et va jusqu'à T_m relative au minimum de σ_p appelé quenching thermique (TQ). Les températures T_M et T_m se déplacent vers les hautes températures en augmentant le dopage de type p au dopage de type n.

Une région correspond à $T>T_m$ où σ_p reprend sa croissance d'une façon nettement plus rapide.

Pour expliquer les différents aspects de $\sigma_p/e.G$, nous avons procédé par la division de la gamme de température en régions distinctes (figure.4) et l'étude de l'influence des variations simultanées dans chaque région des différentes charges du 'gap' qui interviennent dans l'équation de neutralité de charge (Eq.6) sur la variation de la concentration des électrons libres n qui est en fait proportionnelle à σ_p [9].

Les centres de recombinaison susceptibles de capturer des électrons sont les LP dans les états D^o et D^+ et les états des QB. La recombinaison des électrons croît avec Q_{DB}^o , Q_{DB}^+ , Q_c et Q_v .

Région (I): dans cette région, les charges dominantes sont celles des QB, Q_c et Q_v , ceci signifie que la recombinaison est dominée par les QB, de plus ces charges se superposent sur presque toute cette région et l'équation de neutralité de charge s'écrit:

$$Q_c \approx Q_v \quad (15)$$

La décroissance de Q_c et Q_v avec T correspond à la diminution du nombre des centres de recombinaison des électrons libres n qui est responsable de la croissance de σ_p et de plus la diminution de Q_v à la même énergie d'activation que n . La fin de cette région montre l'apparition d'un maximum de σ_p à $T=T_M$.

Région (II): qui débute à $T=T_M$ et va jusqu'à la température T_m correspondante à un minimum de σ_p et σ_p diminue avec l'accroissement de T . Les charges Q_c et Q_v diminuent et deviennent inférieures à la charge dans les états D^- et la recombinaison à travers les LP domine.

Le début du TQ correspond à T_M et a lieu quand la charge Q_v est approximativement égale à Q_{DB}^- et l'équation de neutralité de charge s'écrit:

$$Q_v = Q_{DB}^- \quad (16)$$

Le processus de recombinaison est déterminé par la capture des trous par les états D^- des LP, ce qui augmente Q_{DB}^o centres de recombinaison des électrons. La charge Q_{DB}^o augmente rapidement entraînant la décroissance de n (ou σ_p) avec T .

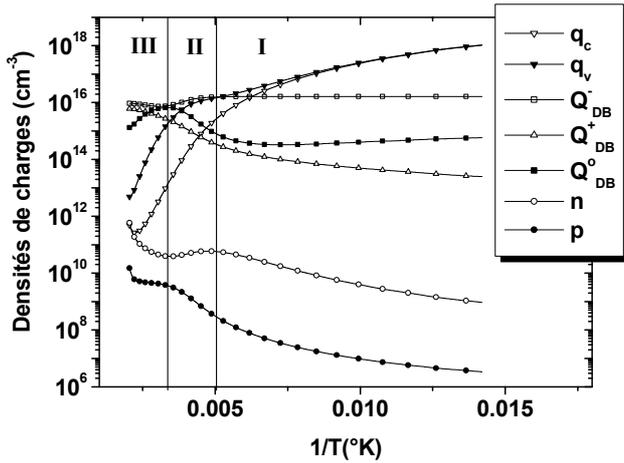


Figure 4 : Variation des densités de charges en fonction de $1/T$ pour le a-Si:H intrinsèque.

Région (III): dans cette région, σ_p augmente d'une façon rapide de nouveau. L'accroissement des électrons libres n est dû aux électrons émis par les états D^0 ce qui correspond à la croissance de Q_{DB}^+ et aux porteurs thermiques présents à l'obscurité, la photoconductivité totale sous lumière σ_p est égale à la conductivité à l'obscurité.

Le quenching thermique en fonction du dopage : La figure.4 montre que le TQ se produit quand la neutralité de charge se transforme de la balance entre les charges de la QBV (Q_v) et les charges de la QBC (Q_c) à la balance entre les charges de la QBV et les états des LP. Ceci nous permet d'expliquer l'observation expérimentale de T_M qui décroît avec le dopage de type n au dopage de type p. Pour cela, nous allons montrer la variation des différentes densités de charges en fonction de $(1/T)$ pour un échantillon de type n avec la concentration du dopage $N_d=10^{16} \text{ cm}^{-3}$ (fig.5).

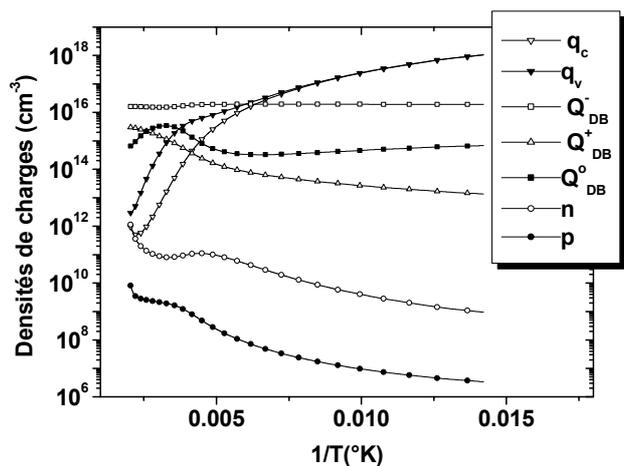


Figure 5 : Variation des densités de charges en fonction de $1/T$ pour le a-Si:H de type (n).

Cette figure montre que la transition de la balance de charges a lieu pour les hautes températures, ce qui résulte

d'un déplacement du maximum de n . Ceci a lieu car la neutralité de charge obéit à $Q_v = Q_{DB}^- - Q$ qui remplace l'Eq.16 quand $Q \neq 0$, donc la charge positive Q_v est réduite à $Q_{DB}^- - Q$ qui est vérifié pour une température plus élevée en comparaison avec le cas du a-Si:H intrinsèque (fig.4). La figure.6 montre les variations des différentes densités de charges pour le cas d'un dopage de type p où

$Q = -4.10^{16} \text{ cm}^{-3}$, à partir de cette figure, nous constatons aussi que la transition de la balance de charge correspondant au TQ se produit pour une température inférieure du moment que la neutralité de charge doit obéir à $Q_v = Q_{DB}^- + |Q|$ à T_M . On note que la photoconductivité est encore dominée par les électrons bien que $p > n$ dans cette région et cela peut être justifiée par la présence de l'équilibre thermique entre les trous et le dopage.

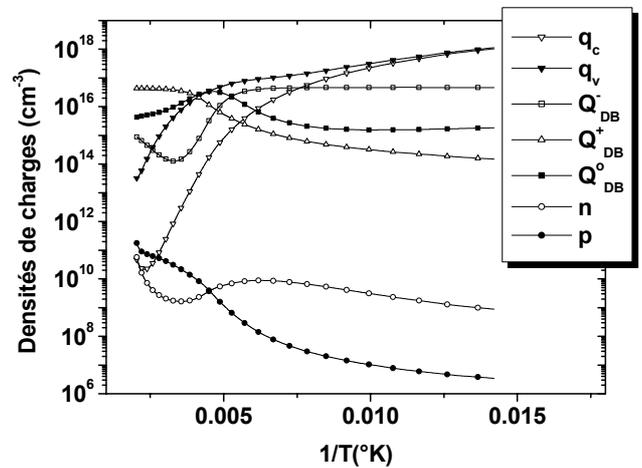


Figure 6 : Variation des densités de charges en fonction de $1/T$ pour le a-Si:H de type (p).

4 CONCLUSION

En conclusion, le DPM reproduit bien les aspects expérimentalement observés de la dépendance en température de la photoconductivité à l'état stationnaire pour le a-Si:H intrinsèque, de type n et de type p tels que la région faiblement activée à basse températures et le TQ à température plus élevée. L'interprétation des résultats est basée sur l'examen des variations simultanées des différentes charges du 'gap' dans les régions distinctes de température a conduit à lier qualitativement les aspects de la photoconductivité à la structure du matériau.

RÉFÉRENCES

- [1] W.E. Spear and P.G. Lecomber, Phil Mag 33, 935 (1976).
- [2] D.A. Anderson and W.E. Spear, Phil Mag 36, 695 (1977).
- [3] M. Hack, S. Guha and M.Shur, Phys Rev B30, 6991 (1984).
- [4] F. Vaillant, D. Jousse and J-C. Bruyere, Phil Mag B57, 649 (1988).
- [5] J.G. Simmons and Taylor, Phys. Rev B4, 502 (1971).
- [6] M.J. Powell and S.C Deane, Phys. Rev B53, 10121-32 (1996).
- [7] H. Fritzsche, B.-G. Yoon, D.-Z Chi and M.Q. Tran, J.Non-Cryst.Solids 141, 123-132 (1992).
- [8] H. Okamoto, H. Kida and Y. Hamakawa, Phil. Mag B49, 231 (1984).
- [9] T. Smail and T. Mohamed-Brahim, Phil .Mag B64, 675 (1991).