

ETUDE COMPARATIVE DE LA METHODE DU PHOTO-COURANT CONSTANT EN REGIME PERIODIQUE (AC-CPM) ET CONTINU (DC-CPM)

COMPARATIVE STUDY OF CONSTANT PHOTO-CURRENT METHOD IN PERIODIC REGIME (AC-CPM) AND CONTINUOUS REGIME (DC-CPM)

T. TIBERMACHINE, A. MERAZGA

Laboratoire des Matériaux Semi-conducteurs et Métalliques
Faculté des Sciences et Sciences de l'Ingénieur,
Université Mohammed Khider, B.P. 145 RP, Biskra 07000, Algérie.
E-mail : tawfik_tiber@yahoo.fr

RESUME

Le but de ce travail est de comparer les résultats de caractérisation des défauts profonds dans le silicium amorphe hydrogéné (a-Si : H) intrinsèque obtenus par la méthode de photo-courant constant en régime périodique (AC-CPM) et en régime continu (DC-CPM). Pour cette raison, nous avons développé un programme de simulation qui tient en compte toutes les transitions optiques possibles, à savoir les transitions optiques directes entre les états occupés et la bande de conduction et les transitions optiques indirectes entre la bande de valence ou la queue de bande de valence et les états non occupés suivie par des émissions thermiques convenables. Nous présentons ainsi la différence observée concernant le coefficient d'absorption optique et la densité d'états profonds entre le régime périodique (mode AC) et le régime continu (mode DC). Ceci est du aux différences qui existent entre les deux modes en termes de transitions optiques directes et indirectes.

MOTS CLÉS : a-Si:H ; AC-CPM ; DC-CPM ; Coefficient d'absorption optique ; Densité d'états profonds

ABSTRACT

The goal of this work is to compare the results concerning the characterization of the deep defect in the intrinsic hydrogenated amorphous silicon (a-Si: H) by mean of constant photo-current method in periodic regime (AC-CPM) and continuous regime (DC-CPM). For this reason, we have developed a simulation computer program including all the possible thermal and optical transitions between gap and conduction band also those which have neglected before; between valence band or tail valence band and non occupied deep states consistent by appropriate thermal emissions. We present the difference observed for the optical absorption coefficient and the density of deep defect states between the periodic regime (AC mode) and the continuous regime (DC mode). We affect this difference to the ability of the AC mode to feel only the direct optical transitions between occupied deep defect and conduction band.

Keywords: a-Si:H ; AC-CPM ; DC-CPM ; Optical absorption coefficient; Deep defect density

1 INTRODUCTION

Le coefficient d'absorption optique est utilisé principalement pour obtenir la distribution et la densité d'états profonds dans les semi-conducteurs amorphes [1,2]. Celle-ci détermine en générale leurs qualités en particulier leurs propriétés optiques et électriques. Plusieurs techniques permettent la mesure du coefficient d'absorption en se basant sur la mesure de la photoconductivité telles que la spectroscopie de déflexion photo-thermique ou PDS [3,4], la photo-conductivité à deux faisceaux ou DBP [5,6] et la technique de photo-courant constant ou CPM [7,8]. Cette

dernière peut être configuré suivant le mode AC [9,10] et le mode DC [11,12]. Dans le mode AC-CPM, le photo-courant est inférieure ou de même ordre que le courant d'obscurité ce qui assure des conditions très proche de celles de l'équilibre thermique. Dans le présent travail, nous déterminerons la densité d'états profonds du silicium amorphes hydrogéné (a-Si : H) intrinsèque à partir du coefficient d'absorption simulé en mode AC. Ainsi l'article sera organisé comme suit : la section suivante décrit et présente les équations de base nécessaire à la simulation, dans la troisième section nous donnerons et discuterons les

différents résultats obtenus par simulation et enfin nous terminerons par une conclusion sur ce travail.

2 THEORIE ET SIMULATIONS

La densité d'états $g(E)$ (DOS) utilisée en simulation est composée de deux parties de formes paraboliques au dessus du bord de mobilité, de deux queues de bandes; de valence QBV et de conduction QBC de formes exponentielles et de deux défauts de distribution gaussienne (voir tableau). Elle est discrétisée avec un pas de dE en un nombre de niveau N d'énergie $E_i(k)$ et de densité $N_i(k)=g(k).dE$.

Notre but est d'examiner la réponse fréquentielle de la densité d'électrons libres $n(\omega)$ à une excitation optique périodique (mode AC) de faible intensité de telle manière que l'occupation d'un état n'est pas perturbée pendant l'illumination ce qui maintient le photo-courant constant. La contribution des trous libres et les transitions thermiques entre les défauts et la bande de valence seront négligées. En se referant à la figure 1, les équations de bases à la fréquence d'excitation ω seront [13] :

- **Electrons libres :**

$$\frac{dn(\omega)}{dt} = -\sum_{k=1}^N \frac{dn_i(k, \omega)}{dt} - \omega_R n(\omega) \quad (1)$$

- **Electrons piégés :**

$$\frac{dn_i(k, \omega)}{dt} = \omega_i(k)n(\omega) - \omega_e(k)n_i(k, \omega) + G(k, \omega) \quad (2)$$

Où $n_i(k, \omega)$ est la densité d'électrons piégés au niveau k à la fréquence ω .

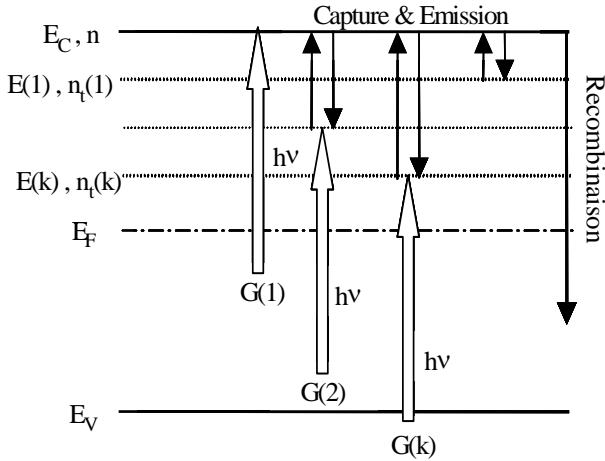


Figure 1 : Transitions thermiques et optiques à une fréquence donnée.

La fréquence de capture et d'émission pour un niveau d'énergie d'indice k et celle de recombinaison sont données respectivement par :

$$\omega_i(k) = C_n(N_i(k) - n_i(k, \omega))$$

$$\omega_e(k) = \nu \exp\left(\frac{E_i(k)}{K_B T}\right)$$

$$\omega_R = 1/\tau_R$$

Avec K_B est la constante de Boltzmann, ν la fréquence d'émission et τ_R est le temps de recombinaison.

$G(k, \omega)$ représente l'excitation périodique au niveau d'énergie E d'indice k , elle est reliée directement aux transitions optiques entre les états occupés $N_{occ}(E) = f(E)g(E)$, et les états non occupés $N_{unocc}(E) = [1 - f(E)]g(E)$, avec une différence d'énergie de $h\nu$ inférieur à la largeur du gap. La fonction d'occupation $f(E)$ est celle de Fermi-Dirac.

Pour chaque photon d'énergie $h\nu$, le taux de génération périodique $G(E, \omega)$ au niveau d'énergie E est calculé à partir de l'équation suivante [11,13]:

$$G(E, \omega) = \left(\frac{cte}{h\nu}\right) N_{occ}(E) N_{unocc}(E + h\nu) \quad (3)$$

Où : $cte = 4.34 \cdot 10^{-38} \text{ cm}^5 \text{ eV}^2$

La solution analytique du système d'équations (1) et (2) pour chaque fréquence ω en terme de densité d'électrons libres $n(\omega)$ [13], nous permet de déduire l'expression mathématique du coefficient d'absorption optique en régime AC pour chaque photon d'énergie $h\nu$:

$$\alpha(h\nu) = \sum_{k=1}^N \frac{G(k, \omega) \phi}{\left(1 + \frac{\omega}{\omega_e(k)}\right)} \quad (4)$$

Où ϕ représente le flux d'excitation monochromatique périodique.

3 RESULTATS ET DISCUSSION

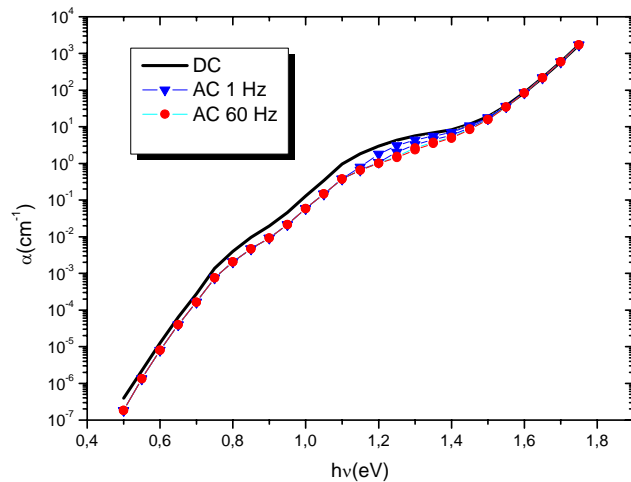
Les paramètres utilisés pour simuler le coefficient d'absorption optique du silicium amorphe hydrogéné (a-Si : H) non dopé sont donnés par le tableau 1.

La figure 2 montre le coefficient d'absorption optique simulé du a-Si:H intrinsèque pour les deux modes DC et AC. La première constatation qui peut être faite sur la courbe obtenue est qu'elle présente la forme caractéristique connue [8,14]. Pour la gamme d'énergie entre 1.8eV et allant jusqu'à 1.4eV la courbe décroît suivant une loi exponentielle : $\alpha \propto \exp(h\nu/E_1)$ où E_1 représente la pente de la QBV, le coefficient d'absorption est attribué aux transitions optiques incluant les niveaux d'énergie de la QBV. Dans l'intervalle d'énergie entre 1.4eV et E_F le coefficient d'absorption est du aux transitions optiques incluant les niveaux d'énergie profonds. Au delà de E_F la courbe décroît à nouveau suivant une loi exponentielle : α

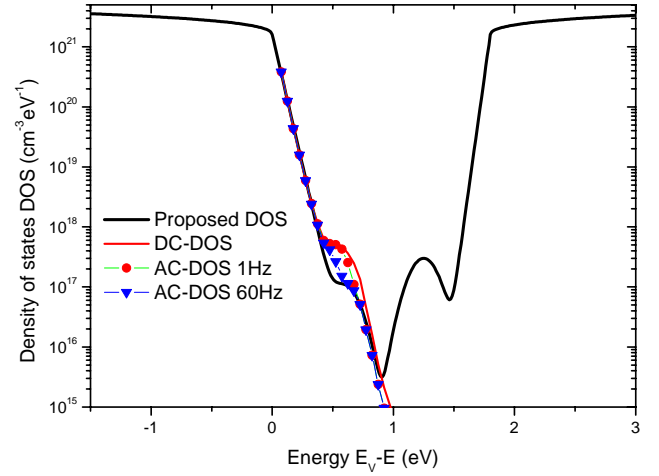
$\propto \exp(h\nu/E_2)$ où E_2 représente pente de la QBC, le coefficient d'absorption cette fois-ci est relié aux transitions optiques incluant les niveaux d'énergie de la QBC. La différence entre le mode DC et AC est à remarquer et la convergence des courbes au fur et à mesure que la fréquence augmente est obtenue comme il est rapporté aux littératures [13,15]. Cette différence entre AC et DC est causé par le fait qu'en régime AC les transitions thermiques qui sont lentes ne sont pas détectées donc la charge libre photogénéré est due seulement aux transitions optiques directes vers la bande de conduction contrairement au régime DC qui tient en compte de toutes les transitions optiques possibles, en d'autre termes la charge libre photogénéré est due non seulement aux transitions optiques directes mais aussi aux transitions optiques indirectes c'est-à-dire en deux phases à partir des états profond occupés vers la QBV suivies par des transitions thermiques correspondantes.

Tableau 1 : Paramètres utilisés en simulation

Excitation optique	$\phi = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$
Température	$T = 300^\circ\text{K}$
Temps de recombinaison	$\tau_R = 10^{-8} \text{ s}$
Mobilité des électrons	$\mu_n = 10 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$
Coefficient de capture des électrons	$C_n = 10^{-8} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$
Densité d'états en E_c	$G_c = 1.6 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$
Pente de la queue de bande de conduction	$K.T_c = 0.03 \text{ eV}$
Gap d'énergie	$E_g = 1.8 \text{ eV}$
Niveau de Fermi	$E_F = 0.9 \text{ eV}$
Largeur de la première gaussienne de la DOS	$W_1 = 0.15 \text{ eV}$
Pic de la première gaussienne de la DOS	$E_{o1} = 1.25 \text{ eV}$
Densité de la première gaussienne de la DOS	$N_{db1} = 3.10^{17} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$
Largeur de la deuxième gaussienne de la DOS	$W_2 = 0.15 \text{ eV}$
Pic de la deuxième gaussienne de la DOS	$E_{o2} = 0.6 \text{ eV}$
Densité de la deuxième gaussienne de la DOS	$N_{db2} = 10^{17} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$


Figure 2 : Coefficient d'absorption optique en mode DC et AC

La figure 3 montre la densité d'états reconstituée à partir du coefficient d'absorption optique en mode DC et AC en utilisant la méthode de dérivation [16,17].


Figure 3 : Densité d'états reconstituée à partir du coefficient d'absorption optique en mode DC et AC

La reconstitution de la DOS est plus correcte en mode AC qu'en mode DC. Cette différence de reconstitution est plus évidente au niveau des défauts profonds. Cela est interprété par le fait que le mode AC ignore les transitions lentes où les états non occupés sont inclus donc dans ce mode seulement les états occupés qui sont reconstitués. C'est généralement l'approximation faite pour calculer la DOS à partir de l'intégrale de convolution (voir équation 3).

4 CONCLUSIONS

Nous avons déterminé dans cette étude comparative de la technique de photo-courant constant en mode AC et DC, la densité d'états profonds pour le silicium amorphe hydrogéné non dopé à partir de son coefficient d'absorption optique. Nous avons démontré la différence observée dans la reconstitution de la DOS entre le mode DC et AC d'un coté et entre les différentes fréquences choisies d'un autre coté. Cette source d'erreur nous l'avons attribuée aux transitions thermiques lentes associées aux transitions optiques rapides donc au fur et à mesure que la fréquence croit, le mode AC ne voit pas ces transitions lentes. Dans ces conditions nous avons conclu que la technique CPM configuré en régime AC donne seulement la distribution des défauts profonds occupés sans addition d'autres états comme le cas du régime DC. Néanmoins, il reste de généraliser l'étude pour d'autres types de semi-conducteurs amorphes et d'adapter d'autres modèles de densité d'états plus complexe par exemple le modèle de 'Defect Pool' avec les fonctions d'occupation adéquates.

REFERENCES

- [1] N. Wyrsh, F. Finger, T. J. McMahon and M. Vanecek, *Journal of Non Crystalline Solids* **137&138** (1991)347-350.
- [2] M. Gunes and C. R. Wronski, *J. Appl. Phys.* **81**(8) (1997)3526-3536.
- [3] W. B. Jackson, N. M. Amer, A. C. Boccara, and D. Fournier, *Applied Optics* **20**(8) (1981) 1333-1344.
- [4] G. Amato, G. Benedetto, L. Boarino and R. Spagnolo, *Solid State Comms.* **77**(3) (1991) 177-180.
- [5] J. J. G. Van den Heuvel, M. Zeman and J. W. Metselaar, *Proceedings of the SAFE/IEEE workshop*, (2000)53-59.
- [6] M. Gunes, C. R. Wronski and T. J. McMahon, *J. Appl. Phys.* **76**(4) (1994)2260-2263.
- [7] M. Vanecek, J. Kocka, A. Poruba, and A. Fejfar, *J. Appl. Phys.* **78** (10) (1995)6203-6210.
- [8] P. Sladek, P. Stahel and M. L. Theye, *Philos. Mag. B*, **71**(5) (1995)871-880.
- [9] P. Sladek and M. L. Theye, *Solid State Comms.* **89**(3) (1994)199-203.
- [10] S. Hasegawa, S. Nitta and S. Nonomura, *Journal of Non Crystalline Solids* **198**(200) (1996)544-547.
- [11] J. A. Schmidt, R. Arce, R.H. Buitrago, and R. R. Koropecski, *Physical Review B*, **55**(15) (1997-1)9621-9627.
- [12] J. A. Schmidt and F. A. Rubinelli, *J. Appl. Phys.*, **83**(1) (1998)339-348.
- [13] C. Main, S. Reynolds, I. Zrinscak and A. Merazga, *Journal of Materials Science-Materials in Electronics*, (2003).
- [14] A. Mettler, Ph.D. thesis, faculty of sciences, university of Neuchatel, Switzerland (1994).
- [15] H. Oheda, *Solid State Comms.* **33** (1980)203-206.
- [16] R. Maudre, M. Maudre, S. Vignoli, P. Roca I Cabarrocas, Y. Bouizem and M. L. Theye, *Philos. Mag. B*, **67**(4) (1993)497-511.
- [17] K. Pierz, H. Mell and J. Terukov, *Journal of Non Crystalline Solids* **97-98** (1985) 547.