



République Algérienne Démocratique et Populaire

Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique

Université Larbi Tébessi Tébessa

Faculté des Sciences Exactes et des Sciences de la Nature et de la Vie

Département: Sciences De La Matière

Mémoire de master

Domaine: *Sciences De La Matière*

Filière: Physique

Option: physique de la matière condensée

Thème:

**Simulation de la mobilité des trous dans le
sélénium amorphe stabilisé**

Présenter par:

- HALAIMIA AMINA

- RAMOUCHE AMIRA

Devant le jury:

Rouag nouari	MCA	Université de tébessa	président
Serdouk fadila	MCB	Université de tébessa	Rapporteur
Chaouche yassine	MCB	Université de tébessa	Examineur

Date de soutenance : 15/09/2020

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

1438

المخلص

تهدف هذه الدراسة إلى تحديد الشكل الدقيق لتوزيع كثافة الحالات الواقعة في النصف السفلي من فجوة السيلينيوم غير المتبلور المستقر من خلال محاكاة تنقل الثقوب حسب درجة الحرارة والمجال. تم تحديد شكل كثافة الحالات بالاعتماد على التيارات الضوئية العابرة وذلك باستخدام معكوس لا بلاس من خلال طريقة بادي. سمح لنا نموذج الكثافة المقترح للسيلينيوم غير المتبلور المستقر بمحاكاة تيارات TOF للثقوب في هذه المادة بتركيزين مختلفين. تظهر نتائج المحاكاة أيضا أن إضافة كميات صغيرة من الزرنيخ لا يؤثر على حركة الثقوب. إن إضافة الزرنيخ يقلل معامل النقل يعني أن المعامل μ يتناقص مع إضافة الزرنيخ. الكلمات المفتاحية : السيلينيوم غير المتبلور المستقر التيارات الضوئية العابرة ,كثافة الحالات المتموضعة .

Résumé

Cette étude vise à déterminer la forme exacte de la distribution de la densité des états localisés dans la moitié inférieure du gap de sélénium amorphe par une simulation délocalisés dans la moitié inférieure du gap de sélénium amorphe par une simulation de la mobilité des trous en fonction de la température et du champ appliqué. L'image de la densité de états est construite, essentiellement, sur la base de la courants transitoires Et en utilisant l'inverse de Laplace par la méthode de padi.

Le modèle de densité proposé pour le sélénium amorphe stabilisé nous a permis de simuler les courants de TOF des trous dans ce matériau avec deux concentrations différentes.

Le dopage du sélénium avec des petites quantités d'arsenic n'affecte pas la Mobilité des trous . Cette étude montre que le dopage avec l'arsenic affecte la Gamme des trous, dans ce travail implique que Le produit $\mu\tau$ diminue avec L'ajout de l'arsenic.

Mots clés: Sélénium amorphe stable, Les photo courants transitoires et Densité D'état localisé.

Abstract

This study aims to determine the exact shape of the density distribution of states located in the lower half of the amorphous sélénium gap by a simulation of hole mobility as a function of temperature and field applied.

The image density of states I_s is constructed, essentially, on the basis of the transient currents And using Laplace inverse by the padi method.

The density model proposed for stabilized amorphous sélénium allowed us to simulate the TOF currents of holes in this material with two concentrations different doping sélénium with small amounts of arsenic does not affect the mobility of the holes. Decreases with the addition of arsenic τ .

This study shows that doping with arsenic affects the range of holes, this work implies that the product μ decrease with the addition of arsenic τ .

Keywords : stable amorphous sélénium, transient light currents and local State density.



إهداء

الحمد لله عزّ وجلّ على منه وعونه لإتمام هذا البحث
إلى الذي وهبني كل ما يملك حتى أحقق له آماله، إلى من كان يدفعني قدما نحو
الأمام لنيل المبتغى، إلى الإنسان الذي امتلك الإنسانية بكل قوة، إلى الذي سهر
على تعليمي بتضحيات جسام مترجمة في تقديسه للعلم، إلى مدرستي الأولى في
الحياة، أبي الغالي على قلبي أطل الله في عمره
إلى التي وهبت فلذة كبدها كل العطاء والحنان، إلى التي صبرت على كل
شيء، التي رعتني حق الرّعاية وكانت سندي في الشدائد، وكانت دعواها لي
بالتوفيق، تتبعنتي خطوة خطوة في عملي، إلى من ارتحت كلما تذكرت ابتسامتها
في وجهي نبع الحنان أمي أعز ملاك على القلب والعين جزاها الله عني خير
الجزاء في الدارين؛ إليهما أهدي هذا العمل المتواضع لكي أدخل على قلبهما
شيئا من السعادة إلى إخوتي وأخواتي الذين تقاسموا معي عبء الحياة؛
إلى كافة زميلات الدراسة اللواتي ربطتني بهم أجمل الأوقات
إلى أناس ادخلوا السرور إلى حياتي . إلى من لم يذكرهم قلبي وذكرهم قلبي.

Dédicace

Avec l'expression de ma reconnaissance, je dédie ce modeste travail a ceux qui, quels que soient les termes embrassés, je n'arriverais jamais à leur exprimer mon amour sincère.

A l'homme, mon précieux offre du dieu, qui doit ma vie, ma réussite et tout mon respect: mon chère père.

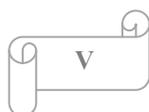
A la femme qui a souffert sans me laisser souffrir, qui n'a jamais dit non âmes exigences aucun effort pour me rendre heureuse: mon adorable mère.

A vous mes frère et sœurs qui m'avez toujours soutenu et encouragé durant ces années d'études.

A tous les cousins, les voisins et les amis que j'ai connu

Merci pour leurs amours et leurs encouragements.

Sans oublier mon binôme Amina pour son soutien moral, sa patience et sa compréhension tout au long de ce projet



REMERCIEMENTS

Après avoir rendu grâce à Dieu le tout puissant et le Miséricordieux
Nous tenons à remercier vivement tous qui de près ou de loin ont participé à
La Rédaction de ce travail.

Ce travail a été réalisé au sein du laboratoire de Physique Théorique et
Appliquée de l'université de Tébessa.

Je tiens à remercier également mon encadrant **Serdouk fadila** pour le temps
Qu'elle a consacré et pour Les précieuses informations qu'elle ma Prodiguées
Avec intérêt et compréhension, pour son suivi et pour son énorme soutien.
J'adresse aussi mes vifs remerciements aux membres des jurys pour avoir
Bien Voulu examiner et juger ce travail.

Nous exprimons notre profonde reconnaissance a tous les enseignants de
L'université de Tébessa et surtout nos enseignants de département de
Sciences de la Matière

Enfin, je remercie de tout mon cœur mes amis, mes frère et toute ma grande
Famille pour leur soutien inestimable et leurs sincères qui éclairent mon
Chemin.

Table des matières

Table des matières

المخلص	I
Résumé.....	II
Abstract	III
Dédicace	V
REMERCIEMENTS.....	VI
Liste des Figure	VII
Listedetableaux	X
Listedessymboles	X
Introductiongénérale.....	- 1 -

Chapitre I:

généralité sur la structure des matériaux (cristallin et amorphe) et leurs propriétés

I-1- Introduction:.....	- 3 -
I-2-Définition d'un matériau cristallin:.....	- 3 -
I-2-1- cristaux et types de liaisons:	- 3 -
I-3-La structure de bandes dans un solide:.....	- 5 -
I-4- Les matériaux amorphe:	- 7 -
I-4-1 Densité d'état:	- 8 -
I-4-2 Les modèles de bandes dans les semi-conducteurs amorphes:	- 10 -
I-5- transport électronique	- 12 -
I-5-1 Transport dans les matériaux cristallins	- 12 -
I-5-2-transport dans les matériaux amorphes	- 17 -
I-6- Conclusion:	- 19 -

Chapitre II:

L'évolution historique de la densité des états dans le sélénium amorphe et la méthode de simulation

II-1: Introduction:.....	- 20 -
II-2: Structure atomique du sélénium amorphe:.....	- 22 -
II-3-: Problèmes rencontrés:	- 25 -

Table des matières

II-4 - Historique de la densité des états dans le sélénium amorphe et la Méthode de simulation:.....	- 25 -
II-5-: Méthodes expérimentales.....	- 30 -
II-5-1: Photoconductivité transitoire (TPC):.....	- 31 -
II-5-2: photoconductivité transitoire du temps de vol (TOF)	- 32 -
II-6: Application de la méthode de la place à basse résolution (LT):	- 35 -
II-6-1: La méthode de la transformée de Laplace à haute résolution (HLT):.....	- 38 -
II-7: Conclusion:	- 39 -

ChapitreIII:

partie pratique

III-1 Introduction:	- 40 -
III-2 Calcul des photo courants transitoires dans le cadre de la technique de TOF:-	40 -
III-3 Simulation de la mobilité des trous:	- 43 -
III-4 L'étude théorique sur la dépendance en champ électrique et en température de la mobilité des trous par la technique du temps de vol (TOF) dans a-Se stabilisé: ...	- 44 -
III-5 Discussion des résultats:	- 48 -
III-6 Conclusion:	- 50 -
Conclusion général	- 50 -
Bibliographies	- 52 -

Liste des Figures

Liste des Figures

Figure	Titre	Page
Chapitre1		
Figure I-1	vue schématique de l'arrangement atomique dans la structure cristalline.	3
Figure I-2	représenter les type de liaison (ionique, covalente, métallique).	5
Figure I-3	Vue schématique de l'arrangement atomique dans la structure amorphe	5
Figure I-4	représentation schématique des bandes d'énergie d'un solide	6
Figure I-5	Diagramme de bandes d'énergie d'un conducteur, d'un isolant et d'un semi-conducteur.	7
Figure I-6	Diagramme de bande d'énergie dans un semi -conducteur	9
Figure I-7	les modèles de densité d'états dans les amorphes proposés respectivement par Mott (a)CFO(b), Mar shall et Owen(c). Les zones hachurées représentent les états localisés.	12
Figure I-8	Schématisation du mécanisme de conduction par piégeage multiple	19
Chapitre2		
Figure II-1	La structure hexagonale du sélénium cristallin	22
Figure II-2	Le modèle de chaîne aléatoire de la structure du sélénium amorphe	23
Figure II-3	La photoconductivité transitoire standard (TPC)	32
Figure II-4	les éléments essentiels d'un circuit du temps de vol (TOF)	33
Chapitre3		
Figure III-1	Courant simulé de TOF des trous dans (a-Se) stabilisé à différentes température pour un champ $F=10^4\text{V/cm}$	41
Figure III-2	Courant simulé de TOF des trous dans (a- Se) stabilisé à différentes température pour un champ $F=3\times 10^4\text{V/cm}$	41
Figure III-3	Courant simulé de TOF des trous dans (a- Se) stabilisé à différentes température pour un champ $F=6\times 10^4\text{V/cm}$	42
Figure III-4	Courant simulé de TOF des trous dans (a- Se) stabilisé à différentes température pour un champ $F=10\times 10^4\text{V/cm}$	42
Figure III-5	Courant simulé de TOF des trous dans (a- Se) stabilisé à différentes température pour un champ $F=16\times 10^4\text{V/cm}$	43
Figure III-6	Mobilité des trous en fonction de T^{-1} dans a-Se stabilisé pour un champ $F=3\times 10^4\text{V/cm}$	45
Figure III-7	Mobilité des trous en fonction de T^{-1} dans a-Se stabilisé pour un champ $F=3\times 10^4\text{V/cm}$	45
Figure III-8	Mobilité des trous en fonction de T^{-1} dans a-Se stabilisé pour un champ $F=6\times 10^4\text{V/cm}$	46
Figure III-9	Mobilité des trous en fonction de T^{-1} dans a-Se stabilisé pour un champ $F=10^4\text{V/cm}$	46

Liste des Figures

Figure III-10	Mobilité des trous en fonction de T^{-1} dans a-Se stabilisé pour un champ $F=16 \times 10^4 \text{V/cm}$	47
Figure III-11	Ajustement d'Arrhenius de l'énergie d'activation en fonction du champ	48

Liste de tableaux

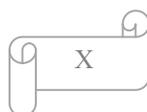
Liste de tableaux

Tableau I .1	Comparaison entre solide cristalline et solide amorphe	8
Tableau I.2	Comparaison entre le courant de dérivé et le courant de défissions	16
Tableau III.1	Paramètres fixes et variables de la simulation.	40
Tableau III.2	la mobilité des trous dans a- Se stabilisé.	44
Tableau III.3	L'énergie d'activation de la mobilité des trous dans a- Se stabilisé.	47

Liste des symboles

- \mathbf{R} : vecteur de translation.
- $g(E)$: Densité des états localisés.
- E_C : La bande de conduction.
- E_V : La bande de valence.
- E_I : la bande interdite.
- $\Psi(\vec{r})$: La fonction d'onde de Bloch.
- $u_k(\vec{r})$: Le potentiel périodique du réseau cristallin.
- CFO: Le modèle de densité des états localisés proposé par Cohen, Fritzsche et Ovshinski.
- AS: Arsenic.
- (Se-a): Sélénium amorphe
- TPC: Photoconductivité transitoire.
- TOF: temps de vol (Time-of-flight)
- LT: La transformée de Laplace de la photoconductivité transitoire
- HLT: La transformée de Laplace de la photoconductivité transitoire à haute résolution
- E_F : Niveau de Fermi.
- m : la masse
- m_e : la masse électronique

- E : Intensité appliquée Champ électrique.
- n : Nombre d'électrons libres.
- P : Nombre de trous.
- J_{ndiff} : Le courant de diffusion pour les électrons.
- J_{pdiff} : Le courant de diffusion pour les trous.



Liste des symboles

- J_{dn} : L La densité de courant de dérive pour les trous.
- J_{dp} : la densité de courant de dérive pour les électrons.
- J_d : La densité totale de courant de dérive.
- Δ_n : L'excès des électrons libres créés sous éclairnement.
- Δ_p : L'excès des trous libres créés sous éclairnement.
- q : Charge électronique.
- q : Charge électronique.
- D_n : *Coefficient de diffusion des électrons*
- D_p : Coefficient de diffusion des trous
- τ_n : La durée de vie des électrons.
- τ_p : La durée de vie des trous.
- μ_n : La mobilité des électrons dans le milieu.
- μ_p : La mobilité des trous dans le milieu.
- T_r : le temps de réémission.
- V_i : la fréquence de tentative d'échappement.
- St l'énergie du piège.
- I : courant.
- a : Paramètre de dispersion.
- $G(x)$: Le taux de génération des charges.
- $f(\bar{x}, t)$: Le flux des charges mobiles.
- $g_v(\bar{x}, t)$: Le taux de génération lumineux.
- $n(\bar{x}, t)$: La concentration des porteurs libre.
- $n_i(\bar{x}, t)$: La concentration des porteurs localisés.
- $\rho(\bar{x}, t)$: *La concentration totale des charges.*
- P : Densité des trous libres.
- P_i : Densité des trous piégés.
- F : Le champ électrique.

Liste des symboles

- F_p : Le flux des trous.
- D : coefficient de diffusion d'Einstein.
- μ_0 : Le champ électrique appliqué.
- e : La charge élémentaire.
- ν : Fréquence de tentative d'échappement.
- δ : Fonction de Dirac.
- t : Temps de mesure.
- τ : Durée de vie.
- S : La variable de Laplace.
- N_i : La concentration du piège i par unité de volume.
- N_0 : Densité des porteurs libres injectés.
- V_{th} : Vitesse thermique.
- σ_e : Section efficace de capture.
- W_i : Probabilité de capture.
- γ_i : Probabilité de réémission.
- T : Température absolue.
- K_β : Constante de Boltzmann.
- \bar{v} : La vitesse moyenne d'un porteur mobile.
 - W_i : Probabilité de capture.
- γ_i : Probabilité de réémission.
 - T : Température absolue.
- K_β : Constante de Boltzmann.
- \bar{v} : La vitesse moyenne d'un porteur mobile.

Introduction générale

Introduction générale

Le transport des trous dans le sélénium amorphe a fait l'objet de plusieurs études. A température ambiante, toutes les mesures indiquent que le transport des trous est non dispersif. Pfister [1] a pu montrer qu'à basse température, le transport des trous devient dispersif. Ses expériences indiquent une transition du transport non dispersif conventionnel au transport dispersif sans changement dans l'énergie d'activation à des températures suffisamment basses.

Les caractéristiques du transport dispersif démontrées sont la dépendance de la mobilité de charges du champ appliqué et l'épaisseur de l'échantillon. D'autres travaux [2], montrent que le transport des électrons dans le sélénium amorphe est de nature dispersif des électrons dont la mobilité électronique dépend de l'épaisseur de l'échantillon. Cette dépendance devient insignifiante dans les échantillons épais ($\geq 100\mu\text{m}$). Plus récemment des travaux ont étudié le transport des trous en adoptant la même approche. Cette fois-ci l'étude avait comme objectif la validation du modèle monotone de la distribution de la densité des états localisés dans la moitié inférieur du gap.

Historiquement la distribution de la densité des états localisés reste un sujet de controverse... Il existe au moins deux modèles de la densité d'états pour le sélénium amorphe. Les deux ayant des caractéristiques très différentes. Ces distributions ont été dérivées principalement de transport de charge et des expériences de piégeage et de la photoconductivité transitoire et du temps de vol (TOF). Un modèle de simulation par la méthode Monte Carlo de l'expérience de (TOF) a été largement utilisé ces dernières années dans la simulation des photos courant transitoires de l'expérience de (TOF) [3]. La densité de la distribution des états est optimisée quand un accord raisonnable entre les formes expérimentales et calculées du courant est obtenu. La partie supérieure de la densité des états localisés contient des distributions gaussiennes superposées à la distribution exponentielle. Cette distribution était en bon accord avec les mesures de la expérimentales présentées dans les travaux [4]. Concernant la partie inférieur du gap de la distribution de la densité des états localisés ; le même group a dégagé une distribution monotone avec des études sur le transport des trous démontrant la diminution de la durée de vie des trous à cause du dopage avec l'arsenic [5]. Cette diminution a été attribuée à un nouveau piège avec une absence sur la forme exacte de la distribution de la densité dans le sélénium stabilisé.

Introduction générale

En 2015 un travail publié a fait l'objet de l'étude de la distribution de la densité des états localisés dans (a- Se) pur et dopé avec l'arsenic [6] basé sur les mesures de la photoconductivité transitoire [7]. Le travail démontre une distribution non monotone du côté de la bande de valence appuyé par la simulation de photos courantes transitoires élaborées par un programme de l'inverse de Laplace. Les courants simulés pour une distribution exponentielle superposé d'une gaussienne concordent avec les courants mesurés. L'apparition de ce modèle a poussé le groupe de Khoughia de réexaminé leurs distribution en signalant que la présence des pics dans l'étude de la publication [6] est dû à la diffusion connu dans l'expérience de la photoconductivité transitoire [7-8]. La réponse de défense du modèle non monotone a été une autre fois suivie par une étude de simulation de la durée de vie des trous dans le sélénium stabilisé. Les résultats montrent que ce paramètre diminue avec le dopage en parfait accord avec la littérature [9]. Les valeurs simulées et l'énergie d'activation de la durée de vie sont du même ordre de grandeurs que les valeurs expérimentales [10]. La conclusion tirée de ce travail était la validation du non monotone.

Dans le même contexte cette fois ci nous proposons dans ce travail de calculer la mobilité des trous en se basant cette fois ci sur la simulation des photos courant transitoires du temps de vol. Ce travail est composé de trois chapitres, suite à une introduction, ce manuscrit s'organise en trois autres parties:

Le premier fournit le contexte théorique de la structure atomique et la structure de bandes indispensable pour une bonne compréhension des matériaux amorphes. Une étude bibliographique et historique des mécanismes de conduction dans les amorphes. Le deuxième chapitre fait l'objet du modèle de la technique de la photoconductivité transitoire qui est développé pour la détermination de la distribution de la densité des états dans les amorphes. Les principes théoriques de la technique de la photoconductivité transitoire sont présentés, et une expression reliant la densité d'états aux quantités mesurables est dérivée.

Dans le troisième chapitre, la simulation de la photoconductivité transitoire de vol par la technique de l'inverse de Laplace est développée pour étudier le Transport des trous dans le sélénium amorphe stabilisé. Finalement, une conclusion qui résume l'ensemble des résultats trouvés dans le cadre de ce travail.

Chapitre I:
Généralité sur la structure des
matériaux (cristallin et amorphe) et
leurs propriétés

Chapitre I : généralité sur la structure des matériaux (Cristallin et amorphe) et leurs propriétés

I-1- Introduction:

Dans ce chapitre, nous nous donnerons des rappels bibliographiques sur la physique des matériaux amorphes. Il comporte également, une présentation de la structure des bandes de ces matériaux afin de mieux comprendre l'origine des états localisés dans la bande interdite. Nous nous intéresserons plus en détail aux semi-conducteurs cristallins et amorphes et ferons une différence entre les structures atomiques de ces matériaux ensuite nous donnerons les différents modèles de transport dans les semi-conducteurs amorphes.

I-2-Définition d'un matériau cristallin:

Les matériaux cristallins sont des matériaux solides caractérisés par un ensemble d'atomes arrangés périodiquement suivant les 3 directions de l'espace et des liaisons d'une longueur et d'un angle non variables. La structure globale du cristal se déduit donc de ce motif par des translations selon des axes privilégiés du cristal. Ainsi, chaque point du réseau peut se reconstruire par translation de vecteur \vec{R} , à partir de trois vecteurs unitaires \vec{a}_i correspondant aux trois axes du cristal et de trois entiers n_i :

$$\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3 \quad (n_1, n_2, n_3) \in \mathbb{Z}$$

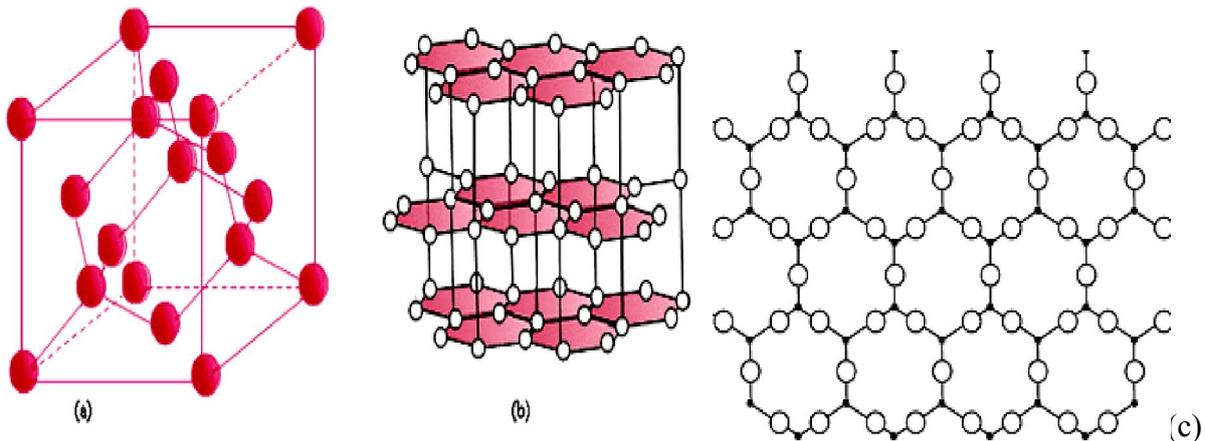


Figure 1.1 : quelques exemples de structure cristalline Diamant (a) Graphite (b) Silice cristalline (c)

I-2-1- cristaux et types de liaisons:

Les cristaux sont classés selon la nature des liaisons établies entre les différents atomes ou molécules. Ils existent quatre types de liaisons:

Chapitre I : généralité sur la structure des matériaux (Cristallin et amorphe) et leurs propriétés

a) Les liaisons de Van der Waals: doivent leur nom au physicien théoricien néerlandais Johannes Diederik Van der Waals (1837-1923). Il s'agit d'une liaison de type intermoléculaire qui s'exerce entre les molécules d'une substance (contrairement aux liaisons de covalence qui sont des liaisons intramoléculaires car elles s'établissent entre les atomes d'une même molécule). Cette liaison est plus précisément une interaction électrique de faible intensité qui s'exerce entre les molécules présentant un moment dipolaire. Par définition ces molécules sont globalement neutres mais présentent un pôle positif (centre des charges partielles positives localisées sur les atomes les moins électronégatifs) et un pôle négatif (centre des charges partielles négatives). Il s'exerce une force électrique globalement attractive entre les pôles de signes opposés des différentes molécules.

b) liaison covalente: Mise en commun d'un doublet d'électrons entre deux atomes d'électronégativités comparables et éloignés des gaz rares (Si, Ge, C, Fe...). Elle résulte de la formation d'orbitales communes, la densité électronique ne s'annulant pas entre les deux atomes. Dans certains cas (carbone, Si...) on assiste à la promotion d'un ou plusieurs électrons à des niveaux d'énergie supérieurs et à l'hybridation des orbitales correspondantes. L'hybridation sp^3 conduit à des liaisons selon un tétraèdre régulier (liaisons simples C-C),

L'hybridation sp^2 à des liaisons selon un triangle équilatéral (liaisons doubles C=C), l'hybridation sp à des liaisons alignées (liaisons triples C≡C). On retrouve ces différents cas dans le squelette carboné des matériaux organiques (polymères, élastomères). Les liaisons covalentes sont donc dirigées, ce qui induit de fortes contraintes géométriques sur les empilements atomiques. [11]

d) liaison ionique: dans une à deux atomes molécule différents, il y a possibilité de polarisation électrique de la liaison dans le cas où un des deux atomes attire plus que l'autre

Les électrons mis en jeu. On classe ainsi les éléments en fonction de leur électronégativité (pouvoir d'attirer les électrons de valence). Si un des deux atomes est très électronégatif et donc que la liaison (de type covalent IIB ET VIB) est très polarisée, on tend vers une liaison de type ionique. Ce type de liaison s'établit généralement entre un atome ayant beaucoup d'électrons de valence et un atome ayant peu d'électrons de valence

Chapitre I : généralité sur la structure des matériaux (Cristallin et amorphe) et leurs propriétés

e) **liaison métallique**: ce liaison caractérise les métaux, elle est formée par des éléments électropositifs ayant un seul électron périphérique. Dans ce type de métaux conducteur, l'électron périphérique, électron libre, est responsable de la conduction électrique. [12]

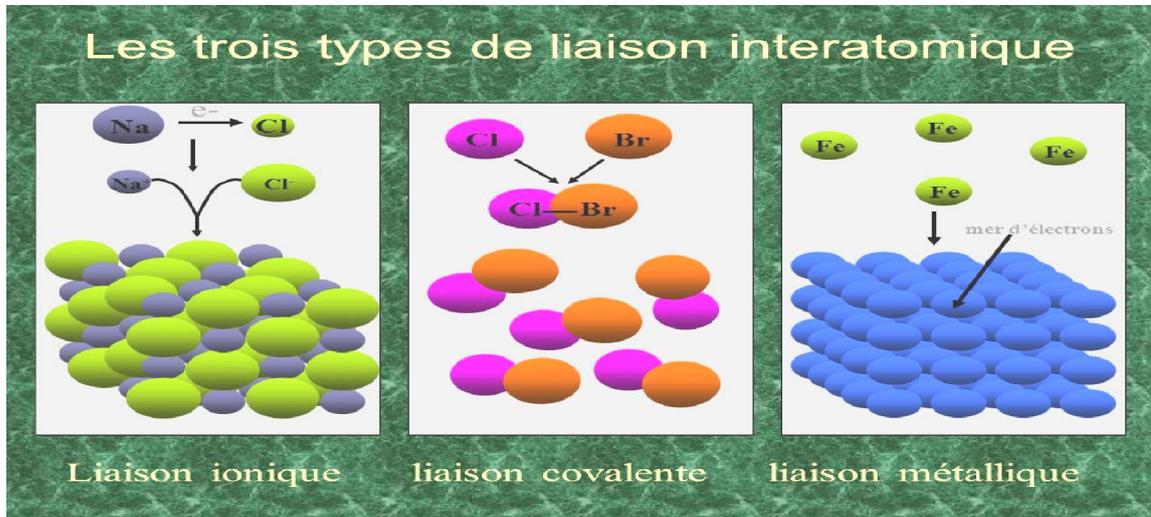


Figure I.2: représentation du type de liaison (ionique, covalente, métallique)

I-3-La structure de bandes dans un solide:

En physique de l'état solide, la théorie des bandes est une modélisation des valeurs d'énergie que peuvent prendre les électrons d'un solide à l'intérieur de celui-ci. De façon générale, ces électrons n'ont la possibilité de prendre que des valeurs d'énergie comprises dans certains intervalles, lesquels sont séparés par des bandes d'énergie interdites (ou bandes interdites). Cette modélisation conduit à parler de bandes d'énergie ou de structure de bandes.

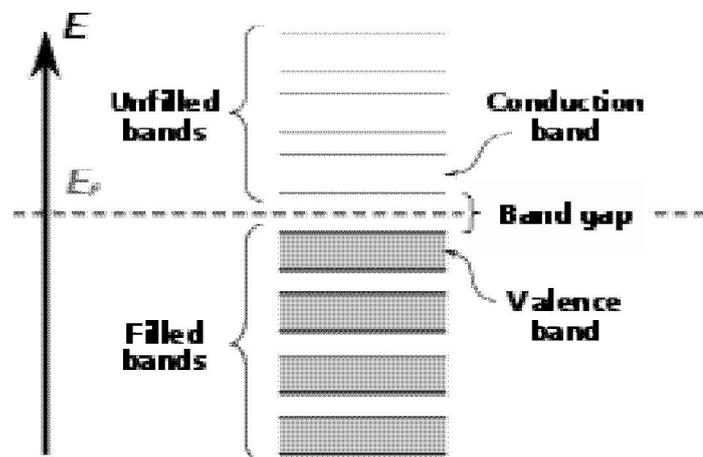


Figure I. 3: représentation schématique des bandes d'énergie d'un solide.

Chapitre I : généralité sur la structure des matériaux (Cristallin et amorphe) et leurs propriétés

Bandes des conducteurs, isolants et semi-conducteurs.

Selon la façon dont ces bandes sont réparties, il est possible d'expliquer au moins schématiquement les différences de comportement électrique entre un isolant, un semi-conducteur et un conducteur.

Dans un conducteur métallique, la bande de valence est totalement remplie et la bande de conduction est partiellement remplie. Les électrons de la bande de conduction sont libres de se «déplacer» au sein de cette bande, expliquant la conductivité élevée des métaux.

La conductivité d'un métal est maximale à 0K, puis diminue quand la température augmente: c'est une propriété propre aux métaux. Cela provient d'une augmentation de l'interaction des électrons avec le réseau (les atomes du métal) lorsque la température augmente. [13]

Dans un isolant, la bande de valence (qui est pleine) et de conduction (qui est vide) ne se recouvrent pas: ces deux bandes sont séparées par une bande interdite dont la largeur est supérieure à quelques eV. A température ambiante, $kT \sim 0,025$ eV: il n'y a pas suffisamment d'énergie pour faire passer les électrons de la bande de valence à la bande de conduction, le solide est isolant. Dans un semi-conducteur la bande de conduction est vide mais le gap est plus faible (de l'ordre de 1 à 2 eV). Le solide est donc isolant à température nulle, mais une élévation de température permet de faire passer des électrons de la bande de valence à la bande de conduction. La conductivité augmente avec la température.

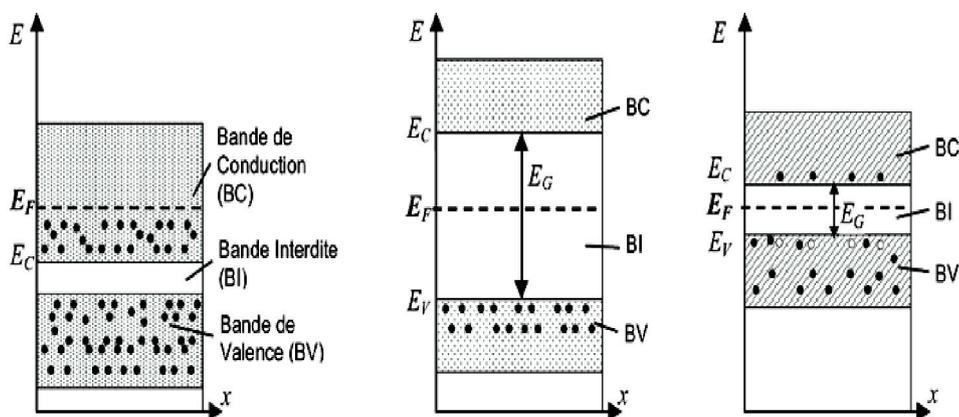


Figure I.4: Diagramme de bandes d'énergie d'un conducteur, d'un isolant et d'un semi-conducteur.

Chapitre I : généralité sur la structure des matériaux (Cristallin et amorphe) et leurs propriétés

I 4- Les matériaux amorphes:

Solide ne présentant aucune structure atomique ordonnée à moyenne et longue distance, les atomes y sont aléatoirement distribués comme dans un liquide. A l'inverse, les matériaux cristallins sont organisés selon un arrangement atomique répété périodiquement dans l'espace. Les molécules d'un matériau amorphe occupent cependant une position fixe, car elles sont bloquées dans une configuration. A l'inverse, les molécules d'un liquide vibrent autour d'un point.

On définit un matériau amorphe par la variation légère dans la longueur de liaison et l'angle de liaison entre les atomes du réseau, avec des atomes disposés de façon non périodiques et l'ordre atomique à grande distance a disparu. Toutes ces variations sont suffisantes pour détruire le périodique du réseau. La Figure I.5 représente la structure de ces matériaux [14].

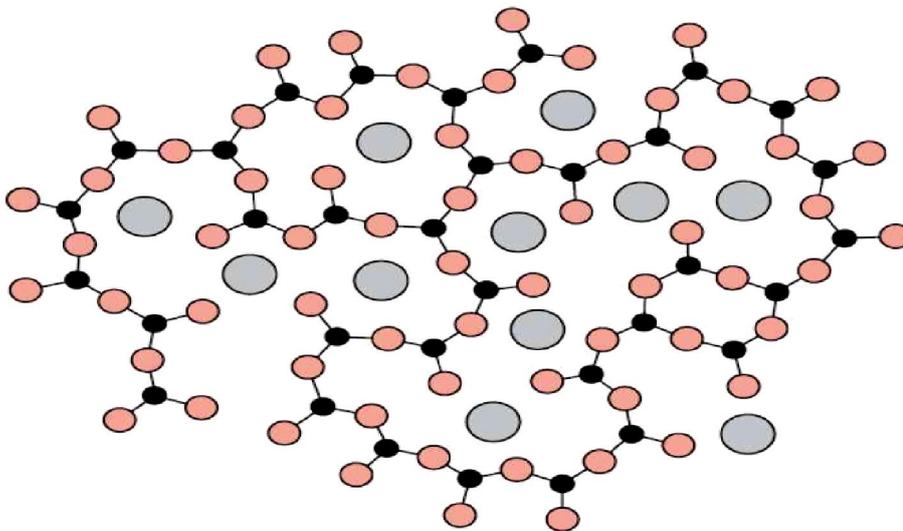


Figure I.5: vues schématique de l'arrangement atomique dans la structure amorphe

➤ Solide cristallisés ou amorphe:

L'état solide est le plus ordonné des états de la matière, mais il existe deux types de solide dont les degrés d'organisation sont différents.

Chapitre I : généralité sur la structure des matériaux (Cristallin et amorphe) et leurs propriétés

Solides cristallins	Solides amorphes
<p>Constituants disposés dans l'espace à des positions se répétant de façon parfaitement régulière. La répétition périodique engendre un réseau cristallin. La périodicité est la caractéristique qui permet de modéliser l'étude des cristaux et de comprendre les propriétés de matériaux très complexes La répétition des constituants n'est pas forcément la même dans toutes les directions. Des grandeurs physiques peuvent ainsi avoir des valeurs différentes pour différentes directions. De tels cristaux sont dits anisotropes</p>	<p>Motifs disposés d'une façon aléatoire les uns par rapport aux autres. La périodicité rigoureuse n'existe plus. Exemple: les verres,... Les concepts développés pour l'étude des cristaux restent très utiles pour expliquer les propriétés de la matière amorphe Pour ces solides, la transition vers l'état liquide se fait par diminution progressive de la viscosité, non par une fusion nette à une température déterminée. Les amorphes sont en général isotropes</p>

Tableau I .1 : Comparaison entre solide cristalline et solide amorphe

I-4-1Densité d'état:

En physique du solide et physique de la matière condensée, la densité d'états électroniques, quantifie le nombre d'états électroniques susceptibles d'être occupés, et possédant une énergie donnée dans le matériau considéré. Elle est généralement notée par l'une des lettres g , ρ , D , n ou N . Plus précisément, on définit la densité d'états $N(E)$ par le fait que $N(E) dE$ est le nombre d'états électroniques disponibles, avec une énergie comprise entre E et $E+dE$, par unité de volume du solide ou par maille élémentaire du cristal étudié.

Dans un semi-conducteur, la densité d'états électroniques présente une discontinuité qui marque la séparation entre la bande de valence et la bande de conduction. Il n'y a donc aucun état disponible dans ce gap. Une augmentation d'énergie pour un électron dans la bande de conduction conduit à une augmentation des états disponibles, mais pour accéder à la bande de valence celui-ci doit perdre au moins l'énergie de gap du matériau.

La densité d'états électroniques peut tout aussi bien être exprimée en fonction de l'énergie que du vecteur d'onde k Pour effectuer la conversion de l'une à l'autre il est nécessaire de connaître la relation de dispersion (E,K) du système dans le cas du cristal, la densité d'états se caractérise par l'existence d'une bande de valence entièrement occupée et d'une bande de

Chapitre I : généralité sur la structure des matériaux (Cristallin et amorphe) et leurs propriétés

conduction vide, séparées par un gap qui contient le niveau de fermi (Figure I.6.a)

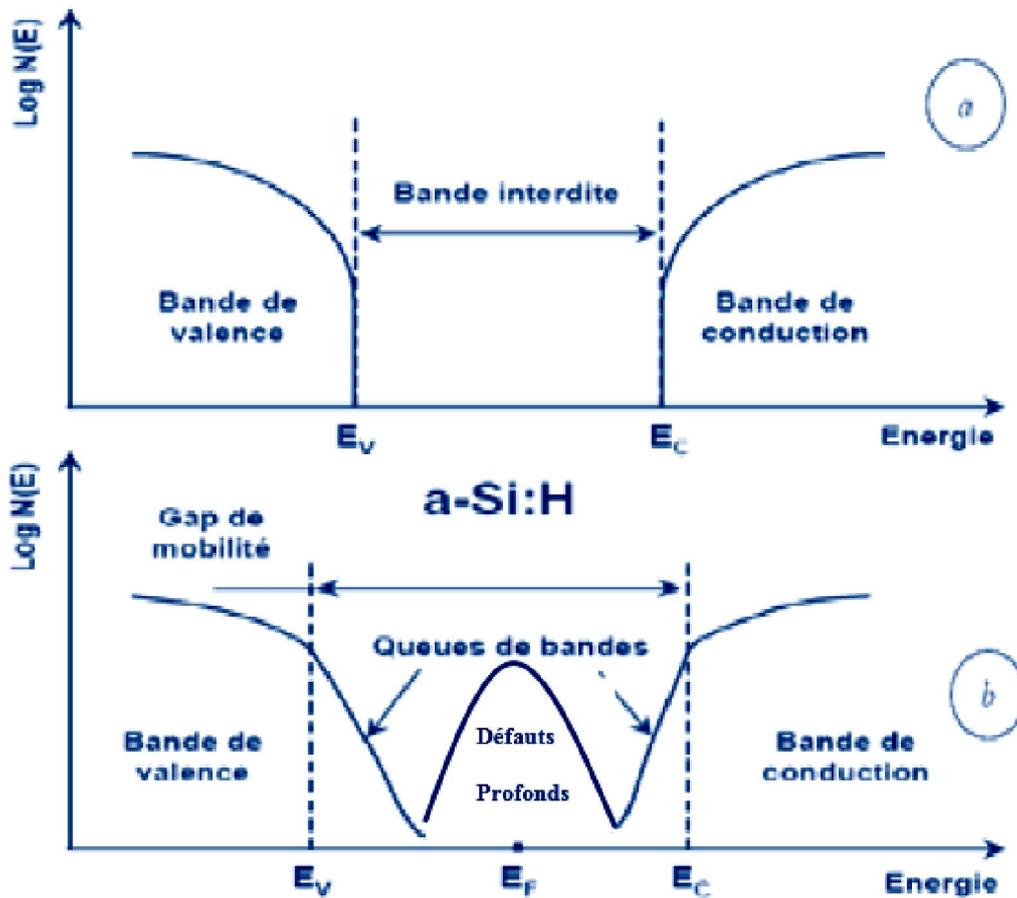


Figure I.6: Densité d'états en fonction de l'énergie: a) semi-conducteur cristallin b) semi-conducteur amorphe. [15]

Comme nous le verrons plus loin, la densité d'états par unité de volume et d'énergie est un autre concept important pour la caractérisation des propriétés optiques des S-C. Nous la calculons ici pour le cas simple d'un cristal de maille cubique. Comme pour le calcul du niveau de Fermi, le calcul de la densité d'états est basé sur le compte aisé du nombre d'états dans l'espace réciproque. Comme on veut connaître le nombre d'électrons par unité d'énergie on calcule d'abord le nombre d'électrons dans l'espace réciproque k et l'on applique ensuite la relation de dispersion parabolique. Ci-dessous, dN_e est le nombre d'électrons contenus dans la couche sphérique de rayon k et d'épaisseur dk correspondant à une énergie donnée E et un intervalle d'énergie dE . En appliquant le calcul au cas d'un volume unitaire ($L=1$) dN_e devient l'accroissement de densité électronique par unité de volume dN_e . Le calcul de la densité d'états

Chapitre I : généralité sur la structure des matériaux (Cristallin et amorphe) et leurs propriétés

$\rho = dn_e/dE$ est donc très simple. [16]

$$\rho = \frac{dn_e}{dE} \quad (I.1)$$

$$dN_e = 2 \cdot \frac{4\pi k^2 dk}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} = \frac{k^2}{\pi^2} dk \quad (I.2)$$

$$L = 1 \rightarrow dN_e \rightarrow dn_e \quad (I.3)$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} = dE = \frac{\hbar^2}{2m_e} 2k dk \rightarrow dk = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2m_e}{\hbar^2 E}} dE \quad (I.4)$$

$$\frac{dn_e}{dE} = \rho = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{E} \quad (I.5)$$

I-4-2 Les modèles de bandes dans les semi-conducteurs amorphes:

L'étude des matériaux amorphes n'a pas éprouvé un développement si rapide. L'ordre à courte portée des semi-conducteurs amorphes a eu comme conséquence des complexités mathématiques et par conséquent a retardé le processus d'arrangement de la théorie de tels matériaux. Pendant une longue période, les matériaux amorphes n'ont pas été considérés comme se comporter comme semi-conducteurs. [17]

Les modèles de bandes sont utilisés généralement pour expliquer les propriétés Électroniques et optiques des semi-conducteurs. Dans le cadre de cette théorie, ces états de

Chapitre I : généralité sur la structure des matériaux (Cristallin et amorphe) et leurs propriétés

Bande forment la densité d'états, $g(E)$, qui est souvent utilisée pour expliquer les propriétés D'un matériau. Elle définit le nombre d'états par unité d'énergie par volume unitaire.

Anderson aborde pour la première fois le concept de localisation en 1958 .il considère dans son modèle un réseau périodique de puits de potentiel de profondeur aléatoire .En se basant sur la première idée d'Anderson [18] cette dernier a utilisé les notions d'états localisés et étendus afin de rendre compte des propriétés électronique des semi-conducteurs désordonnés La Figure 1.7 résume les modèles proposés et indique les principales différences distinguant la densité d'états du solide amorphe.

Dans un semi-conducteur amorphe. Le désordre du réseau introduit des queues de bande qui commencent au niveau des bords des bandes de valence et de conduction et s'éloignent dans la bande interdite. Mott [19] propose que la transition des états de queues localisés aux états de bandes étendues est bien définie, correspondant à un changement abrupt dans la mobilité des électrons. Les électrons dans les états étendus se déplacent avec une mobilité finie déterminée par la masse effective de l'électron dans le solide. D'autre part, les électrons dans les états localisés de la queue, se déplacent avec une mobilité contrôlée par effet tunnel. La mobilité dans les états localisés disparaît quand la température approche du zéro absolu [20] Figure I.7. (a).

Le modèle suivant schématisé sur la Figure 1.7(b) ,est proposé par cohen,fritzsche et Ovshinsky proposé que le désordre topologique et compositionnel présenterait plus de désordre dans les semi-conducteurs amorphe qu'a été à l'origine prévu [21]. Leur modèle de bande, référé comme le modèle CFO ce modèle est caractérisé par la formation des états de queue localisés qui se propagent profondément dans le gap de mobilité du semi-conducteur et le chevauchement dans la région du niveau de fermi.

le dernier modèle est proposé par Marshal et Owen ont donné une autre forme pour la densité des états localisés, représentée sur la Figure .1.7 (c). Le désordre intrinsèque de la structure amorphe présente une Densité suffisamment grande des états dans le gap, Cependant les défauts dans le réseau causent une densité significative au centre du gap [22] dans ce modèle la position du niveaux de fermi est déterminée par des bandes de donneur-accepteur qui apparaissent du gap de mobilité respectivement.

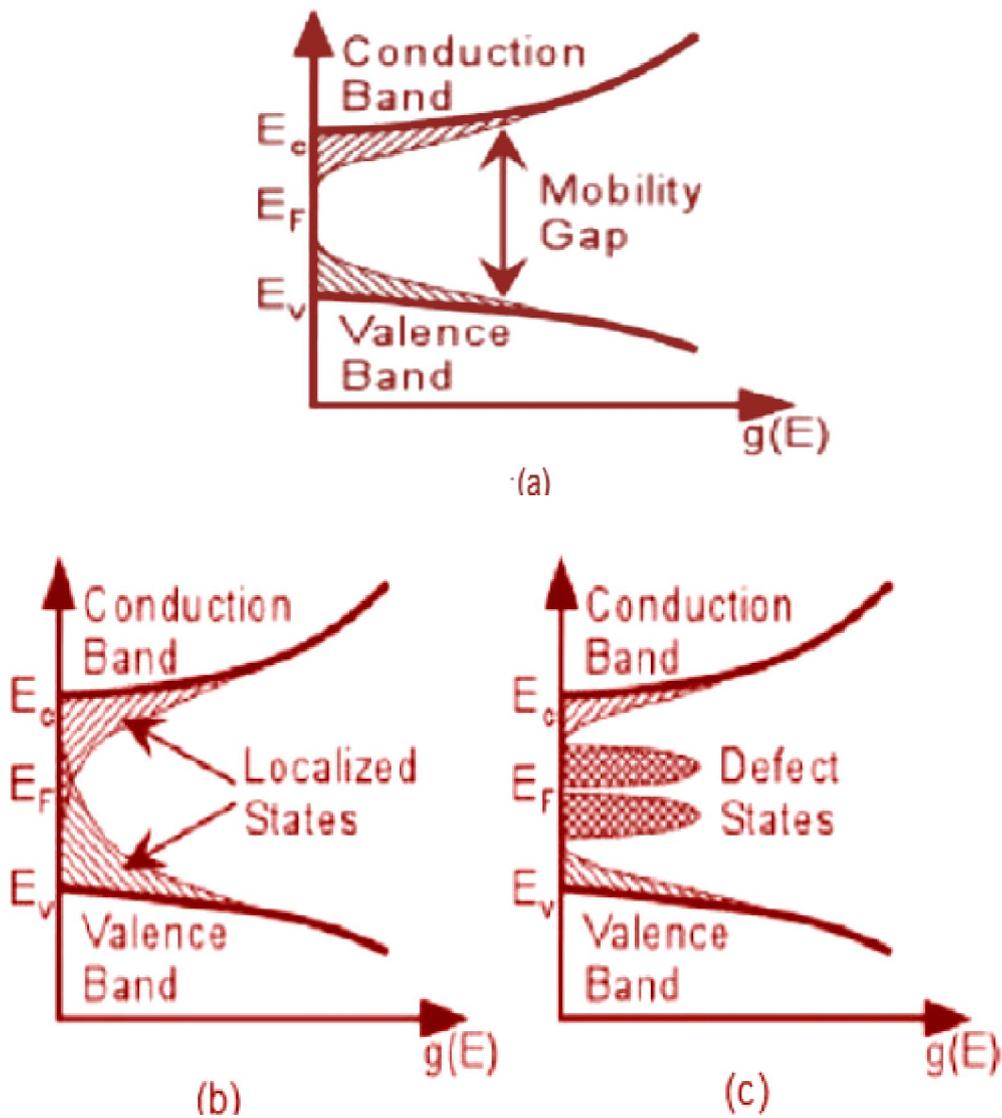


Figure I.7: les modèles de densité d'états dans les amorphes proposés respectivement par Mott(a)CFO(b), Marshall et Owen(c). Les zones hachurées représentent les états localisés.

I-5- transport électronique

I-5-1 Transport dans les matériaux cristallins

Le transport peut être écrit de plusieurs manières. Le plus communément utilisé, dans ces matériaux, est de considérer un transport du type dérive-diffusion. Dans cette approche, les charges se déplacent sous l'action du champ électrique et de la diffusion.

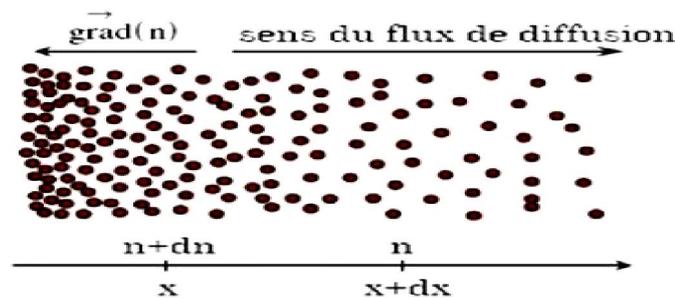
Chapitre I : généralité sur la structure des matériaux (Cristallin et amorphe) et leurs propriétés

❖ Diffusion des porteurs

L'apparition d'un gradient de porteurs dans un matériau (dans le cas d'un semi-conducteur non homogène ou lors d'une excitation locale...) engendre un flux de ces porteurs dans le sens inverse du gradient.

Soit un barreau de silicium de type p dont on considère un élément de volume.

La force totale qui s'exerce sur cet élément s'écrit (Force = surface × pression) [23]



$$F = [P(x) - p(x + dx)]S = -S \frac{dp}{dx} dx \quad (I.6)$$

La pression des trous est donnée par:

$$p(x) = kT p(x) \quad (I.7)$$

La force qui s'exerce devient:

$$F = -SkT \frac{dp(x)}{dx} dx \quad (I.8)$$

❖ Courant de diffusion:

Expression de la force en fonction de l'accélération:

$$F = p(x)Sdx \quad m_p \gamma = -SKT \frac{dp(x)}{dx} dx \quad (I.9)$$

Chapitre I : généralité sur la structure des matériaux (Cristallin et amorphe) et leurs propriétés

Soit:

$$\gamma = -\frac{kT}{m_p} \frac{1}{P(x)} \frac{dp(x)}{dx} = \frac{dv_p}{dt} \quad (\text{I.10})$$

La vitesse d'un trou entre deux chocs (t_c) est:

$$\langle v_p \rangle = -\frac{kT}{m_p} \frac{1}{p(x)} \frac{dp(x)}{dx} \frac{t_c}{2} = -\frac{kT}{q} \mu_p \frac{1}{p(x)} \frac{dp(x)}{dx} = -D_p \frac{1}{p(x)} \frac{dp(x)}{dx}$$

D_p Correspond au coefficient de diffusion des trous.

La densité de courant de diffusion s'écrit alors:

$$\vec{j}_n = -qn(x)\vec{v}_n = qD_n \overline{\text{grad}(n)} \quad (\text{I.11})$$

$$\vec{j}_p = qp(x)\vec{v}_p = -qD_p \overline{\text{grad}(p)} \quad (\text{I.12})$$

❖ Courant de dérive

Dans la physique de la matière condensée et électrochimie, dérive de courant est le courant électrique, ou le déplacement des porteurs de charge, ce qui est dû à l'application de champ électrique, souvent affirmé que la force électromotrice sur une distance donnée. Lorsqu'un champ électrique est appliqué à travers un matériau semi - conducteur, un courant est produit en raison de l'écoulement des porteurs de charge.

La vitesse de dérive est la vitesse moyenne des porteurs de charge dans le courant de dérive. La vitesse de dérive, et le courant résultant, est caractérisé par la mobilité Voir équation dérive-diffusion pour la façon dont le courant de dérive, en cours de diffusion, et la génération de porteurs et de recombinaison sont combinés en une seule équation.

Lorsqu'un champ électrique est appliqué à travers le matériau semi-conducteur, les porteurs de charge atteignent une certaine vitesse de dérive. Cet effet combiné du mouvement des

Chapitre I : généralité sur la structure des matériaux (Cristallin et amorphe) et leurs propriétés

porteurs de charge constitue un courant appelé « dérive de courant ». Dérivée la densité de courant due aux porteurs de charge tels que des électrons libres et des trous est le courant passant à travers une zone d'un centimètre carré perpendiculaire à la direction d'écoulement.

(i) dérivée densité de courant J_n , en raison d'électrons libres est donnée par:

$$\vec{j}_n = qn\mu_n\vec{E} \quad (I.14)$$

(ii) dérivée densité de courant J_p , en raison de trous est donné par:

$$\vec{J}_p = qp\mu_p\vec{E} \quad (I.15)$$

La densité totale de courant de dérive

$$\vec{j}_t = \vec{j}_n + \vec{J}_p = (qn\mu_n + qp\mu_p)\vec{E} \quad (I.16)$$

Où: n - Nombre d'électrons libres par centimètre cube.

p - Nombre de trous par centimètre cube

μ_n - La mobilité des électrons dans

μ_p - La mobilité des trous

\vec{E} - Intensité appliquée Champ électrique en V / cm

q - charge d'un électron = $1,6 \times 10^{-19}$ coulombs.

➤ La comparaison entre la courante de dérive et de diffusion

Chapitre I : généralité sur la structure des matériaux (Cristallin et amorphe) et leurs propriétés

courant de dérive	Courant de diffusion
courant de dérive est causée par des champs électriques	courant de diffusion est provoquée par une variation de la concentration de porteurs
Sens du courant de dérive est toujours dans la direction du champ électrique.	La direction du courant de diffusion dépend de la <u>pente</u> de la concentration de porteurs.
Obéit <u>la loi d'Ohm</u> : $\vec{j} = q\mu E$	Obéit <u>loi de Fick</u> : $\vec{J} = -qD \frac{dp}{dx}$

Tableau I.2 : Comparaison entre le courant de dérivé et le courant de diffusion

➤ Equation de continuité

Pour analyser tous les phénomènes (transport, création, recombinaison...) il faut disposer d'un ensemble d'équation décrivant des concentrations des porteurs et de la charge électrique. L'équation de continuité est une équation locale valable en chaque point du semi-conducteur et à chaque instant: elle s'écrit pour les électrons et les trous:

$$\frac{dn(t)}{dt} = \frac{d\Delta n(t)}{dt} = G_n - R_n + \frac{1}{q} \text{div}(\vec{j}_n) \quad (\text{I.17})$$

$$\frac{dp(t)}{dt} = \frac{d\Delta p(t)}{dt} = G_p - R_p - \frac{1}{q} \text{div}(\vec{j}_p) \quad (\text{I.18})$$

On suppose la variation du nombre de porteurs par unité de temps dans un volume 1.dx (la surface est égale à l'unité)

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{1}{q} \frac{dj_{px}}{dx} + g_p - r \quad (\text{I.19})$$

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{1}{q} \frac{dj_{px}}{dx} + g_p - r_p \quad (\text{I.20})$$

Chapitre I : généralité sur la structure des matériaux (Cristallin et amorphe) et leurs propriétés

En considérant un matériau dopé et les courants de conduction et de diffusion on obtient:

$$\frac{dn}{dt} = n\mu_n \frac{dE}{dX} + \mu_n E \frac{dn}{dX^2} + D_n \frac{d^2 n}{dX^2} + g_n - \frac{n - n_0}{\tau_n} \quad (I.21)$$

$$\frac{dp}{dt} = -p\mu_p \frac{dE}{dX} - \mu_p E \frac{dp}{dX^2} + D_p \frac{d^2 p}{dX^2} + g_p - \frac{p - p_0}{\tau_p} \quad (I.22)$$

I-5-2-transport dans les matériaux amorphes

Cette étude est faite par simulation numérique de la photoconductivité en régime transitoire qui repose sur les deux mécanismes de transport: le processus de multi-piégeages ('multiple trapping') des électrons a travers les états étendus et le processus de saut ('hopping') des porteurs de charges a travers les états localisé de la queue de bande de conduction. Nous avons développé un modèle sous forme d'équations de continuité en régime transitoire et qui réunit les deux mécanismes de transport de 'multiple trapping' et de saut. Ces équations ont été résolues numériquement pour calculer la photoconductivité transitoire (TPC). Les résultats obtenus de la (TPC) pour les basses températures dans le silicium amorphe hydrogène Se -a: H sont en excellent accord avec les prédictions qui découlent de l'analyse de Monroe sur la thermalisation des porteurs de charges et le transport dans une distribution des états localises de forme exponentielle. Nous avons utilisé la simulation pour étudier les contributions relatives aux deux processus de conduction par 'multiple trapping' et saut dans la (TPC) pour différentes densités des états des semi-conducteurs désordonnent.

a)Processus de piégeage multiple

Les états des queues de bande dans les matériaux amorphe il a un rôle important dans le transport électronique. La photoconductivité transitoire repose sur deux mécanismes de transport, dans les matériaux amorphes, le premier mécanisme: le processus de piégeage multiple (des porteurs de charge libres à travers les états étendue).

dans le premier processus, le transport électronique peut être décrit par le modèle de piégeage ;ou le cycle de piégeage émission, réémission,...etc. Lorsque la température est supérieure à 150 K les porteurs de charge libres sont capturés et libérés plusieurs fois par les états pièges du gap avant qu'ils ne se recombinaient.

Chapitre I : généralité sur la structure des matériaux (Cristallin et amorphe) et leurs propriétés

Dans le cadre du modèle de transport par piégeage multiple on peut diviser les états localisés en deux classes. D'une part, les centres de piégeage dans lesquelles la probabilité de la réémission est plus grande que celle de la recombinaison et d'autre part les centres de recombinaisons dans lesquels la probabilité de la recombinaison est plus grande.

On arrive à résoudre ce problème en introduisant des niveaux limites pour les électrons et les trous, qui s'éparent les positions de piégeage et les centres de recombinaison. Pour cela on ne considère parmi tous les états entre les bords des bandes et le niveau limite, que ceux qui agissent comme centres de piégeage et les autres comme centres de recombinaison. La position du niveau limite est alors définie de façon que le temps de réémission.... [24]

$$.t_r = \nu_i^{-1} \exp\left(-\frac{E_i}{K_B T}\right) \quad (I.23)$$

ν_i Est la fréquence de tentative d'échappement

E_i Est l'énergie du piège

K_B Est la constante de Boltzmann et T la température.

Le mécanisme de transport par piégeage multiple peut être illustré sur la Figure I.8.

Elle montre le parcours de l'électron dans les états étendus. L'électron est capturé et libéré

Plusieurs fois par les états pièges du gap avant qu'il ne se recombine. Le transport des

Charges S'effectue dans la bande des états étendus sous la présence d'un champ électrique.

Chapitre I : généralité sur la structure des matériaux (Cristallin et amorphe) et leurs propriétés

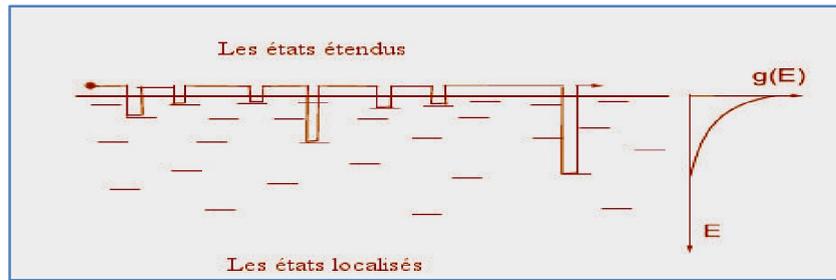


Figure I.8: Schématisation du mécanisme de conduction par piégeage multiple [25].

b) Processus de saut:

Le mécanisme de processus de saut a été proposé dans les années 1950 pour expliquer la conduction particulière des semi-conducteurs à très basse température [26] au-dessus de 0°K , quelques transitions entre les états localisés peuvent se produire et les porteurs peuvent sauter d'un site à un autre par effet tunnel. La conduction est assurée par le saut d'un plus proche voisin à un autre [27] ce sauts sont la conséquence de l'interaction entre un phonon et le porteur de charge.

I-6-Conclusion:

Dans ce chapitre, nous avons rappelé quelques notions de base de la physique de semi-conducteurs et donné leurs propriétés électriques. Nous avons présenté les bases physique du transport de charge dans un semi-conducteurs, nous avons couvert de différents modèle de bande proposés pour les matériaux amorphe au fil du temps par différente chercheurs, on rappelé aussi les différentes équations associées au mode de conduction par piégeage multiple.

Chapitre II:
**L'évolution historique de la densité des
états dans le sélénium amorphe et la
méthode de simulation**

Chapitre II: l'évolution historique de la densité des états dans le sélénium amorphe et la méthode de simulation

II-1: Introduction:

Le sélénium (Se) est un des chalcogènes qui sont les éléments situés dans la colonne VI du tableau périodique (soufre, sélénium et tellurium), il a été le premier Le sélénium amorphe est un élément chimique de numéro atomique 34, de symbole Se .Ce troisième élément du groupe VI A (groupe des chalcogènes) Il se trouve sous la forme de métal argent pour l'un des allotropies ou sous la forme d'une poudre rouge amorphe moins stable al. La chimie du corps simple et de ses principaux composés présente une grande analogie avec celle du soufre. Mais aussi avec celle du tellure. Le sélénium a été découvert par les chimistes Jöns Jacob Berzelius (1779-1848) et Johan Gottlieb Gahn en 1817 dans la matière boueuse subsistant dans la "chambre de plomb" d'une usine proche de Grispholm, proche lors de la préparation industrielle ancienne d'acide sulfurique. l. Photo conducteur découvrit en 1873. La couche électronique extérieure des atomes de groupe a 6 électrons, deux dans les états s et 4 dans les états p. Le sélénium, avec un nombre atomique de trente-quatre ($Z = 34$), a vingt-huit électrons intérieurs et six électrons de valence qui occupent six des huit états possibles dans la couche extérieure. La forme cristalline du sélénium a été employée dans des redresseurs électriques entre les années 30 et les années 60. Le sélénium amorphe (Se-a) et ses alliages ont été bien étudiés en raison de leur importance dans la xérogaphie commerciale pendant les années 60 et les années 70, actuellement la recherche en ces matériaux connaît une Renaissance due à l'intérêt de développer les détecteurs de rayon X pour des applications en imagerie médicale. La sensibilité au rayon X d'un tel détecteur est liée aux propriétés optiques et électroniques de la couche photoconductrice (Se-a). Par conséquent, une compréhension complète des propriétés du (Se-a) est nécessaire afin d'optimiser la performance de ces détecteurs[28].

Le Sélénium est un élément semi- conducteur d'un intérêt historique intéressant non seulement en termes d'importance en physique mais aussi pour son application en électronique .Les sélénium possède deux structures cristallines: la structure monoclinique, et la structure trigonal dont la dernière est le plus stable à température ambiante. Le abréviation (Se-a) représente la structure non cristalline du sélénium connu sous le nom sélénium amorphe qui peut être préparé par plusieurs techniques, ce n'était pas toujours technologies à bas de sélénium a une autre moment, ont eu une influence inestimable sur le développement de l'électronique moderne. Plus de 100 ans, cet élément a commencé son application comme matériau résistif et un peu plus tarda trouve son application dans un le domaine de la photoconduction. Pendant la période 1930 à 1960 le sélénium cristallin était utilisé et commercialise dans les redresseurs

Chapitre II: l'évolution historique de la densité des états dans le sélénium amorphe et la méthode de simulation

électriques, aussi les cellules solaires à base des séléniures étaient disponibles en 1920 et à cause de leur faible efficacité ils ont été remplacés par les cellules à base de Ge et de Si en 1950.

Son application la plus importante, cependant, s'est avérée être en xérographie, ou presque quatre décennies jusqu'à 1980 en utilisant sa photoconductivité (Se-a) dans un x-ray photoconducteur dans récemment développé et commercialisé Direct conversion X-RAY image detectors, La seconde est son utilisation comme photoconducteur à avalanche. Dans des tubes vidicon à ultra-haute sensibilité appelés HARPI-CONS qui ont pu capturer même des images de lumière des étoiles. RÉCEMMENT, et alla incorporer une couche photoconductrice de précipitation à avalanche à grande chaîne, fonctionnant avec du chaîne d'avalanche, dans un capteur d'image complémentaire métal oxyde semi-conducteur pour produire un prototype de capteur d'image haute sensibilité HARP CMOS. Un réseau d'imagerie CMOS conventionnel avec des électrodes à chaque pixel est recouvert d'une harpe qui est polarisée pour fonctionner dans le mode de multiplication d'avalanche, malgré la longue histoire de la recherche, les propriétés électroniques de (Se-a) ne sont toujours pas

Pleinement comprises. Cela est dû en partie à la forte influence de petites quantités d'impuretés et des conditions de préparation sur ses propriétés électroniques. Un modèle de chaîne aléatoire a été largement accepté comme modèle structurel pour (Se-a). En cela, tous les atomes sont dans des structures de chaîne coordonnées deux fois et l'angle dièdre est constant en amplitude mais change de signe au hasard. Les chaînes aléatoires sont la structure amorphe peut avoir des régions en forme de chaîne et en forme d'anneau qui sont essentiellement des fragments de chaînes parfaites dans les anneaux (Se-a) et Se₈ dans (Se-a). Les trous et les électrons peuvent dériver dans (Se-a) avec seulement un piégeage limité, ce qui est un de ses vertus en tant que photoconducteur à rayons X. par comparaison, seuls les trous sont mobiles dans Se, alors que seuls les électrons dérivent dans (Se-a). On a donc pensé que la capacité de (Se-a) à permettre aux deux porteurs de dériver découle de la présence de chaînes et d'anneaux dans la structure. On a donc pensé que les propriétés électroniques de (Se-a) dépendent fortement des concentrations relatives des fragments de chaîne et d'anneau dans la formation de la structure amorphe. En outre, les calculs théoriques ont montré que l'alternance aléatoire des angles dièdres peut elle-même produire des états localisés dans l'espace de mobilité, ce qui affecterait évidemment les propriétés électroniques.

Chapitre II: l'évolution historique de la densité des états dans le sélénium amorphe et la méthode de simulation

Les verres à CHAL génère sont connus pour être des matériaux avec une énergie de corrélation négative, conduisant à la formation de centres U négatifs, qui apparaissent sous la forme d'une alternance valencienne paris (VAPS) constituée des défauts C et C, triples atomes de Se coordonnés. L'influence du VAPS sur les propriétés électroniques reste un domaine de recherche d'actualité. [29]

II-2: Structure atomique du sélénium amorphe:

Il existe deux structures de base pour le sélénium cristallin. La forme hexagonale est la Plus Stable à température ambiante; les atomes dans cette structure sont disposés dans de longues chaînes Parallèles avec une triple spirale autour de l'axe C, avec les trois atomes dans chaque unité de la Spirale. La liaison entre les atomes dans une chaîne est covalente, et la liaison entre les chaînes est du type van der Waals, comme il est indiqué sur la Figure II.1. D'une autre part le sélénium Cristallin peut prendre deux autres structures: la structure α -monoclinique notée (α -Se) et la Trigonale (γ -Se). Dans la phase α -Se, les atomes se lient ensemble et forment des anneaux de Se₈ (Signifiant 8 atomes dans un anneau), alors que dans la phase γ -Se, les atomes du sélénium se lient ensemble pour former des chaînes en spirale. Les atomes alternés dans l'anneau se situent dans deux plans séparés de 1,3 Å des quatre atomes dans chaque plan aux coins d'un carré. Le type de la liaison dans les anneaux est covalent, et entre les anneaux, de type van der Waals[30]

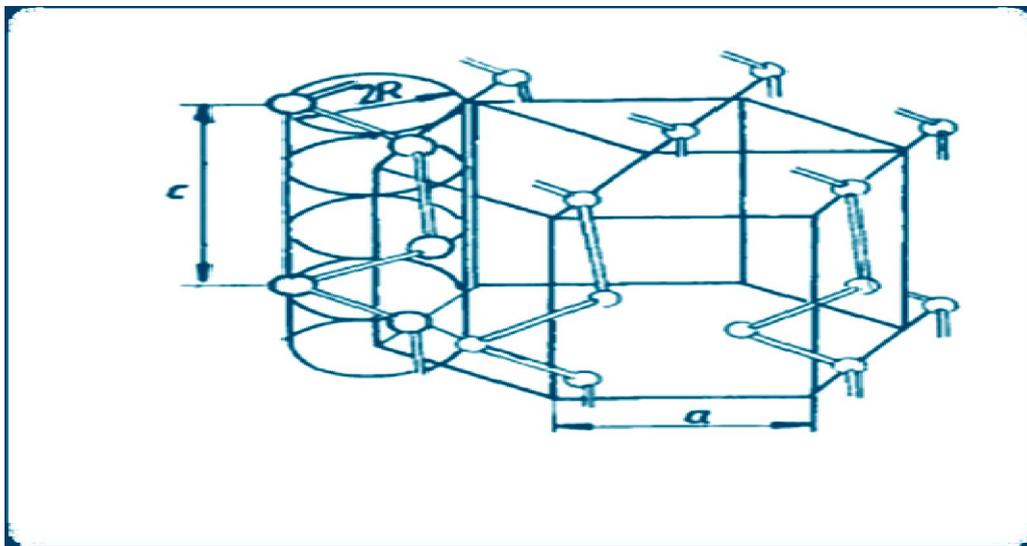


Figure II. 1: La structure hexagonale du sélénium cristallin

Chapitre II: l'évolution historique de la densité des états dans le sélénium amorphe et la méthode de simulation

La forme vitreuse est facilement obtenue lors du refroidissement du liquide, avec une Température de transition vitreuse d'environ 40° C. Comme nous avons mentionné plus haut, les électrons de la couche de valence du sélénium dans les huit états possibles se réparties de la façon suivante: deux électrons sont situés dans les états s et forment une paire isolée, et les deux électrons des états p forment aussi une paire isolée. Les doublets libres agissent comme des états non liants, en laissant les deux électrons restants dans les états p pour contribués à la liaison avec d'autres atomes. Avec cette configuration, le sélénium amorphe adopte une structure de liaison deux fois coordonnée avec un angle de liaison de 105° et un angle dièdre de 102°: c'est la configuration d'énergie la plus basse pour cette structure [30].

La théorie précoce pensait que le sélénium amorphe serait donc un mélange de ces deux états répartis au hasard dans le solide. Des études structurales favorisent maintenant un modèle de chaîne aléatoire. Ce modèle indique que les atomes en structure de chaîne liés ensemble en double Coordination. La valeur de l'angle dièdre, est constante mais change de façon aléatoire de Signe [30-31]. L'angle dièdre est l'angle entre deux plans de liaison adjacents, illustré sur la Figure II.3.

Dans le sélénium cristallin, les atomes ont des positions fixes en raison de la symétrie, la longueur de la liaison et l'angle de la liaison θ restent constante et alors l'angle dièdre est constant. Le signe de l'angle dièdre dépend du type de la structure cristalline. Dans γ -Se, l'angle dièdre tourne dans le même sens le long d'une chaîne pour former un pas spirale de trois atomes. Dans α -Se, le signe de ϕ est alterné autour de l'anneau. Dans le sélénium amorphe, l'angle dièdre change aléatoirement, créant des régions en forme de chaînes et d'anneaux, comme le montre la Figure II.2.

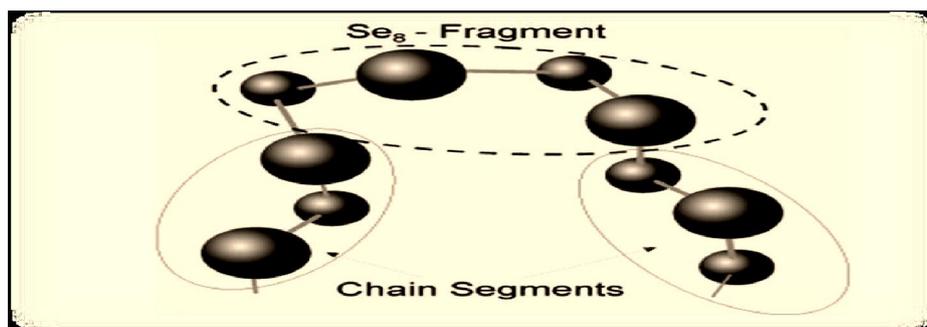


Figure II. 2: Le modèle de chaîne aléatoire de la structure du sélénium amorphe

Chapitre II: l'évolution historique de la densité des états dans le sélénium amorphe et la méthode de simulation

Les propriétés électroniques de (Se-a) sont fortement influencées par le dopage. (Se-a) pur est thermodynamiquement instable et cristallise avec le temps. Le dopage avec l'arsenic améliore les propriétés mécaniques et la stabilité thermique de la structure, c'est-à-dire il augmente le nombre moyen de coordination. Le Se allié à l'As a des températures de transition vitreuse et de cristallisation plus élevées et une plus grande dureté.

Les propriétés électroniques des matériaux amorphes sont fortement liées à la distribution de la densité d'états (DOS) dans l'espace de mobilité. de tels états localisés sont l'une des caractéristiques les plus fondamentales des semi-conducteurs amorphes. Malgré des décennies de recherche, le problème de la distribution DOS dans (Se-a) reste controversé. à l'heure actuelle, il existe au moins deux modèles généraux qui sont nettement différents dans leurs distributions DOS, ils ne s'entendent que sur le fait que la distribution DOS n'est pas sans particularité, mais comprend divers pics comme on pourrait s'y attendre du modèle Marshall-Owen de a_ semi-conducteurs. Au sein de ces deux modèles DOS, le nombre, la position et l'ampleur des pics sont sujets à controverse et à discussion.

Les distributions DOS mentionnées ci-dessus proviennent principalement d'expériences de transport de charges et de piégeage; telles que la décharge xérographique, le temps de vol (TOF) et la photo courant lyse post-transit. Parmi eux, la technique TOF est l'une des méthodes d'investigation les plus populaires et les plus utilisées. Dans les distributions DOS mentionnées ci-dessus proviennent principalement d'expériences de transport de charges et de piégeage; telles que la décharge xérographique, le temps de vol (TOF) et la photo courant lyse post-transit. Parmi eux, la technique TOF est l'une des méthodes d'investigation les plus populaires et les plus utilisées. Dans le présent article, nous utilisons une analyse de photo courant TOF basée sur le piégeage multiple qui nous permet de calculer la distribution DOS dans t(Se-a) dans la moitié supérieure de l'écart de mobilité (au-dessus de $E_c - 0,6$ eV) nous étudions l'influence de l'alliage, du dopage, de la température du substrat de dépôt et des effets du vieillissement. Nous examinons les changements dans la distribution DOS dus à l'alliage avec as, au dopage avec Cl, variant les conditions de préparation; et vieillissement (relaxation structurelle). Les formes d'onde de photo courant transitoires TOF, mesurées comme une fonction du champ électrique appliqué; ont été analysés en termes de modèle de piégeage multiple (le modèle de Noolandi) dans lequel une technique de LAPLACE inverse basée sur des essais et des erreurs a été utilisée pour dériver la distribution DOS.[29]

Chapitre II: l'évolution historique de la densité des états dans le sélénium amorphe et la méthode de simulation

II-3-: Problèmes rencontrés:

Nous avons vu que la relation proposée pour le calcul de la densité d'états dans le gap Des semi-conducteurs amorphes, sur la base de la méthode de la transformée de Laplace de la Photoconductivité transitoire (LT TPC) dans le cadre du mécanisme de transport par piégeage Multiple, est une approximation de l'équation (II.13). Cette relation générale est une équation Intégrale de Fredholm du premier type, et une attention particulière doit être tenue dans L'inversion numérique de l'équation intégrale pour obtenir la distribution énergétique des états localisés parce que, l'inversion numérique des équations intégrales de Fredholm est connue comme un problème mal posé « il-pose problème » [32].

Méthode de la transformée de Laplace pour l'analyse des photos courants mesurés par la Photoconductivité standard. Nous vérifions la validité Pour éviter la complexité numérique, nous allons démontrer l'applicabilité de la des approximations et l'applicabilité de L'expression finale de la densité d'états à partir des calculs numériques. L'enquête nécessite le Calcul du la photo courant transitoire idéal, $I(t)$, en fonction de t pour des distributions Sélectionnées, puis le calcul de la densité d'états via la transformée de Laplace des données Traitées.

La densité d'états reconstituée ainsi est ensuite comparée avec l'originale. Il est à Noter que ce n'est pas évident de retourner à la distribution d'origine, comme il paraît à Première vue, car le problème est mal posé.[33]

II-4 -Historique de la densité des états dans le sélénium amorphe et la Méthode de simulation:

Les propriétés électroniques du sélénium amorphe ne sont pas bien comprise jusqu'a malgré les nombreuses années de recherche. Ceci est partiellement dû l'impact de petites Quantités d'impuretés et des conditions de préparation sur ses propriétés électroniques. Un modèle de chaîne aléatoire adopté pour la structure du sélénium amorphe, dans ce cas, tous les atomes sont deux fois coordonnés et l'angle dièdre est constant en grandeur avec un changement de signe de façon aléatoire. Dans cette structure, les deux types de porteurs de charge (les trous et les électrons) peuvent circuler. Cette capacité a été attribuée en premier lieu à la présence à la fois de chaînes et d'anneaux dans la structure, et par conséquent les propriétés électroniques du sélénium amorphe dépendent fortement des concentrations relatives de fragments de chaîne et d'anneau dans la formation de la structure Amorphe.

Chapitre II: l'évolution historique de la densité des états dans le sélénium amorphe et la méthode de simulation

Les propriétés électroniques des matériaux amorphes sont fortement liées à la distribution de la densité des états (DOS) dans l'espace de mobilité. Ces états localisés sont l'une des caractéristiques les plus fondamentales des semi-conducteurs amorphes. Malgré des décennies de recherche, le problème de la distribution DOS dans (Se-a) demeure controversé. La distribution de la densité d'états dans le gap de mobilité du sélénium amorphe reste un sujet traité par plusieurs chercheurs.

Il est généralement convenu que cette distribution dans la moitié supérieure du gap près du bord de la bande de conduction E_c n'est pas monotone, mais elle contient des pics à certains niveaux d'énergie. La position exacte de ces pics demeure objet de nombreux débats. D'une autre part, la distribution de la densité d'états dans la moitié inférieure du gap de mobilité près du bord de la bande de valence semble plus controversée. Malgré le nombre important des travaux publiés dans ce domaine, le développement des détecteurs d'imagerie à rayons X [34] à base de sélénium amorphe a renouvelé l'attention sur les propriétés électroniques. La préoccupation principale.

Pour localiser les positions énergétiques de ces défauts dans le gap, les différents aspects de mesure de la photo courant transitoire par la technique du temps de vol (TOF) ont été utilisés dans le passé par Abkowitz [35] et par Song et al [36], mais les résultats trouvés sont en désaccord. Abkowitz [35] a trouvé une densité de l'ordre de $10^{14} \text{cm}^{-3} \text{eV}^{-1}$ au milieu du gap, des mesures de photoconductivité ont conduit à une densité égale à $10^{15} \text{cm}^{-3} \text{eV}^{-1}$ et $10^{18} \text{cm}^{-3} \text{eV}^{-1}$ respectivement pour les défauts chargés. Compte tenu des observations précédentes, une série d'expériences du temps de vol (TOF) ont été établies pour essayer de résoudre certaines ambiguïtés.

À partir de 1999, un groupe de chercheurs dirigés par G. J. Adriaenssens ont publié un nombre considérable d'articles sur ce sujet. Ces chercheurs ont utilisé la technique d'analyse du temps de vol (TOF) pour calculer la distribution de la densité d'états dans le gap du sélénium amorphe (Se-a). Sur la base de cette méthode, Song et ses collaborateurs [36] ont redécouvert l'ensemble des pièges profonds. Cette technique révèle les positions suivantes pour les nouveaux pics: 0.4-0.5 eV au-dessus du bord de la bande de valence et 0.55-0.65 eV en dessous du bord de la bande de conduction. Alors, les chercheurs dans le laboratoire d'Adriaenssens ont décidé de surmonter ce dernier obstacle à cause de l'existence des pics dans le modèle d'Abkowitz [35].

Chapitre II: l'évolution historique de la densité des états dans le sélénium amorphe et la méthode de simulation

La distribution de la densité d'états dans le gap du sélénium amorphe (Se-a) a été raffinée dans plusieurs autres papiers. Par conséquent, plusieurs séries de mesure de la photoconductivité stationnaire et transitoire ont été effectuées par Benkhedir et al sur des films de (Se-a) pour résoudre le problème [37-38]. Les résultats témoignent de la présence d'un centre accepteur situé environ 0.4 eV au-dessus du bord de la bande de valence EV, et celui des donneurs à 0.5 eV en dessous de l'extrémité de la bande de conduction, EC. Cette identification trouve un appui supplémentaire dans des travaux rapportés sur des mesures de spectroscopie de déflexion photo thermique (PDS) et de la photo courant modulé (CPM) et Par conséquent, (Se-a) est, sans aucun doute, un système U négatif [39].

La présence des pièges profonds dans le sélénium amorphe a été traditionnellement déduite à partir des expériences xérogaphiques [35], mais un comportement anormal observé sur la conductivité dans l'obscurité dans (Se-a) a été également attribué à des pièges profonds près du niveau de Fermi [40]. Des Photo courants en régime stationnaire mesurés sur le sélénium amorphe (Se-a) en fonction de l'intensité d'illumination pour des températures entre 210 K et 297 K, proposent d'avantage la confirmation de la présence d'un piège profond des électrons près du niveau d'équilibre de Fermi [41].

Un peu plus tard, Koughia et al [4] ont analysés les courants transitoires des électrons à partir de la technique du temps de vol (TOF), et ont déduits trois niveaux de défauts distincts (différents): un pic majeur situé à 0.3 eV en dessous de EC, un plus faible autour de 0.5 eV, et une autre densité profonde au-delà de 0.65 eV . Alors que l'énergie de 0.5 eV correspond aux résultats obtenus à partir d'analyse précédente, les niveaux 0.3 eV et profonds sont également soutenus par de nouvelles observations expérimentales. Des attentions dans des expériences antérieures du temps de vol (TOF) ont porté principalement sur la région post-transit, une étude attentive des courants d'électrons pré-transit a révélé des preuves incomparable pour un piège distincte situé à $\sim EC - 0.28$ eV [42]. Néanmoins, des mesures du photo courant transitoire montrent un soutien supplémentaire pour le niveau situé à 0.25 eV au-dessus de EV [43].

Une étude ultérieure a été entreprise par Benkhedir et al [36] pour confirmer ces résultats en examinant la photo courants transitoires standard dans des cellules gap du Sélénium amorphe (Se-a) à des températures plus basses, mais ils n'ont pas réussi à trouver le Changement de pente qui pourrait indiquer la présence d'un niveau de défaut à ~ 0.25 eV.

Chapitre II: l'évolution historique de la densité des états dans le sélénium amorphe et la méthode de simulation

Cependant, leurs expériences offrent preuve d'un niveau discret localisé environ 0.4 eV au-dessus de EV en parfait accord avec l'étude originale de Song et al. [36], et une queue de bande de valence exponentielle, avec une largeur $E_0 < 30 \text{ meV}$, est résolue. Sous l'influence des idées présentées par Koughia et al [44], le même groupe de Recherche a tenté de modéliser la distribution de la densité d'états dans le gap du sélénium Amorphe près de la bande de conduction, comme une somme d'une distribution exponentielle et trois distributions gaussiennes. Cela n'implique que les trois ensembles de pièges d'électrons (Niveaux défaut) existent dans la bande interdite de (Se-a). Les positions de ces pièges se sont Révélés d'être de 0.3 eV, 0.48 et 0.65 eV au-dessous du bord de la bande de conduction. La largeur caractéristique de la queue de bande trouvée dans le même travail est égale à 20 meV [45].

Plus récemment, des mesures du photo courant transitoire par la technique du temps de vol et la photoconductivité transitoire standard sur les couches évaporées de (Se-a), ont été effectuées par Benkhedir et al pour analyser la densité d'états dans la bande interdite. Cela signifie une décroissance dans le courant de prés-transit dans la trace du (TOF) ou une bosse dans le courant post-transit indique un niveau de défauts dans la bande interdite.

Pour Identifier la position énergétique du défaut, les décroissances du courant sont transformé en diagramme $[I(t)]^{-1} I t \times t$ ou $[I(t) \times t]$ [49]

Une telle analyse des données du temps de vol (TOF) pour les électrons a montré la Présence de deux niveaux de défauts. Ces niveaux sont situés à environ 0.26 eV et 0.5 eV au-dessous de l'extrémité de bande de conduction. Des mesures de traces de (TPC) dans une Configuration coplanaire des couches de (Se-a), ont été utilisées pour analyser la densité d'états dans la bande interdite du côté de la bande de valence. Dans ce cas, une décroissance de la trace indique un niveau de défaut. Cette analyse a montré la présence de deux niveaux de défauts situés à 0.2 eV et 0.4 eV au-dessus du bord de la bande de valence [46].

Dans une publication ultérieure, Marshall [51] a montré avec des calculs de simulation que l'application des procédures décrites ci-dessus pour interpréter les traces du temps de vol (TOF) et de la photoconductivité transitoire (TPC), peuvent détecter la présence des niveaux de défauts. Cependant, la procédure de prés-transit donne une fausse position énergétique du défaut indépendamment de la hauteur de l'intensité du pic au-dessus de la densité du fond. En revanche, la procédure de post-transit identifie correctement cette énergie. Il a aussi montré que des

Chapitre II: l'évolution historique de la densité des états dans le sélénium amorphe et la méthode de simulation

méthodes quantitatives comme la transformée de Fourier identifie avec précision la structure de la densité d'états.

Il est intéressant de mentionner que les valeurs des positions énergétiques des défauts présentés dans les deux derniers paragraphes, peuvent être considérées comme une estimation d'image de la densité d'états dans le gap du sélénium amorphe. Il est également important de signaler que la position énergétique des niveaux de défauts profonds est confirmée en utilisant la méthode de prés-transit [36], et que la position énergétique des niveaux de défauts peu profonds est confirmée par la méthode de la transformée de Fourier [46].

L'utilisation de la méthode de la transformée de Fourier a permis de connaître, plus précisément, la distribution énergétique de la densité d'états dans le gap du (Se-a) du côté de la bande de valence. Cette méthode a été proposée par Main et al [47], et a été largement utilisée dans différentes situations. Nous pouvons, également, utiliser la méthode de la transformée de Laplace pour le même objectif. La différence la plus importante entre les deux techniques est dans leur convergence. Contrairement à la méthode de la transformée de Laplace, la convergence de la transformée de Fourier doit être assurée par l'utilisation de certaines techniques, une procédure de fenêtrage, par exemple, et peut dépendre de la forme des distributions des états localisés [48]

L'intérêt porté à l'utilisation de la méthode de la transformée de Laplace pour l'extraction de la densité des états localisés dans les matériaux amorphes, à partir des données du photo courant transitoire (TPC) a donné lieu à un grand nombre de publications [52-56]. Comme il est indiqué par Naito et al [48,49-50], la méthode de la transformée de Laplace offre deux avantages:

➤ l'analyse de la méthode est valable à la fois dans le régime avant et après la recombinaison de la photo courant transitoire.

➤ et applicable à des semi-conducteurs amorphes présentant un transport dispersif ou non dispersif Une étude ultérieure par simulation numérique de la photo réponse transitoire des films à base de sélénium amorphe à travers une configuration coplanaire a permis de simuler la densité d'états en fonction de l'énergie à différentes températures. la densité d'états simulée dans la moitié inférieur du gap de sélénium amorphe pur est composée d'une queue de bande de valence, superposée d'un pic peu profond situé à 0.32eV et un autre profond autour de 0.45eV. Cette

Chapitre II: l'évolution historique de la densité des états dans le sélénium amorphe et la méthode de simulation

même étude a traité le sélénium amorphe stabilisé ; ce terme veut dire que le sélénium amorphe est dopé avec l'arsenic pour prévenir le matériau de la cristallisation. Les expériences indiquent que l'ajout de l'arsenic empêche la structure de la cristallisation mais ce dopage entraîne une diminution dans la durée de vie des trous. Dans la littérature, on attribue généralement la diminution de la durée de vie des trous à un nouveau piège de trous introduit par l'ajout des petites quantités d'As [52]. Néanmoins, aucune preuve expérimentale de l'existence actuelle de ce piège des trous, et aucune information n'est disponible sur les changements précis de la densité des états localisés qui réduit la durée de vie des trous dans le sélénium amorphe dopé avec l'arsenic. Les résultats trouvés dans cette étude montrent que la densité d'états simulée dans le sélénium amorphe dopé avec 0.2 at.% As et 0.5 at.% As, est composée respectivement d'une queue de bande de valence de température caractéristique $T_0=313$ K et 403K, et une distribution gaussienne centrée autour de 0.406 eV au-dessus de E_v , avec une valeur d'amplitude de $1.949 \times 10^{15} \text{cm}^{-3} \text{eV}^{-1}$ et un écart type de 0.038 eV pour le dopage avec 0.2 at.% As. La distribution gaussienne dans (Se-a) dopé 0.5 at.% As est centrée autour de 0.375 eV au-dessus de E_v avec une amplitude de $1.593 \times 10^{18} \text{cm}^{-3} \text{eV}^{-1}$ et un écart type de 0.038 eV. Ces calculs ont éliminés la possibilité de l'introduction de pièges largement reportés dans la littérature [49-52]. La densité trouvée et donc non monotone et différente de la densité d'états présentée par le groupe de Kasap. Après l'apparition de cet article le même de chercheurs favorisant le modèle monotone a réexaminé la distribution des états dans deux articles successive pour éliminer la possibilité des pièges superposés sur la distribution exponentielle du côté de la bande de valence. Ces travaux ont attribués la présence des pièges au phénomène de diffusion. Sous l'influence de ses idées Serdouk et Benkheldir ont essayé de valider leurs modèles de densité à travers le calcul de la durée de vie dans le sélénium stabilisé.

Les résultats trouvés Pour achever notre but de travail il faut donner un aperçu sur les méthodes de mesure des photos courantes transitoires ainsi que les modèles mathématiques gèrent la conduction dans ce type de matériau.

II-5-: Méthodes expérimentales

Il existe deux types de configuration de l'échantillon dans les mesures de la photoconductivité transitoire, la configuration coplanaire, et l'expérience est référée pour nous la photoconductivité transitoire standard (TPC). L'alternative consiste à utiliser une Configuration en sandwich, on parle dans ce cas de l'expérience du temps de vol (TOF), cette Dernière est une

Chapitre II: l'évolution historique de la densité des états dans le sélénium amorphe et la méthode de simulation

excellente méthode pour étudier le déplacement des porteurs de charge dans Les semi-conducteurs résistifs [53].

II-5-1: Photoconductivité transitoire (TPC):

Dans l'expérience de la photoconductivité transitoire standard (TPC) schématisé sur la Figure .II.3, des porteurs de charges libres sont excités dans la bande de transport à $t=0$ par une pulsation lumineuse courte. Ils peuvent alors se déplacer par le champ électrique jusqu'à leur disparition par la recombinaison, mais avant que ceci se produit ils sont immobilisé un certain nombre de fois par les divers pièges qui sont présents dans le matériau. Puisque les distributions des porteurs de charge sont à l'équilibre thermique au début de l'expérience, les sites de piégeage des électrons situés au-dessus du niveau de Fermi et les sites de piégeage des trous ci-dessous sont vides, tels que les porteurs de charges ne sont exclus d'aucune interaction avec ces sites de piégeage. Étant donné que la libération des porteurs piégés est un processus activé thermiquement avec la profondeur du piège, les pièges plus profonds immobilisent les porteurs de charges pendant de longues périodes et mènent des valeurs faibles du courant transitoire .D'autre part, les états peu profonds libèrent les porteurs dans des temps plus courts, et le piégeage à nouveau de ces charges mènera à une population croissante des états plus profonds et une réduction supplémentaire est enregistrée au niveau du courant De nombreux auteurs se sont efforcés pour tirer des informations à partir des expressions reliant l'évolution du photo courant en fonction du temps ,mais ils sont difficiles inverser dans le cas général Une manière élégante d'éviter les difficultés posées par une analyse du domaine du temps du courant transitoire est de transposer la diminution du courant dans le domaine de fréquence par la transformée de Laplace. Cette technique a été appliquée à la conversion des signaux de TPC et peut être employé pour extraire des informations sur la distribution de la densité des états localisés dans la bande interdite. Cette méthode fera l'objet du chapitre suivant et sera ratée en détaille

Chapitre II: l'évolution historique de la densité des états dans le sélénium amorphe et la méthode de simulation

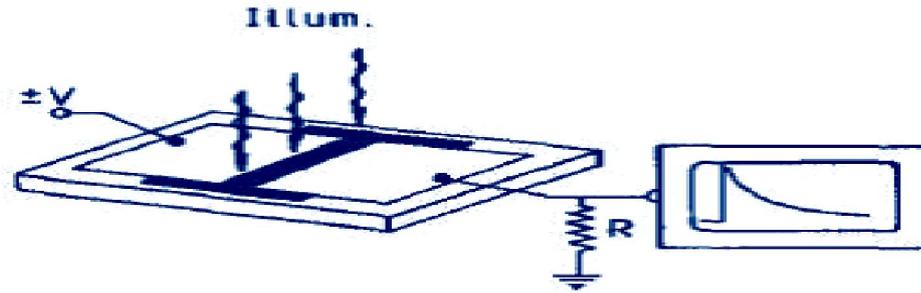


Figure II. 3: La photoconductivité transitoire standard (TPC)

II-5-2: photoconductivité transitoire du temps de vol (TOF)

La technique TOF consiste en une excitation optique, très rapide, par l'un des côtés d'une photocellule p^+-i-n^+ sous polarisation inverse. La région i constitue la région active à caractériser. Cette technique mesure le photo, courant transitoire de la cellule. En effet, ce dernier est contrôlé, lors des courtes durées suivant l'excitation optique, par un processus de multi piégeage par les pièges peu profonds. Ensuite, le mécanisme de transport commute vers un processus d'émission par les pièges profonds. Pour les faibles excitations optiques (mode conventionnel), ce dernier processus commence à partir du temps de transit t_T durant lequel la plupart de la charge photo générée atteint l'électrode de collection. Pour les fortes excitations optiques (mode SCLC), la charge photo générée est supérieure à la charge de polarisation électrique de la cellule. De ce fait, le champ électrique, qui agit sur les porteurs libres, est masqué dans la région de génération [54]. La charge photo générée nécessite alors un temps d'extraction t_e nettement supérieur au temps de transit t_T défini en mode conventionnel. Ce temps est celui après lequel commence le processus d'émission par les pièges profonds. La technique PCT consiste également en une excitation optique très rapide. Cependant, le matériau est dans une configuration coplanaire. Dans ce cas, on mesure la photoconductivité transitoire qui est aussi contrôlée par un processus de multi piégeage des porteurs de charge par les états localisés

Chapitre II: l'évolution historique de la densité des états dans le sélénium amorphe et la méthode de simulation

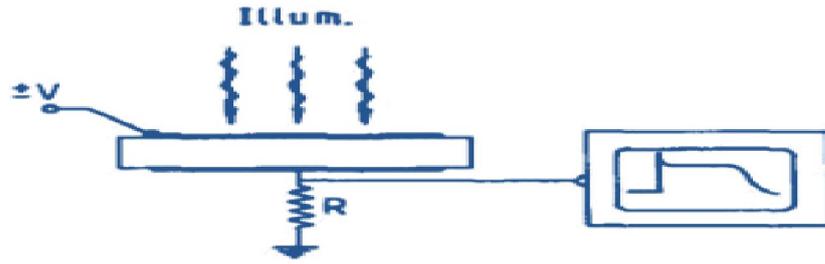


Figure II. 4: les elements essentiels d'un circuits du temps de vol(TOF)

La procédure du calcul de DOS à partir des techniques de la photo conductivité transitoire passe par la résolution d'équations de continue dans la présence des états localisés.

Cette procédure à été mise par la première fois par: Schmidln qui a dérivé des équations différentielles donnant la variation des contractions des charges libres et piégés.

En 1977, Schmidln [8] a décrit le photo transport dans les semi-conducteurs amorphes par des équations de continuité exprimant les taux de variation en fonction du temps des concentrations des porteurs libres $\frac{\partial n}{\partial t}$ ainsi que celles correspondantes au porteurs piégés $\frac{\partial n}{\partial t}$ Dans les différents niveaux d'énergie E_i du gap. Les équations différentielles s'écrivent comme suit:

$$\frac{\partial p(\vec{x}, t)}{\partial p} = g_v(\vec{x}, t) - \nabla \cdot f(\vec{x}, t) \quad (\text{II, 1})$$

$$\rho(\vec{x}, t) = n(\vec{x}, t) + \sum_i n_i(\vec{x}, t) \quad (\text{II, 2})$$

où $\equiv(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$ est la position dans l'espace t est le temps, $g_v(\vec{x}, t)$ représente le taux de génération, $f(\vec{x}, t)$ est le flux des charges mobiles, $\rho(\vec{x}, t)$ est la concentration totale des charges, définie par l'équation (II,2), $n(\vec{x}, t)$ est la concentration des porteurs libres et $n_i(\vec{x}, t)$ la concentration des porteurs localisés

La sommation dans l'équation (II,2) s'étend sur l'ensemble des différents types de pièges dans le matériau. Nous nous limiterons dans cette étude à un film semi-conducteur d'épaisseur dx . Cette dernière illustre le trajet possible d'un trou qui a été généré près de la surface éclairée à $x=0$. La probabilité de génération par unité de volume par unité de temps est désignée par

Chapitre II: l'évolution historique de la densité des états dans le sélénium amorphe et la méthode de simulation

$g\bar{v}(\bar{x},t)$. Suite à la génération, les trous se déplacent vers le substrat à $x=L$. À un point x , le trou peut être capturé et libéré d'un piège approprié. Chaque type de piège est caractérisé par un temps de vie τ_i et un temps d'émission $\tau_{r,i}$, donc les probabilités de capture et d'émission par unité de temps sont et le flux des trous est exprimé par la relation suivante:

Respectivement $w_i = \tau_i^{-1}$; $\gamma_i = \tau_{r,i}^{-1}$ les équations précédentes prennent la forme suivante:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = g_v(x, t) + p_i \gamma_i - p \sum_{i=1}^k w_i - \frac{\partial fp}{\partial x} \quad (\text{II, 3})$$

$$\frac{\partial p_i}{\partial t} = p \omega_i - p_i \gamma_i \quad (\text{II, 4})$$

le flux des trous est exprimé par la relation suivante:

$$fp = pu_0 - FD \frac{\partial p}{\partial x} \quad (\text{II, 5})$$

Dont μ est la mobilité microscopique, F est le champ électrique et D le coefficient de diffusion des trous. Il faut noter que l'équation (II,4) implique un système d'équations, pour chaque piège distinct k . Les équations (II, 3) et (II, 5) sont explicitement écrites pour une dimension, mais leur extension à trois dimensions est évidente. Des équations similaires peuvent être écrites pour les électrons, et leur solution sera réalisée de la même manière que la solution donnée pour les trous. à travers les états de valence ou de conduction, les paramètres de piégeage peuvent être écrits comme suit:

$$W_i = N_i \sigma_i \bar{v} \quad (\text{II, 6})$$

Où N_i est la concentration du piège i par unité de volume; σ_i , la section efficace de capture, v est la vitesse moyenne d'un porteur mobile; ν_i , est la fréquence de tentative d'échappement E est l'énergie d'activation pour la libération. Pour le cas particulier d'un porteur chargé.

Pour expliquer dans les techniques de la photoconductivité transitoire, l'analyse du courant à partir de ces données demeure difficile à cause de la limitation du domaine temporel de ces expériences. Un moyen élégant de contourner ces difficultés, est de transformer la décroissance

Chapitre II: l'évolution historique de la densité des états dans le sélénium amorphe et la méthode de simulation

du courant dans le domaine fréquentiel en utilisant la transformée de Fourier [32]. Cette procédure peut être utilisée pour extraire des informations sur la densité et la distribution énergétique des états localisés dans la bande interdite. Non seulement la transformée de Fourier, mais il existe d'autres méthodes qui ont été appliquées dans la conversion des signaux mesurés à partir des expériences de la photoconductivité transitoire tel que la transformée de Laplace [33]. Cette méthode a été proposée par Naito et ses collaborateurs pour déterminer la distribution énergétique des états localisés dans les semi-conducteurs amorphes.

Dans un premier lieu la recherche de la densité des états localisés à partir des vues sûres de la photoconductivité transitoire a fait l'objet de plusieurs études. Plusieurs méthodes ont été proposées dans lesquelles on cite la méthode de la place à basse et à haute résolution.

II-6: Application de la méthode de la place à basse résolution (LT):

La transformée de LAPLACE constitue une méthode puissante pour résoudre les équations différentielles linéaires, certaines intégrales et équations aux dérivées partielles, elle réduit le problème de résoudre une équation différentielle linéaire à coefficients constants à un problème algébrique. Cette méthode peut analyser la réponse transitoire des circuits, et la transformée de LAPLACE permet de relier le problème en fonction du temps à celui en fonction de la fréquence et définit comme suit

$$I\{f(t)\} = \int_0^{\infty} f(t)e^{-st} dt \quad (II, 7)$$

La dérivation dans le domaine temporel correspond à multiplier $F(s)$ par s puis soustraire la valeur initiale de $f(t)$ (donc $f(0)$), on obtient:

$$I\left\{\frac{df(t)}{dt}\right\} = sF(s) - f(0) \quad (II, 8)$$

On peut appliquer les définitions précédentes aux équations (II, 3) et (II, 4) et on trouve:

$$s\hat{p}(s) = -\sum_i s\hat{p}_i(s) - \frac{\hat{p}(s)}{\tau} n_0 \quad (II, 9)$$

$$s\hat{p}(s) = \omega_i \hat{p}(s) - \lambda_i \hat{p}_i(s) \quad (II, 10)$$

Chapitre II: l'évolution historique de la densité des états dans le sélénium amorphe et la méthode de simulation

$$\hat{p}_i(s) (s)(s+\gamma_i)=w_i \hat{p}(s) \Rightarrow \hat{p}(s) = \frac{w_i \hat{p}(s)}{s+\gamma_i} \quad (\text{II, 11})$$

On injecte l'expression de $p_i(s)$ dans l'équation (II, 9) on aboutit à:

$$s \hat{p}(s) = - \sum_i s \frac{w_i \hat{p}(s)}{s+\gamma_i} - \frac{\hat{p}(s)}{\tau} + n_0 \quad (\text{II, 12})$$

$$\hat{p}(s)_i(s) = \frac{n_0}{s + \sum_i \frac{sw_i}{s+\gamma_i} + \frac{1}{\tau}} \quad (\text{II, 13})$$

$$\hat{P}(s) = \frac{n_0}{a(s)} \quad (\text{II:14})$$

Où:

$$a(s) = s + \frac{1}{\tau} + \sum_i \frac{s\omega_i}{s+\gamma_i} = s + \frac{1}{\tau} + \int \frac{\sigma_e v_{th} g(E)}{s + v \exp(-\frac{E}{k_\beta T})} \quad (\text{II, 15})$$

Dans l'expression en haute E_f est le niveau d'équilibre thermique de fermi la différenciation de l'équation (II, 15) par rapport à $\ln s$, nous donne:

$$\frac{da(s)}{d \ln s} = s \left[1 + \int_0^{E_f} \sigma \sigma_e v_{th} h(s, E) dE \right] \quad (\text{II, 16})$$

Tel que:

$$h(s, E) = \frac{v \exp(-\frac{E}{k_\beta T})}{(s + v \exp(-\frac{E}{k_\beta T}))^2} \quad (\text{II, 17})$$

Chapitre II: l'évolution historique de la densité des états dans le sélénium amorphe et la méthode de simulation

Comme un problème mal posé .dans ce cas il est très difficile d'obtenir une solution exacte. Donc pour résoudre le problème Naito et al ont approché cette équation par une fonction delta, comme le montre la relation ci-dessous:

$$h(s, E) = \frac{k_{\beta} T}{s} \delta(E - E_0) \quad (\text{II, 18})$$

Avec:

$$E_0 = k_{\beta} T \ln\left(\frac{v}{s}\right) \quad (\text{II, 19})$$

En remplaçant l'équation (II, 18) et (II, 19) dans l'équation (II. 14), nous obtenons:

$$\frac{da(s)}{d \ln s} = s + \sigma_e v_{th} k_{\beta} T g(E_0) \quad (\text{II, 20})$$

La photo courant dans l'expérience de la photoconductivité transitoire, est donné par la formule:

$$I(t) = e\mu_0 F p(t) \quad (\text{II, 21})$$

En appliquant la transformée de LAPLACE à la relation du photo courant transitoire on trouve:

$$\hat{I}(s) = e\mu_0 F \hat{p}(s) \quad (\text{II, 22})$$

μ_0 : la mobilité microscopique du porteur de charge

F: le champ électrique appliqué

Des équations (II, 14) et (II, 16) et (II, 22) la distribution des états localisés peut être donnée par:

$$g(E_0) = \frac{1}{\sigma_e v_{th} k_{\beta} T} \left[\frac{d}{d \ln(s)} \frac{en_0 \mu_0 F}{\hat{I}(s)} - s \right] \quad (\text{II, 23})$$

Chapitre II: l'évolution historique de la densité des états dans le sélénium amorphe et la méthode de simulation

$$g(E_0) = \mathcal{L}^{-1} \left[\frac{d}{d \ln(s)} \left(\frac{I(0)}{\hat{I}(s)} \right) - s \right] \quad (\text{II, 24})$$

L'intégration numérique sur les N points de l'échantillon, donne une transformée de LAPLACE du photo courant transitoire:

$$\hat{I}(s) = \sum_{j=2}^{N-1} I(t_j) e^{-t_j s} \Delta t_j \quad (\text{II, 25})$$

$$\Delta t_j = \frac{t_{j+1} - t_{j-1}}{2} \quad (\text{II, 26})$$

La distribution des états localisés peut être obtenue à partir équation (II, 19) et (II, 2)

II-6-1: La méthode de la transformée de Laplace à haute résolution (HLT):

Ayant enfin donné un aperçu de la méthode utilisée pour déterminer les propriétés électroniques d'un amorphe, on va s'intéresser maintenant aux corrections engendrées sur la fonction de la densité des états localisés. On nommera cette méthode la transformée de Laplace à haute résolution (HLT).

Pour améliorer la résolution en énergie de la méthode de la transformée de Laplace de la photoconductivité transitoire (LT TPC), Naito et al ont proposé la méthode de la transformée de Laplace à haute résolution (HLT) [55]. Dans la méthode de la transformée de Laplace de la photoconductivité transitoire à haute résolution (HLT), on calcule la dérivée seconde de l'équation (II.12) par rapport à s

$$\frac{d^2 a(s)}{ds^2} = \int_0^{E_f} \sigma_{th} g(E) h'(s, E) dE \quad (\text{II, 27})$$

$$h'(s, E) = \frac{2v \exp\left(-\frac{E}{k_\beta T}\right)}{\left[s + v \exp\left(-\frac{E}{k_\beta T}\right)\right]} \quad (\text{II, 28})$$

Cette fonction peut aussi être approchée par une fonction delta

Chapitre II: l'évolution historique de la densité des états dans le sélénium amorphe et la méthode de simulation

$$h'(s, E) = \frac{k_{\beta} T}{s^2} \delta(E - E'_0) \quad (II, 29)$$

$$E'_0 = k_{\beta} T \ln(2v/s) \quad (II, 30)$$

en substituant l'équation (II.28) dans l'équation (II.27), on aboutit à:

$$\frac{d^2 \alpha(s)}{ds^2} = -\frac{\sigma v_{th} k_{\beta} T v k T}{s^2} g(E'_0) \quad (II, 31)$$

Utilisons la transformée de Laplace de $J(t)=tI(t)$ et $H(t)=t^2I(t)$ définit *commesuit*:

$$\hat{J}(s) = \int_0^{\infty} tI(t)e^{-st} dt = -e\mu_0 E \frac{\hat{ds}}{ds} \quad (II, 32)$$

$$\hat{K}(s) = \int_0^{\infty} t^2 I(t)e^{-st} dt = -e_0 E \frac{dp^{\wedge}(s)}{ds^2} \quad (II, 33)$$

Des équations (II,14) et (II,31), on obtient l'expression de la distribution des états localisés

Avec cette méthode les auteurs ont amélioré l'énergie de résolution de la méthode de la transformée de Laplace de la photoconductivité transitoire (LT TPC), et ils ont prouvé que la méthode (HLT) fonctionne avec plus de précision dans le cas des distributions continues des états localisés

II-7: Conclusion:

Dans ce chapitre nous donnons un aperçu historique de l'évolution dans le temps de la découverte du sélénium et de ses utilisations, par la suite nous avons expliqué les techniques expérimentales et les méthodes employées dans la simulation de la distribution des états localisés utilisées dans cette étude.

Chapitre III:

Simulation de la mobilité de trous dans a- Se dopé

Chapitre III: Simulation de la mobilité de trous dans a- Se dopé

III-1 Introduction:

Dans cette étude, nous allons tenter d'apporter des éléments de réponse à la question encore en suspend dans la littérature qui concerne la forme exacte de la distribution de la densité des états localisés dans la moitié inférieure du gap de sélénium amorphe. Pour cela deux points de vue peuvent être traités: le premier concerne le calcul de la durée de vie des trous à partir du modèle non monotone qui a fait l'objet de l'étude de master proposée l'an dernier [55] et le deuxième point de vue consiste à simuler la mobilité des trous en fonction de la température et du champ appliqué qui sera l'objectif de ce chapitre.

III-2 Calcul des photos courantes transitoires dans le cadre de la technique de TOF:

Comme nous avons présenté dans le deuxième chapitre, la simulation des photos courantes transitoires repose sur l'expression (II, 22) et demande des paramètres fixes et variables qu'on les résume dans le tableau suivant:

Paramètre	Température	F	D	N	Σ
Valeur (Unité)	192, 208, 227, 238 (K)	$10^4, 3 \times 10^4,$ $6 \times 10^4,$ $10 \times 10^4,$ 16×10^4 (V/cm)	50 μm	10^{12} (S^{-1})	10^{-19} (cm^2)

Tableau III. 1: Paramètres fixes et variables de la simulation

L'utilisation de ces paramètres ainsi que l'expression de la densité des états localisés des deux échantillons: a- Se: 0.2at/As et 0.5at/As données par les relations ci-dessous, permet de trouver les variations des photos courantes transitoires en fonction du temps.

$$g(E)_{0.2\text{at}\%As} = 6.636 \times 10^{21} \exp(-37.027E) + 1.949 \times 10^{15} \exp\left[-\left\{\frac{E-0.406}{0.046}\right\}^2\right], \quad (\text{III.1})$$

$$g(E)_{0.5\text{at}\%As} = 4.047 \times 10^{23} \exp(-28.785E) + 1.593 \times 10^{18} \exp\left[-\left\{\frac{E-0.375}{0.045}\right\}^2\right], \quad (\text{III.2})$$

Chapitre III: Simulation de la mobilité de trous dans a- Se dopé

Les photos courants transitoires simulés reposent sur l'utilisation de l'inverse de Laplace par le billet de la méthode de paré [47]. Les Figure (3.1-3.5) montrent les variations du courant des trous en fonction du temps en représentation double logarithmique, pour les échantillons de sélénium amorphe stabilisé d'épaisseur 50µm sous différent champs et températures.

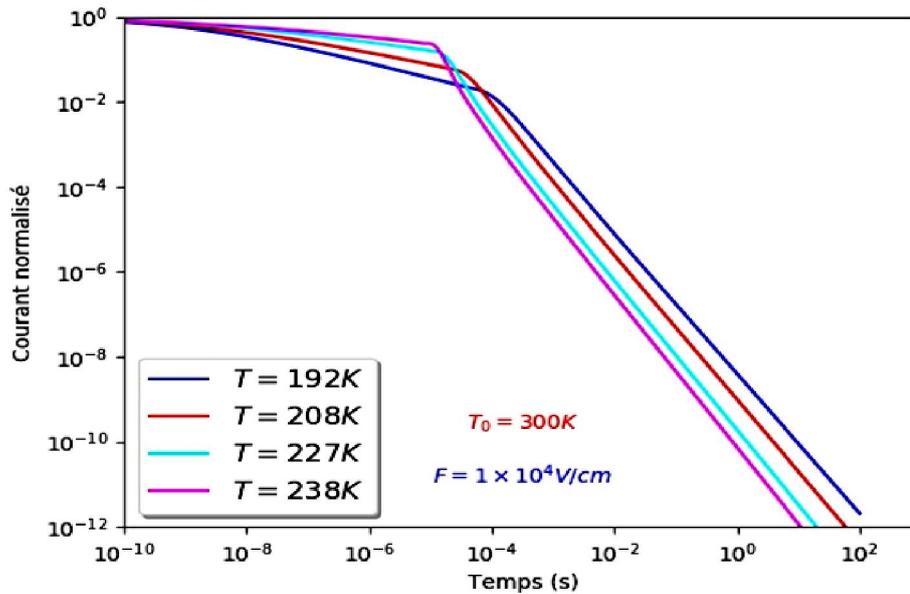


Figure III.1: Courant simulé de TOF des trous dans a- Se stabilisé à différentes température pour un champ $F=10^4 V/cm$

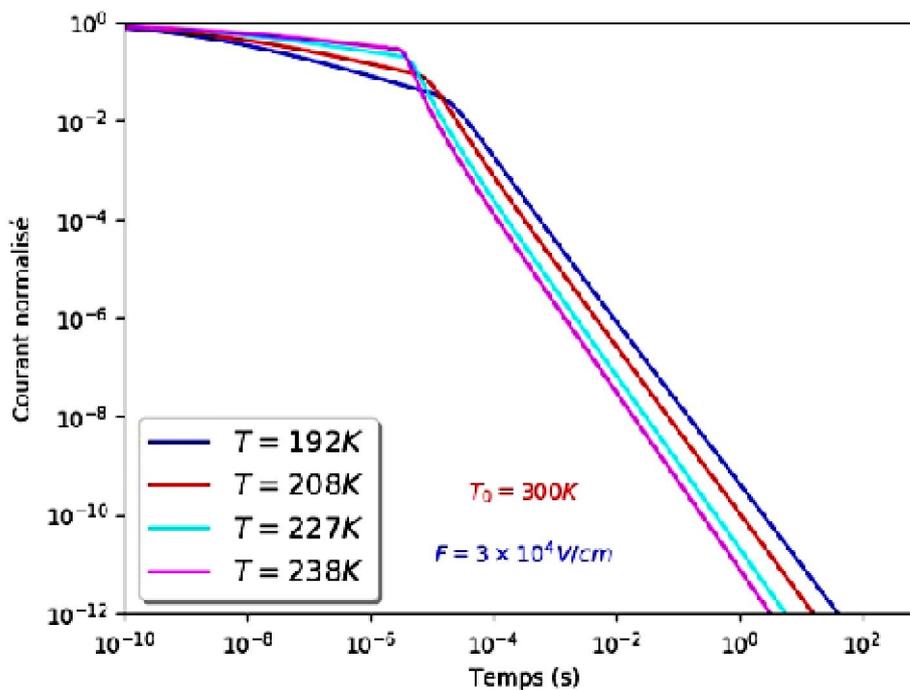


Figure III.2: Courant simulé de TOF des trous dans a- Se stabilisé à différentes température pour un champ $F=3 \times 10^4 V/cm$

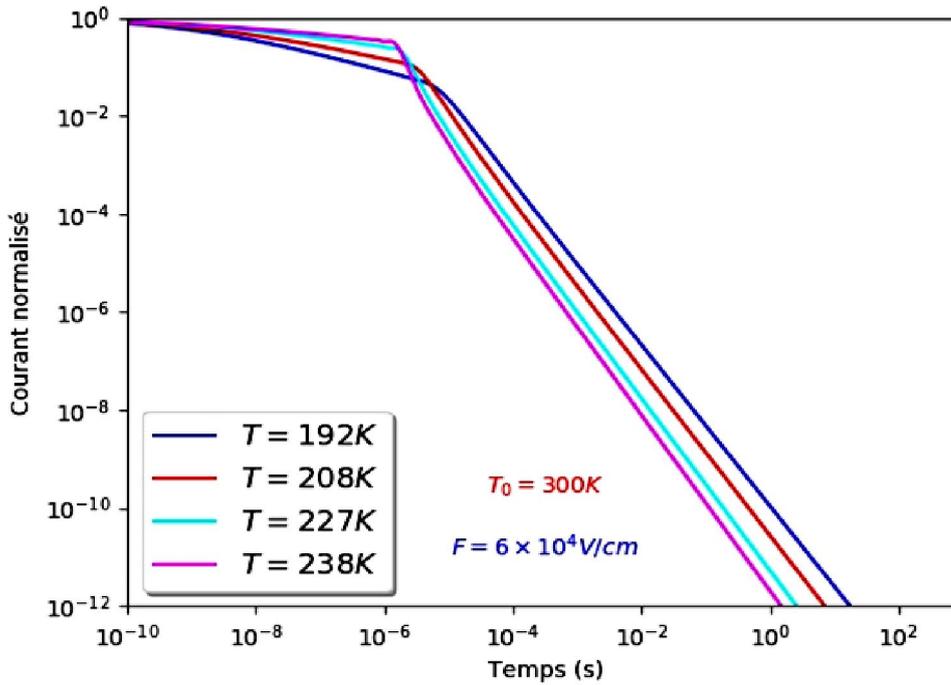


Figure III.3: Courant simulé de TOF des trous dans a- Se stabilisé à différentes température pour un champ $F=6 \times 10^4 V/cm$

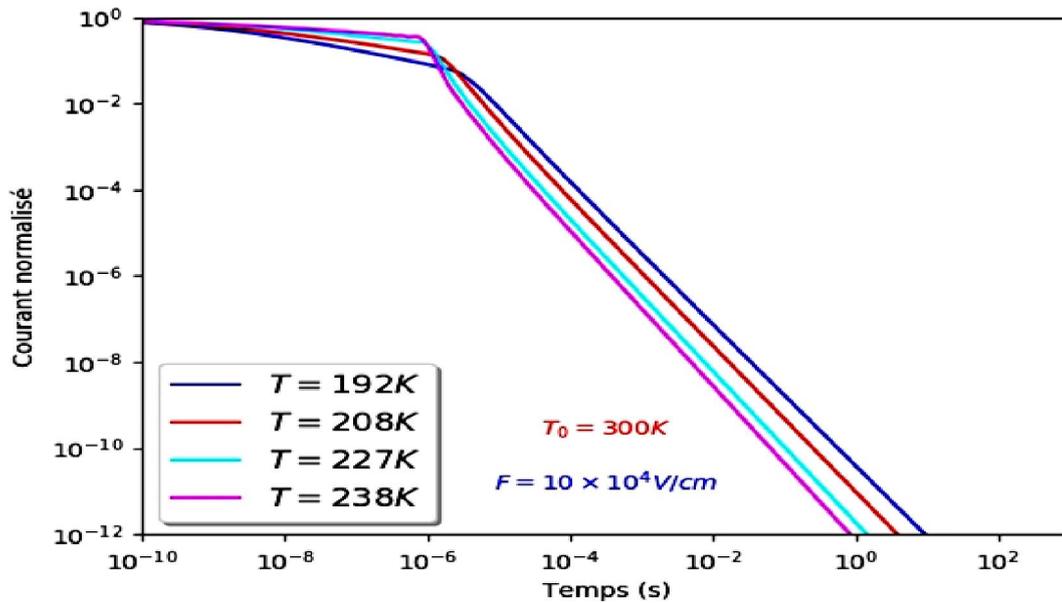


Figure III.4: Courant simulé de TOF des trous dans a- Se stabilisé à différentes température pour un champ $F=10 \times 10^4 V/cm$

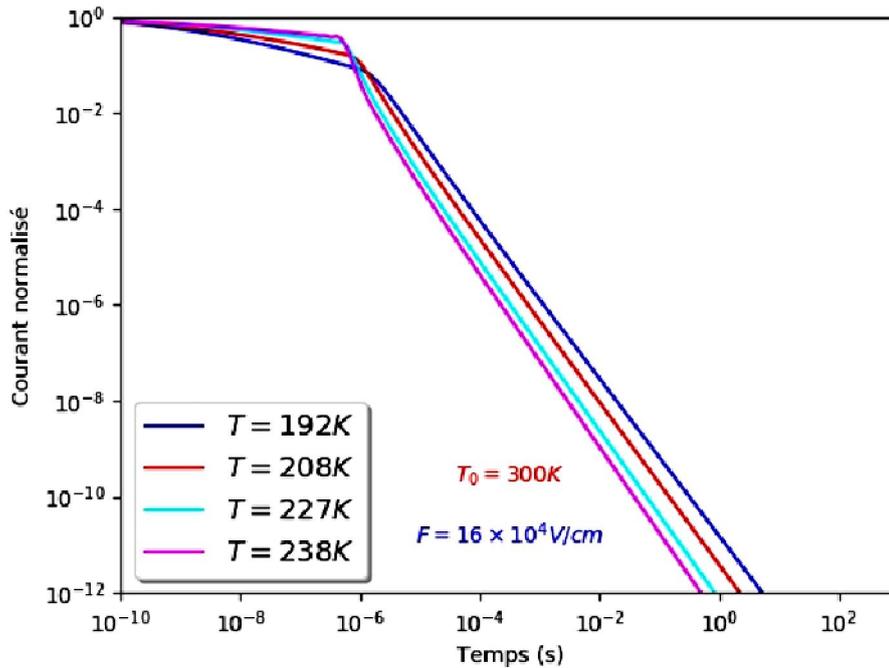


Figure III.5: Courant simulé de TOF des trous dans a- Se stabilisé à différentes températures pour un champ $F=16 \times 10^4 \text{ V/cm}$

III-3 Simulation de la mobilité des trous:

L'objectif de cette partie est d'estimer la mobilité des trous dans les deux échantillons de sélénium amorphe dopée avec deux concentrations différentes d'arsenic: a- Se: 0.2at/As et 0.5at/As. La méthode suivie est largement connue dans la littérature et repose sur la détermination du temps transit à partir des courants du temps de vol simulés pour un choix de température et de champ utilisés dans des études expérimentales précédentes.

Le temps transit représente temps nécessaire pour travers le centre de gravité de l'échantillon par les porteurs de charge. En pratique, il est défini comme le «genou» des formes linéaires du courant de temps de vol. En utilisant la définition en haut, nous calculons la mobilité d'entraînement en variant la température et le champ. Nous signalons que les résultats du calcul sont obtenus à partir du modèle de la densité des états localisés reporté par les auteurs de la référence [56].

III-4 L'étude théorique sur la dépendance en champ électrique et en température de la mobilité des trous par la technique du temps de vol (TOF) dans a- Se stabilisé:

Partant des courants du temps de vol simulés, nous cherchons le point maximum juste avant la queue. Une fois le temps de transit est déterminé, la mobilité du transporteur peut être trouvée à partir de la relation en haut. Tous les calculs dans ce travail ont été effectués de cette manière. Les valeurs de la mobilité des trous dans les deux échantillons pour différents valeurs de champs et températures sont résumés dans le tableau ci-dessous:

V	50	150	300	500	800
F	10^4	3×10^4	6×10^4	10×10^4	16×10^4
$\mu(T=192K)$	0.00125	0.001667	0.002381	0.003165	0.004085
$\mu(T=208K)$	0.003876	0.00463	0.005952	0.007937	0.012
$\mu(T=227K)$	0.013	0.016	0.017	0.02	0.024
$\mu(T=238K)$	0.024	0.025	0.028	0.031	0.037

Tableau III.2 la mobilité des trous dans a-Se stabilisé.

Il est possible d'associer une variation de la mobilité des trous en fonction de la température. Pour comprendre cet effet, nous proposons de tracer $\log \mu$ en fonction de l'inverse de la température pour chaque valeur du champ comme le montre les Figure (3.6-3.11).

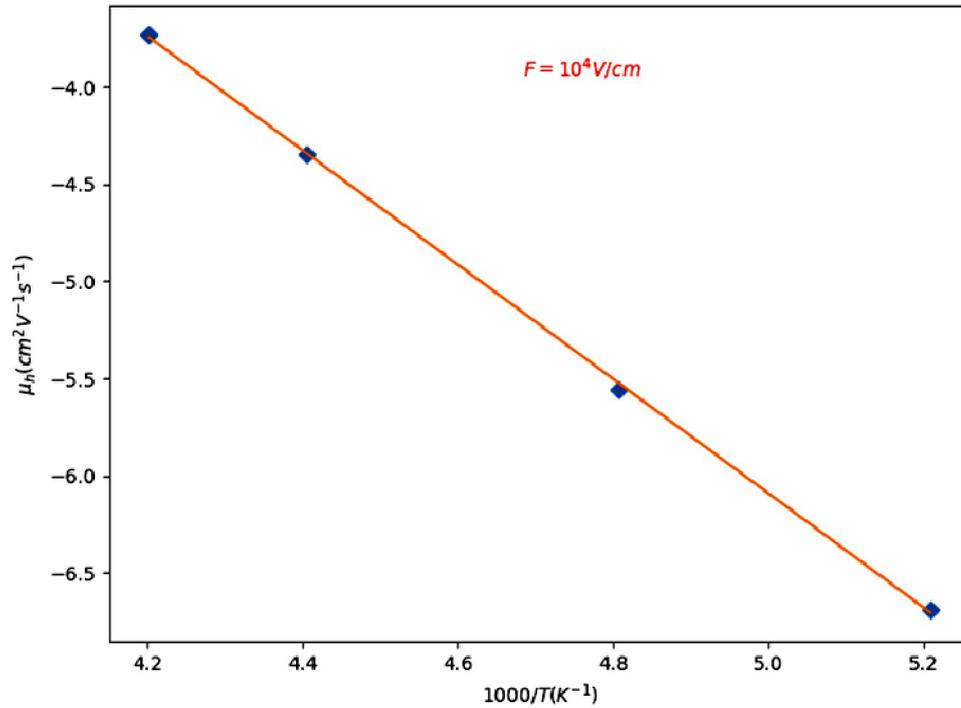


Figure III.6: Mobilité des trous en fonction de T^{-1} dans a-Se stabilisé pour un champ $F=10^4 \text{V/cm}$

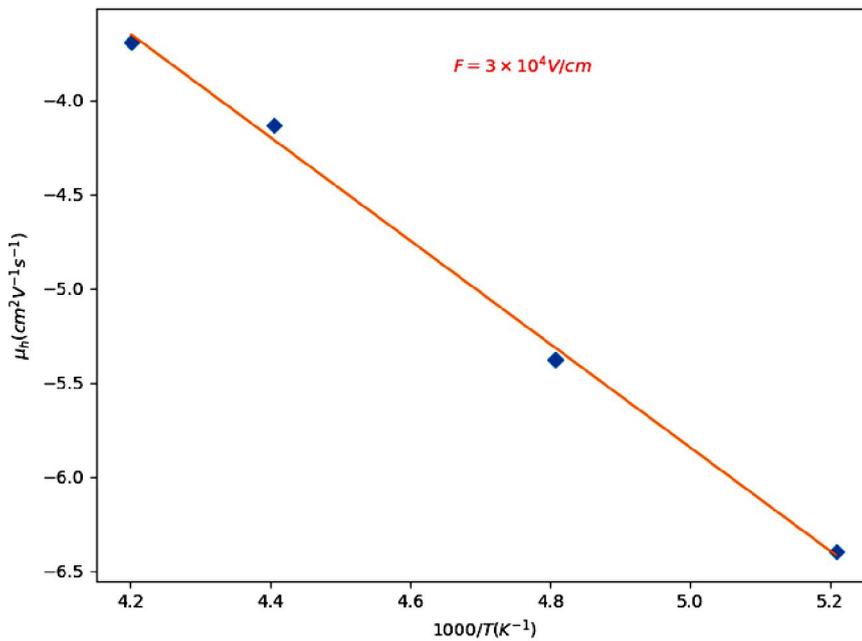


Figure III.7: Mobilité des trous en fonction de T^{-1} dans a-Se stabilisé pour un champ $F=3 \times 10^4 \text{V/cm}$

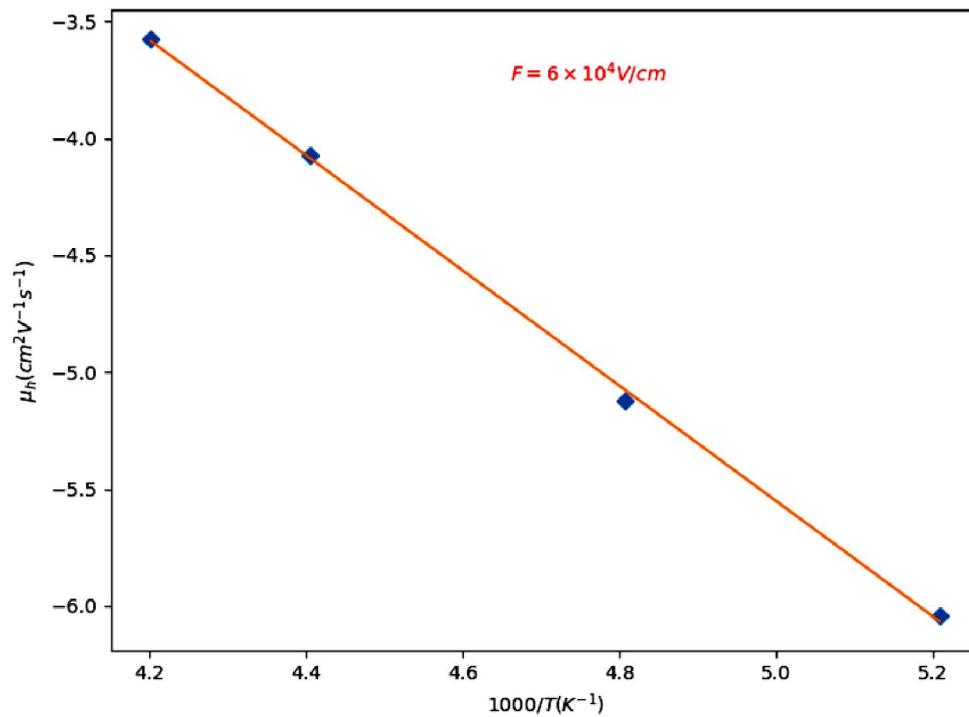


Figure III.7: Mobilité des trous en fonction de T^{-1} dans a-Se stabilisé pour un champ $F=6 \times 10^4 \text{V/cm}$

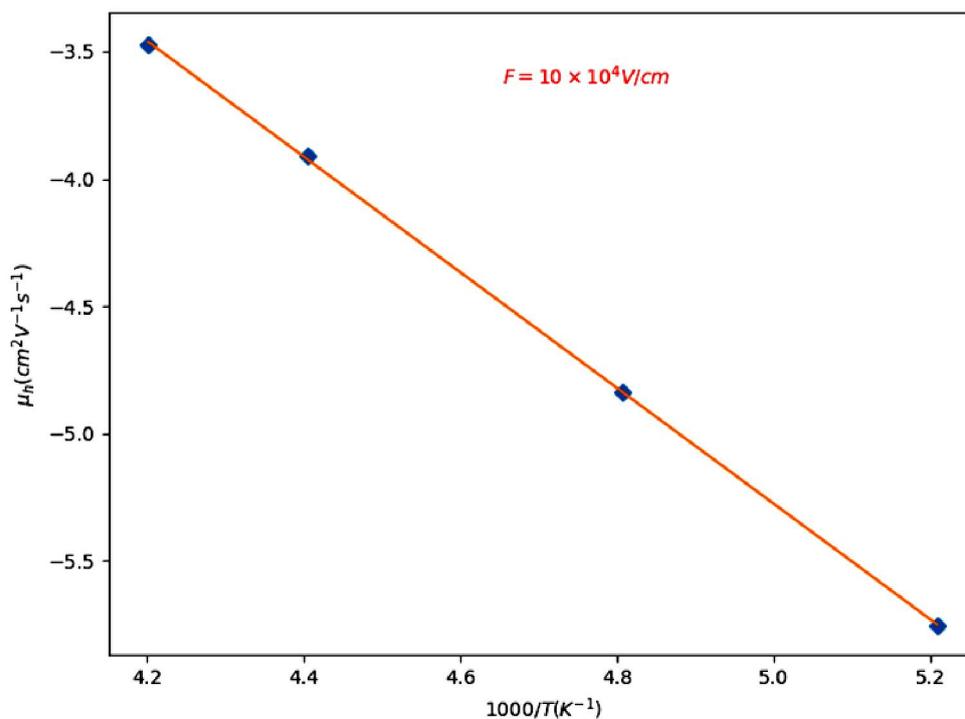


Figure III.9: Mobilité des trous en fonction de T^{-1} dans a-Se stabilisé pour un champ $F=10 \times 10^4 \text{V/cm}$

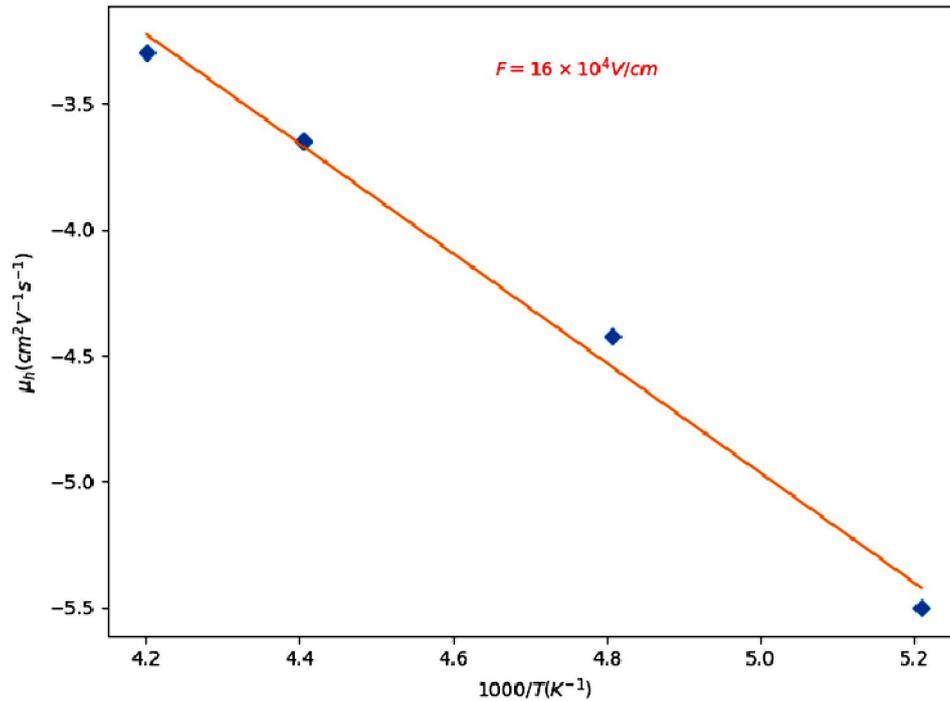


Figure III.8: Mobilité des trous en fonction de T^{-1} dans a-Se stabilisé pour un champ $F=16 \times 10^4 \text{ V/cm}$

Les Figure en haut montrent une dépendance exponentielle, indiquée par des lignes droites pour le meilleur ajustement. Les lignes tracées de $\log \mu$ en fonction de l'inverse de la température permet de trouver une dépendance de l'énergie d'activation de la mobilité des trous du champ appliqué. Les valeurs trouvées sont résumées dans le tableau suivant.

V	50	150	300	500	800
FV /cm	10^4	3×10^4	6×10^4	10×10^4	16×10^4
E_μ (e v)	0.254	0.237	0.213	0.196	0.185

Tableau III.3 L'énergie d'activation de la mobilité des trous dans a- Se stabilisé.

En ce qui concerne la dépendance de la mobilité du champ électrique, les Figure (3.6-3.10) de $\log \mu$ sont tracées en fonction du champ. Pour clarifier cette la variation, nous pouvons aussi tracer la variation de l'énergie d'activation en fonction du champ électrique. La Figure (3.12) est obtenue à partir des résultats donnés dans le tableau ci-dessus.

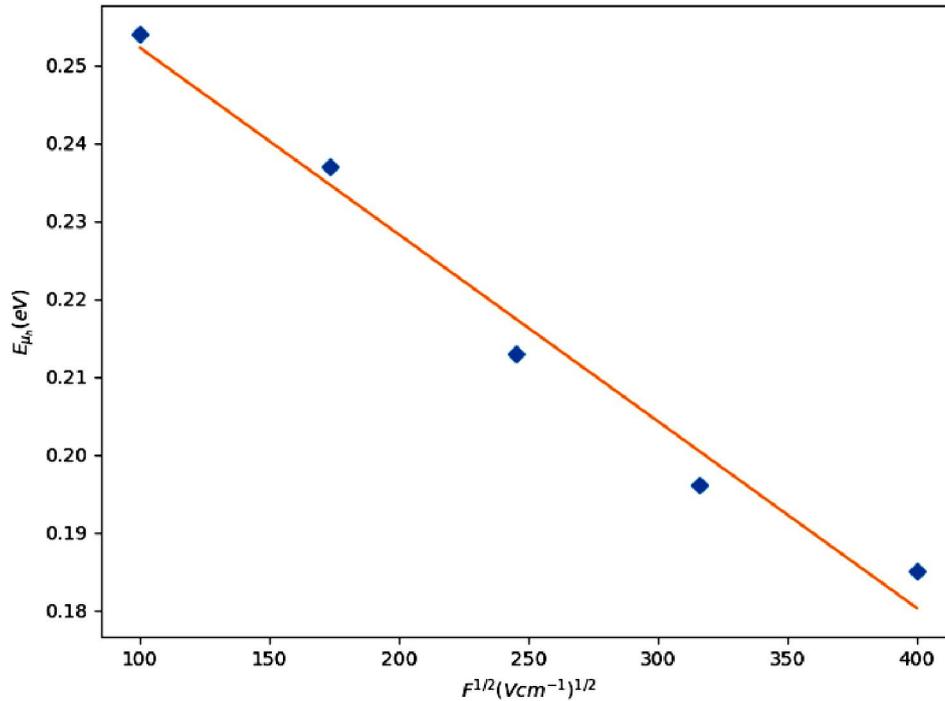


Figure III.9: Ajustement d'Arrhenius de l'énergie d'activation en fonction du champ

III-5 Discussion des résultats:

Les résultats de la simulation de la mobilité des trous montrent une dépendance de ce paramètre de la température. La dépendance de ces valeurs en T^{-1} est bien approximée par une relation linéaire. Les courbes d'Arrhenius de la mobilité montrent clairement que la température influence les valeurs de μ . Pour les températures allant de 192K à 238K, la mobilité augmente avec la température, ce qui concorde parfaitement avec l'étude de Kasap et al [57]. A partir des régressions linéaires des données de $\log \mu$ en fonction de $1/T$, les énergies d'activation estimées de la pente des régions linéaire sont récapitulées dans le tableau (III.3). Les valeurs trouvées sont en accord parfait avec l'étude de Kasap et al [58]. D'après ce tableau la grande valeur du coefficient de corrélation indique que la mobilité des trous dans les deux échantillons étudiés suit une dépendance exponentielle. L'étude de la variation de ce paramètre de transport en fonction du champ pour différentes températures, donne des énergies qui varient en fonction du champ appliqué. Cette dépendance est une manifestation de l'effet Poole-Fränkel par lequel, dans des

Chapitre III: Simulation de la mobilité de trous dans a- Se dopé

matériaux suffisamment isolants, le champ électrique appliqué abaisse la barrière potentielle pour permettre à une charge d'échapper d'un piège. L'énergie de la barrière change selon $E_{\text{barrière}} = eF \cdot d = 2 \cdot 10^{-8} \cdot F$;

En ajustant cette dépendance à la relation de Pool-Frenkel, la Figure (III.11) montre que la loi $F^{1/2}$ est respectée. La pente de la dépendance en champ donne un coefficient de Pool-Frenkel $B_{\text{theo}} = 2.4 \times 10^{-4}$ et une énergie d'activation à zéro champ de l'ordre de 0.28 eV. Les valeurs de l'énergie d'activation diminuent avec le champ.

Il est intéressant de noter que des valeurs comparables de la variation de l'énergie d'activation en fonction du champ appliqué sont atteintes à partir des études expérimentales données dans la littérature. Selon Marshall [59], l'énergie d'activation des trous à des

Températures inférieure à 250K est de l'ordre de $E_{\mu} = 0.28 \pm 0.02$ eV. La dépendance en température de la mobilité des trous pour un champ $F = 1.9 \times 10^4$ V/cm Pour le sélénium stabilisé a donné une d'activation $E_{\mu} = 0.21$ eV qui coïncide avec la valeur trouvée dans ce travail. La constante de Poole- Frenkel B_{theo} tirée de la même Figure est en accord avec le cas non dopé de a-Se [60]. La valeur déduite à partir de cette dernière étude est $B_{\text{exp}} = 2.7 \times 10^{-4}$. On note que cette dernière étude favorise le modèle non monotone de la distribution des états localisés du côté de la bande de valence.

D'après les valeurs du tableau, la mobilité des trous est du même ordre de grandeur du cas non dopé et ne change pas dans les deux cas de dopage discutés dans cette étude. A partir de ces résultats, nous pouvons dire que le dopage du sélénium avec des petites quantités d'arsenic n'affecte pas la mobilité des trous. Cette conclusion est appuyée par des études antérieures sur le transport dans le sélénium dopé. Selon les mesures expérimentales, le dopage avec l'arsenic et le clore n'affecte pas la mobilité des trous. Cette étude montre que le dopage avec l'arsenic affecte la gamme des trous. Montre le résultat expérimental sur l'étude de transport des charges dans le sélénium amorphe stabilisé. D'un autre côté, à partir de l'étude publiée sur la simulation de la durée de vie des trous [61], le dopage avec l'arsenic diminue ce paramètre de transport. L'association de ce résultat avec la valeur simulée dans ce travail implique que Le produit $\mu\tau$ diminue avec l'ajout de l'arsenic. Cette conclusion est en bon accord avec les mesures expérimentales [62]

Chapitre III: Simulation de la mobilité de trous dans a- Se dopé

Les Figure (II.6) et (II.7) illustrent la même dépendance en champ électrique de la mobilité. Le même comportement Poole-Frenkel est observé avec un coefficient qui diminue lorsque la température augmente.

III-6 Conclusion:

Le modèle de densité proposé pour le sélénium amorphe stabilisé nous a permis de simuler les courants de TOF des trous dans ce matériau avec deux concentrations différentes. Nous avons aussi trouvé une dépendance en racine de F de la mobilité et sa dépendance thermique. Les valeurs trouvées confirment le modèle non monotone de la distribution de la densité des états localisés du côté de la bande de valence.

Conclusion général

Conclusion général

Conclusion général

Dans cette étude, nous suivrons une méthode qui permet de simuler la mobilité de trous dans le sélénium amorphe stabilisé dopé par l'arsenic afin de prouver la théorie selon laquelle la distribution de densité d'états à proche de bande de valence est une fonction exponentielle et logarithmique. Et pour cela, nous suivons les étapes suivantes: nous avons Calculé des photo courants transitoires dans le cadre de la technique de (TOF), et tracé les courbes de Courant simulé de((TOF)des trous dans a-Se stabilisé à différentes température et champs pour l'extraction Le temps transit qui utilisé pour calculé la mobilité, ainsi tracé les courbe de la Mobilité des trous en fonction de T^{-1} à différentes champ pour trouver une dépendance de l'énergie d'activation de la mobilité des trous du champ appliqué.

Nous pouvons obtenir les résultats suivants:

- ✓ La mobilité montre clairement que la température influence les valeurs de μ .
- ✓ La mobilité augmente avec la température.
- ✓ La mobilité des trous dans les deux échantillons étudiés suit une dépendance exponentielle.
- ✓ La mobilité des trous est du même ordre de grandeur du cas non dopé et ne change pas dans les deux cas de dopage discutés.
- ✓ Le dopage du sélénium avec des petites quantités d'arsenic n'affecte pas la mobilité des trous.
- ✓ Le dopage avec l'arsenic affecte la gamme des trous.
- ✓ Le dopage avec l'arsenic diminue le paramètre de transport.
- ✓ Le produit μ diminue avec l'ajout de l'arsenic.
- ✓ Les résultats obtenus de simulation sont en bon accord avec l'expérience ce qui favorise le modèle non monotone de la distribution des états localisés au-dessus de la bande de valence et éliminent la possibilité de la forme exponentielle.

Bibliographies

Bibliographies

Bibliographies

- [1] G.P. Pfister and M. Scher. *Adv. Phys.* 27, 747 (1978).
- [2] J.M. Marshall, *Rep. Prog. Phys.* 46, 1235 (1983).
- [3] C. Koughia, Z. Shakoor, S. Kasap, J. Marshall, *J. Appl. Phys.* 97, 033706 (2005).
- [4] M. L. Benkhedir, M. S. Aida, and G. J. Adriaenssens, *J. Non-Cryst.Solids* .344,193 (2004) .
- [5] C. Koughia, Z. Shakoor, S. Kasap, J. Marshall. *Appl. Phys.* 87, 03340 (2004).
- [6] F. Serdouk and M. L. Benkhedir, *Physica B* 459,122 (2015).
- [7] M. L. Benkhedir, M. Brinza, G. J. Adriaenssens and C. Main, *J. Phys. Condens. Matter.*
20, 215202(2008).
- [8] F. Serdouk and M. L. Benkhedir, *Physica. B:cond.Mat.* 459 ,122 (2015).
- [9] [S. Kasap, *C. 26*, 4644 (2015) et l'article C. Koughia, A. Reznik, C. Allen, R. Johanson, S .Kasap, *Phys. Status Solidi A* .213, 1856 (2016).]
- [10] F .Serdouk and M. L. Benkhedir, *Acta Physica Polonica.A.* 134 (1), (2018).
- [11] A.F. Gourgues.Lorenzon, j.M. Haudin, Presses des mines, Matériaux pour l'ingénieur.
- [12] AH.Souici, cours de physique des semi-conducteurs, Université de Bejaia.
Laboratoire de Physico-chimie des Matériaux et Catalyse. 2013-2014.
- [13] A.BAILLY, Agrégation physique-Chimie option physique-cours chimie.
- [14] M. Narimen , S.hadjer, thèse de master, Université Larbi Tébessa, Tébessa, (Algérie) 2017.
- [15] H. Sofiane, Thèse de Magister, Université d'Oran es-seina, Oran, (Algérie).
- [16] M. Haelterman, (Phys.233), Service d'optique et d'acoustique, Faculté des sciences Appliquées, Université Libre de Bruxelles.

Bibliographies

- [17] S. fadila, thèse de Doctorat, Université Badji Mokhtar, Annaba(Algérie) 2015.
- [18] B.S Djamila, Thèse de magister, Université des sciences et de technologie houari Boumediene, faculté de physique 2009.
- [19] N. F. Mott , Adv. Phys. 16, 49 (1967).
- [20] H. Brodsky, Amorphous semiconductors, Springer-Verlag, New York, (1979).
- [21] M .H Cohen .H Fritzsche and S .R Ovshinski .Simple band model for amorphous.
- [22] J. M. Marshall and A. E. Owen, Philos. Mag. 24, 1281. (1971).
- [23] A. Chovet and p. Masson, physique de semi-conducteur, Ecole polytechnique, Universitaire de Marseille.
- [24] H. Gueddouche, Thèse de Master, Université Larbi Tébessa, Tébessa, (Algérie) 2016
- [25] M. L. Benkheldir, Defects levels in the amorphous sélénium bandgap, Katholic, Université Leuven, Belgium, (2006).
- [26] R.N. Hall, phys. Rev. 87.387 (1952).
- [27] S.Abdelali, Thèse de magister, Université mentori de Constantine, Constantine, (Algérie) 2007.
- [28] C. Hanane, M. khaoula, thèse de master, Université Larbi Tébessa, Tébessa, (Algérie) 2019.
- [30] N.F. Mott.adv. Physiol.Educ. 16.49 (1967).
- [31] A. Nwachuku and M. Kuhn, Appl. phys. Lett. 12,163 (1968).
- [32] H. Naito and M. okuda1, j.Appl. Phys. 77,3541 (1995).
- [33] S. fadila, Thèse de Doctorat, Université Badji Mokhtar, Annaba(Algérie) 2015.
- [34] S.O. Kasap and J.A. Rowlands, J. Mater.Sci.Mater. Electron.11, 179 (2000).

Bibliographies

- [35] M. Abkowitz, *Philos. Mag. Lett.* **58**, 53 (1988).
- [36] H. Z. Song, G. J. Adriaenssens, E. V. Emelianova and V. I. Arkhipov, *Phys. Rev. B.* **59**, 10610 (1999).
- [37] N. Qamhieh, M. L. Benkhedir, M. Brinza, J. Willekens and G. J. Adriaenssens, *J. Phys. Condens. Matter.***16**, 3827 (2004).
- [38] M. L. Benkhedir, M. S. Aida, N. Qamhieh, A. Stesmans and G. J. Adriaenssens, *J. Optoelectron. Adv. Mater.***7**, 329 (2005).
- [39] M. L. Benkhedir, M. Brinza, J. Willekens, K. Haenena, M. Daenena, M. Nesladeka and G. J. Adriaenssens, *J. Optoelectron. Adv. Mater.***7**, 2223 (2005).
- [40] N. Qamhieh, J. Willekens, M. Brinza and G. J. Adriaenssens, *J. Phys.: Condens. Matter.* **15**, L631 (2003).
- [41] N. Qamhieh, M. L. Benkhedir, M. Brinza and G. J. Adriaenssens, *J. Optoelectron. Adv. Mater.*, 1781 (2005).
- [42] M. L. Benkhedir, M. Brinza and G. J. Adriaenssens, *J. Phys.: Condens. Matter* . 16,5253 (2004).
- [43] T. E. Orlowski and M. Abkowitz, *J. Non-Cryst. Solids.* 77, 439 (1985).
- [44] C. Koughia, Z. Shakoor, S. O. Kasap and J. Marshall, *J. Appl. Phys.* 97, 033706 (2005).
- [45] E. Emelianova, M. Benkhedir, M. Brinza and G. Adriaenssens, *J. Appl. Phys.* 99, 083702 (2006).
- [46] M. L. Benkhedir, M. Brinza G. J. Adriaenssens, and C. Main *J. Phys.: Condens. Matter* . 20, 215202 (2008).
- [47] C. Main, R. Bruggemann, D.P. Webb and S. Reynolds, *Solid State Commun.* 83, 401 (1992).
- [48] H. Naito, J. Ding and M. Okuda, *Appl. Phys. Lett.* 64, 1830 (1994).
- [49] J. M. Marshall, *J. Non-Cryst. Solids.* 77, 564 (1985).

Bibliographies

- [50] T. Nagase, K. Kishimoto and *H.Naito*, *J.Appl. Phys.* 86, 5026 (1999).
- [51] J. M. Marshall and C. Main, *NATO Science for Peace and Security Series B: Physics and Biophysics*, 2009,49.
- [52] N. Ogawa, T. Nagase and H. Naito, *J. Non-Cryst.Solids.* 367, 266 (2000).
- [53] G .P . Pfister and M. Scher, *Adv. Phys.* 27, 747 (1978).
- [54] J.Kočka, end Marshall J.M, Kirov N. Vavrek A. Electronic and Optoelectronic Materials for the 21st Century.
- [55] *H. Chorfi and K .Menasseur, Mémoire de Master, Université de Tébessa, (Algérie) 2019.*
- [56] C. Koughia, A. Reznik, C. Allen, R. Johanson, S. Kasap, *Phys. Status Solidi A* 213, 1856 (2016).
- [57] F. Serdouk and M. L. Benkhedir, *Physica B* 459 ,122 (2015).
- [58] B. Fogal and S. Kasap, *Can. J.Phys.* 92,634 (2014).
- [59] J. M. Marshall and A. E. Owen, *Phys. Status Solidi A*12(1972).
- [60] M. L. Benkhedir, M. S. Aida, and G. J. Adriaenssens, *J. Non-Cryst.Solids* .344, 193 (2004)
- [61] F. Serdouk and M. L. Benkhedir, *Acta Physica Polonica.A.* 134 (1), (2018).
- [62] S. O. Kasap and C. Juhasz, *J.Phys. D:Appl.phys.*18, 703 (1985).