



République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université Echahid Cheikh Larbi Tebessi -Tebessa-
Faculté des Sciences Exactes et des Sciences de la Nature et de la Vie



Département : Sciences de la matière
Filière : Physique
Option: Physique de la matière condensée

Thèse
Présentée en vue de l'obtention du diplôme de
doctorat LMD
Thème

***Etude du transport dans les semi-conducteurs amorphes
en présence de la diffusion dans le cadre du modèle de
conduction par piégeage multiple.***

Soumise par
Goutal Yazid

Devant le jury:

Pr. Chemam Faïçal

PRESIDENT

*Université Echahid Cheikh Larbi
Tebessi -Tébessa-*

Dr. Serdouk Fadila

DIRECTEUR DE THESE

*Université Echahid Cheikh Larbi
Tebessi -Tébessa-*

Pr. Benkhedir Mohammed Loutfi

CO-DIRECTEUR DE THESE

*Université Echahid Cheikh Larbi
Tebessi -Tébessa-*

Pr. Bouguerra Abdesselam

EXAMINATEUR

*Université Mohamed-Chérif Messaadia
-Souk Ahras-*

Pr. Chaouche Yacine

EXAMINATEUR

*Université Echahid Cheikh Larbi
Tebessi -Tébessa-*

Date de soutenance:

© *Thèse effectuée au*

laboratoire de physique appliquée et théorique



Étude du transport dans les semi-conducteurs amorphes en présence de la diffusion dans le cadre du modèle de conduction par piégeage multiple.

Goutal Yazid

Remerciement

Nous remercierons tout d'abord Dieu le grand puissant qui nous a éclairé le chemin pour réaliser ce modeste travail.

J'adresse mes remerciements tous particuliers à Madame Serdouk Fadila, maitre de conférence A à l'Université de Tebessa pour avoir accepté de diriger cette thèse et m'avoir confié le sujet de recherche très attrayant et je tiens à lui exprimer toute ma reconnaissance pour l'intérêt qu'il a porté à ce travail. Merci pour ces conseils, et pour les mots d'encouragement et de soutien, mais aussi pour avoir eu confiance en moi aux moments difficiles.

*Je remercie vivement Monsieur **Benkhedir Mohammed Loutfi**, Professeur à l'Université Echahid Cheikh Larbi Tebessi pour la confiance qu'il m'a accordée en tant que co-encadrant de cette thèse.*

*Nous adressons nos sincères remerciements à Monsieur **Chemam Fayçal**, Professeur à l'Université Echahid Cheikh Larbi Tebessi -Tebessa-, de nous avoir fait l'honneur de présider le jury.*

*Nous remercierons Monsieur **Bouguerra Abdesselam**, Professeur à l'Université Mohamed-Chérif Messaadi-Souk Ahras-, de nous avoir fait l'honneur en acceptant d'examiner notre travail.*

*Je tiens à exprimer mes remerciements respectueux envers Monsieur **Chaouche Yacine**, Professeur à l'Université Echahid Cheikh Larbi Tebessi -Tebessa-, d'avoir accepté de participer à ce jury de thèse et de juger ce travail.*

*Je tiens à remercier Monsieur **Boumali Abdelmalek**, Professeur à l'Université Echahid Cheikh Larbi Tebessi, pour son aide précieuse à toutes les étapes de la préparation de mes recherches. Il n'a lésiné sur aucune information. Je le remercie du fond du cœur*

*Je tiens à remercier de tout mon cœur **ma famille**, particulièrement ma **Mère et mon père**. Je veux souligner que tout mon travail n'aurait pas été possible sans la patience de ma petite famille face à mes nombreuses soirées passées à travailler sur cette thèse. Enfin, j'adresse toute ma reconnaissance aux personnes qui, de près ou de loin m'ont aidé à l'accomplissement de ce travail.*

المخلص

يُقَدِّم هذا العمل امتداداً كسرياً لنموذج النقل بالاحتجاز المتعدد المطبق على أشباه الموصلات اللابلورية، بحيث تُدمج الذاكرة الزمنية في معادلات النقل عبر مشتق من الرتبة α لإيجاد التيارات الكهروضوئية في مجال لابلاس لتشكيلتي زمن الطيران الطولية (L-TOF) والعرضية (T-TOF)، يليها قلب عددي مستقر للتغير الزمني للتيارات الضوئية. تم أيضاً دراسة تأثير الانتشار في هاتين الهندستين. تُعيد النتائج العددية انتاج السلوكيات المنتظرة على هيئة قوانين قوى قبل العبور وبعده بدقة، وتربط نقطة الانعطاف إما بزمن العبور أو بزمن الحياة حسب تغيرها بدلالة المجال الكهربائي. يظهر معامل التشتت α مؤشراً لدرجة اللاترتيب البنيوي: إذ تدل القيم المنخفضة على نقل مبدد تهيمن عليه آليات الاحتجاز، بينما تشير القيم القريبة من الواحد إلى سلوك شبه أومي، مع توقعات تيار متسقة مع قوانين القوى المتوقعة في كلا النظامين، بما في ذلك التناقص ما بعد العبور الذي تعجز النماذج التقليدية عن تمثيله بدقة. تلتقط المحاكاة بدقة تأثير المجال الكهربائي وزمن الحياة τ والبنية الهندسية على موضع الانعطاف وديناميكا التيار، ويؤكد التطابق مع القياسات التجريبية للناقلية الضوئية العابرة على السلينيوم غير المتبلور صلاحية النموذج، مما يسمح بإيجاد حركية حوامل الشحنة، وزمن الحياة، والمعامل α ، ويفتح مساراً عملياً لتحسين الأجهزة المعتمدة على مواد غير متبلورة عبر تمثيل صريح لآثار الذاكرة غير المحلية.

الكلمات المفتاحية: أشباه الموصلات غير المتبلورة؛ نموذج الاحتجاز المتعدد الكسري؛ النقل المبدد؛ الناقلية الضوئية العابرة ؛ تحويل لابلاس العكسي.

Abstract

This work proposes a fractional extension of the multiple-trapping conduction model for amorphous semiconductors, in which the transport equations incorporate temporal memory via a derivative of order α and admit analytical solutions in the Laplace domain for longitudinal (L-TOF) and transverse (T-TOF) time-of-flight configurations, followed by stable time-domain reconstructions through numerical inversion. The influence of diffusion was also studied in both geometries. collectively, this framework faithfully reproduces the pre- and post-transit power-law behaviors and links the inflection either to the transit time or to the recombination time depending on its dependence on the electric field.

The dispersion parameter α emerges as a robust indicator of structural disorder: low values indicate subdiffusive transport dominated by trapping, whereas values approaching unity correspond to quasi-ohmic behavior, with current signatures consistent with the expected power laws in both regimes, including the post-transient decay that is poorly captured by classical models.

The simulations accurately capture the influence of field strength, carrier lifetime τ , and geometry on the inflection and current dynamics, and the quantitative agreement with TOF measurements on amorphous selenium validates the approach and enables reliable extraction of mobility, recombination time, and the fractional parameter α , thereby providing a practical route to optimizing devices based on disordered materials through the explicit treatment of nonlocal memory effects.

Key words: Amorphous semiconductors; fractional multiple-trapping model; dispersive transport; transient photoconductivity; inverse Laplace transform.

Résumé

Ce travail propose une extension fractionnaire du modèle de conduction par piégeage multiple appliquée aux semi-conducteurs amorphes, dans laquelle les équations de transport intègrent une mémoire temporelle via une dérivée d'ordre α et admettent des solutions analytiques en domaine de Laplace pour les configurations de temps de vol longitudinales (L-TOF) et transverses (T-TOF), suivies de reconstructions temporelles stables par inversion numérique. L'influence de la diffusion a également été étudiée dans ces deux géométries. Les résultats numériques reproduisent fidèlement les lois de puissance pré- et post-transit et relie l'inflexion soit au temps de transit, soit au temps de recombinaison selon sa dépendance au champ électrique. Le paramètre de dispersion α constitue un indicateur robuste du désordre structural: des valeurs faibles traduisent un transport subdiffusif dominé par le piégeage, tandis que des valeurs proches de l'unité correspondent à un comportement quasi ohmique, avec des signatures de courant conformes aux lois de puissance attendues dans les deux régimes, y compris la décroissance post-transitoire mal décrite par les modèles classiques. Les simulations restituent correctement l'effet du champ, de la durée de vie τ et de la géométrie sur l'inflexion et la dynamique du courant, et l'accord quantitatif avec des mesures TOF sur le sélénium amorphe valide l'approche et permet d'extraire de manière fiable la mobilité, le temps de recombinaison et le paramètre α , ouvrant une voie pratique d'optimisation de dispositifs à base de matériaux désordonnés grâce à la prise en compte explicite des effets de mémoire non locale.

Mots-clés : Semi-conducteurs amorphes, modèle de piégeage multiple fractionnaire, transport dispersif, photoconductivité transitoire, transformé de Laplace inverse.

Liste des figures

Figures	Titre	Page
Chapitre 1		
Figure 1.1	Vue schématique de l'arrangement atomique dans la structure cristalline.	6
Figure 1.2	Vue schématique de l'arrangement atomique dans la structure amorphe.	8
Figure 1.3	Diagramme de bandes d'énergie d'un cristallin.	11
Figure 1.4	Diagramme de bande selon le modèle de Mott.	12
Figure 1.5	Diagramme de bande selon le modèle de C.F.O.	13
Figure 1.6	Modèle de densité d'états dans les amorphes proposé par Marshall et Owen.	13
Figure 1.7	Schématisation du mécanisme de conduction par piégeage multiple.	19
Chapitre 2		
Figure 2.1	Photoconductivité transitoire standard (TPC).	41
Figure 2.2	Configurations temps de vol (a) L-TOF conventionnel et (b) T-TOF.	42
Figure 2.3	(a) Photocourant transitoire (TPC) simulé pour une distribution exponentielle des états localisés à différentes valeurs de τ . (b) Densité des états localisés simulée à partir de la figure 2.3 (a).	48
Figure 2.4	(a) Photocourant transitoire (TPC) simulé pour une distribution gaussienne des états localisés à différentes valeurs de τ . (b) Densité des états localisés simulée à partir du la figure 2.4 (a).	49
Figure 2.5	Comparaison entre le photocourant transitoire mesuré et simulé par la méthode GWR dans a-Se :0.2at%As à différente température	52
Figure 2.6	Comparaison entre le photocourant transitoire mesuré et simulé par la méthode GWR dans a-Se :0.5 at%As à différente température.	53
Chapitre 3		
Figure 3.1	(a) Courant transitoire normalisé de TPC en fonction du temps pour différents α , (b) pour différents τ .	62
Figure 3.2	Influence de la diffusion dans les configurations L-TOF et T-TOF dans le cas d'un transport disperssif et non disperssif.	70
Figure 3.3	Photocourants transitoires L-TOF pour différentes valeurs du champ et du paramètre de désordre : (a) pour $F = 10^5 V/cm$ et α variable; (b) F variable et α fixe = 0,5 et (c) F variable et α fixe = 0,9 .	78

Figure 3.4	Photocourants transitoires T-TOF pour différentes valeurs de F , α et τ : (a) $F = 10^5 V/cm$, $\tau = 10^{-6}s$ et variable α ; (b) $\tau = 10^{-6}s$, $\alpha = 0,85$ et variable F ; (c) pour $F = 4 \times 10^5 V/cm$, $\alpha = 0,85$ et variable τ . (d) α et F fixe et L variable.	82
Figure 3.5	Comparaison entre les courants mesurés et simulés de TOF dans le sélénium amorphe.	85
Figure 3.6	Comparaison entre les photocourants transitoires L-TOF en présence et absence de la diffusion.	91
Figure 3.7	Comparaison entre les photocourants transitoires T-TOF en présence et absence de la diffusion.	92

Liste des matières

<i>ملخص</i>	i
<i>Abstract</i>	ii
<i>Résumé</i>	iii
<i>Liste des figures</i>	iv
<i>Introduction générale</i>	1
 <i>Chapitre 1 : Propriétés électroniques des semi-conducteurs amorphes</i>	
1.1 Différence entre les matériaux cristallins et amorphes.	6
1.1.1 Matériaux cristallins.	6
1.2.2 Matériaux amorphes.	7
1.2 Impact du désordre sur la distribution des états électroniques.	8
1.3 Niveaux d'énergie d'un atome isolé et d'un atome dans un cristal : bandes d'énergie.	9
1.4 Densité d'états dans les semi-conducteurs amorphes.	11
1.5 Transport électronique.	13
1.5.1 Transport électronique dans les matériaux cristallins.	13
1.5.2 Evolution de la densité de porteurs de charge.	14
1.5.3 Transport électronique dans les matériaux amorphes.	17
1.6 Mécanismes de diffusion envisageables.	19
1.7 Modèles théoriques de conduction dans les structures désordonnées.	21
1.8 Justification de l'Approche Fractionnaire dans le Modèle à Piègées Multiples	29
1.8.1 Limites du Modèle Traditionnel et Transition vers le Fractionnaire	30
1.8.2 Intégration et Enrichissement du Modèle Fractionnaire	31

Chapitre 2 : Techniques de transport et méthode de simulation

2.1	Rappel sur la transformée de Laplace	33
2.2	Mécanisme de conduction par piégeage multiple (MTM).	36
2.2.1	Cadre théorique.	37
2.3	Méthodes expérimentales.	40
2.3.1	Photoconductivité transitoire (TPC).	40
2.3.2	Technique du Temps de Vol (TOF) : principes, configurations et comparaison avec TPC.	41
2.4	Traitement analytique du signal de photocourant dans le cadre des processus de piégeage multiples.	44
2.4.1	Cas de l'expérience de photoconductivité transitoire standard (TPC).	44
2.4.2	Cas de l'expérience de photoconductivité transitoire du temps de vol.	46
2.5	Validation expérimentale de la méthode GWR appliquée au sélénium dopé par l'arsenic.	50

Chapitre 3 : Modèle de Piégeage Multiple Fractionnaire des Photocourants Transitoires dans les Semi-conducteurs Amorphes.

3.1	Modèle de piégeage multiple de la photoconductivité transitoire (TPC).	54
3.1.1	Équations de base du modèle MTM avec recombinaison.	55
3.2	Modèle de piégeage multiple fractionnaire de TPC.	57
3.2.1	Reformulation du modèle intégral.	57
3.2.2	Cas d'une densité d'états exponentielle.	58
3.2.3	Formes asymptotiques et interprétation physique.	60
3.3	Analyse des résultats simulés et discussion.	60
3.3.1	Comparaison avec la littérature et apport du modèle fractionnaire.	62
3.4	Extension à la configuration du temps de vol (TOF).	63
3.4.1	Modèle de piégeage multiple en configuration de TOF.	63

3.4.2	Résolution analytique dans le cas L-TOF en présence et absence de la diffusion.	64
3.4.3	Résolution analytique dans le cas T-TOF en présence et absence de la diffusion.	67
3.5	Résultats de simulation en présence et absences du diffusion dans les deux configuration (L-TOF ,T-TOF).	69
3.6	Modèle de piégeage multiple fractionnaire dans les conditions de l'expérience de temps de vol.	71
3.6.1	Représentation Intégrale de la Mémoire	71
3.6.2	Formulation Fractionnaire de l'Équation de Transport	73
3.6.3	Solution en Espace de Laplace et Courant de TOF	74
3.7	Simulation des photocourants transitoires par transformation de Laplace en Configuration L-TOF.	75
3.7.1	Méthodologie et paramètres physiques.	75
3.7.2	Objectif de l'analyse.	75
3.7.3	Résultats et discussion.	76
3.7.4	Confirmation expérimentale du temps de transit.	79
3.8	Simulation des photocourants transitoires par transformation de Laplace en Configuration T-TOF.	79
3.9	Détermination du Temps de Transit ou de Recombinaison.	83
3.10	Validation par Comparaison aux Données Expérimentales.	83
3.10.1	Méthodologie de comparaison.	83
3.10.2	Analyse de la concordance.	84
3.10.3	Validité du modèle et implications.	86
3.11	Prise en Compte du Terme de Diffusion dans le Modèle Fractionnaire.	86
3.11.1	Équation fractionnaire modifiée.	86
3.11.2	Solutions analytiques et expressions du courant.	87
3.11.3	Courants simulés en présence de la diffusion.	88
	<i>Conclusion générale</i>	93
	<i>Références</i>	96

Introduction générale

Depuis le début des années 1970, il est reconnu que le transport des porteurs de charge dans les semi-conducteurs amorphes présente un degré élevé de dispersion anormal. Ce phénomène se manifeste principalement à travers la réponse phototransitoire observée après une brève excitation lumineuse pour la création des porteurs de charge. Au départ, les recherches se sont concentrées sur les origines fondamentales de ce comportement, fortement influencées par les travaux de Scher et Montroll [1]. Ces dernières ont proposé un modèle fondé sur le transport des porteurs par saut entre des sites isoénergétiques répartis de manière aléatoire dans l'espace, un mécanisme connu sous le nom de « r-hopping » (saut en fonction de la distance). L'analyse des caractéristiques de transport liées à ce processus s'est révélée être un problème théorique complexe, et aucune solution exacte trouvée. Les approches existantes impliquent l'introduction d'hypothèses simplificatrices, dont la validité demeure une source de controverse constante.

Des études ultérieures ont montré que ce comportement est lié à l'interaction des porteurs avec des états localisés présentant une large gamme de temps de libération. En particulier, Schmidlin [2] a proposé que ce transport dispersif anormal implique l'existence d'un grand nombre d'états dont les constantes de temps de libération sont comparables au temps écoulé depuis la génération initiale des porteurs. De son côté, Pollak [3] a démontré que les centres capables de piéger les porteurs pendant de longues périodes doivent rester relativement accessibles. Cette affirmation a suscité des débats quant aux mécanismes de transport susceptibles de répondre à ces critères. En particulier, le transport par saut continue de faire l'objet de discussions. Cependant, le transport par piégeage est généralement accepté comme une explication plausible. Ce mécanisme de transport adopté par Schmidlin et Noolandi [2,4] qui ont réalisé des analyses théoriques sur des systèmes modèles. Il est rapidement apparu, pour que ce mécanisme de transport produise une dispersion anormale, il suffisait que les états localisés soient répartis sur une plage d'énergie suffisamment large. Noolandi [4] a réussi à résoudre les équations de la variation de la densité de charge libres et piégés en utilisant la technique de la transformée de Laplace. Par cette méthode, il a pu obtenir de manière directe une expression de la transformée du photocourant.

L'importance de cette équation réside dans le fait qu'elle est identique, dans sa forme, à une équation équivalente obtenue par Scher et Montroll [1] à un stade similaire de l'analyse

de la marche aléatoire en temps continu (Continuous Time Random Walk, CTRW). Cette correspondance a été davantage établie par les travaux de Schmidlin et de Noolandi [2,4].

Cependant, d'un point de vue pratique, l'équation d'écrivant la transformé de Laplace du courant nécessite une évaluation numérique, faisant appel à des tables de transformées de Laplace inverses. Des méthodes similaires sont également requises dans l'analyse plus générale proposée par Schmidlin [2]. Dans les deux cas, la dispersion associée au mécanisme de piégeage multiple a été étudiée de manière approfondie en considérant plusieurs ensembles discrets de pièges. Schmidlin et Noolandi [2,4] ont démontré qu'une dispersion anormale, semblable à celle démontrée dans les mesures du courant transitoire des trous dans $\alpha\text{-As}_2\text{Se}_3$, pouvait être obtenue avec trois ensembles de pièges ou plus. Ces ensembles de pièges devaient présenter une large gamme de coefficients de libération, de sorte que la distribution globale des probabilités de libération soit suffisamment étalée dans le temps dépassant même le temps de transit des porteurs les plus rapides.

Schmidlin [2] a proposé un critère de piégeage pour expliquer l'apparition de la dispersion anormale. Selon ce critère, un ensemble d'états localisés (ou pièges) doit être présent avec une concentration suffisante pour satisfaire deux conditions essentielles : la première est que le porteur doit avoir une grande probabilité d'être piégé dans cet ensemble au moins une fois au cours de son transit. La deuxième est que le temps de libération associée aux pièges de cet ensemble doit être comparable au temps de transit. Suite à cette phase, l'attention s'est progressivement tournée vers l'idée que le phénomène de dispersion anormale pourrait constituer un outil d'analyse permettant d'accéder à des informations détaillées sur les états localisés présents dans les matériaux étudiés.

Dans le cadre du mécanisme de transport piégeage multiple, sur lequel s'est concentrée la grande majorité des recherches, la décroissance du photocourant reflète la distribution énergétique des états localisés avec lesquels interagissent les porteurs initialement libres. En disposant d'une technique d'interprétation fiable, il devrait être possible de déterminer non seulement cette distribution, mais aussi d'autres caractéristiques plus fines telles que les sections efficaces de capture, etc. Malheureusement, la décroissance du photocourant est une fonction assez complexe de la distribution des états localisés. et les techniques spectroscopiques développées, tendent soit à refléter cette complexité ou reposent sur des hypothèses et approximations discutables, limitant ainsi la précision des informations extraites.

En particulier, une densité d'états de type exponentiel conduit à une décroissance en loi de puissance du courant en fonction du temps. En revanche, la présence de structures supplémentaires dans la densité d'états peut entraîner des écarts significatifs par rapport à ce

comportement [5]. Dans le régime pré-transit de la réponse en phototransitoire, une procédure simple a été proposée pour interpréter des données expérimentales appropriées. Cette méthode s'est révélée efficace dans le cas d'une densité d'états localisés purement exponentielle. Cependant, lorsqu'il s'agit de distributions énergétiques plus complexes, il a été démontré que cette procédure sous-estime la position énergétique de la composante gaussienne, notamment lorsque la hauteur du pic devient comparable ou inférieure à la distribution exponentielle. Par contre la procédure post-transit constitue un outil efficace pour révéler la densité des états localisés, quel que soit le degré de structure qu'elle présente.

Une alternative ultérieure aux techniques analytiques précédentes, consisté à appliquer une transformation de Fourier aux mesures du courant en fonction du temps, afin de les transposer dans le domaine fréquentiel. L'utilisation de ces transformations demeurent largement utilisée dans de nombreuses études expérimentales et théorique car elles permet d'obtenir non seulement la position des pièges, mais également une image de la densité des états localisées.

Dans cette optique L'applicabilité de la méthode de la transformée de Laplace est montrée expérimentalement sur les échantillons du sélénium amorphe pur et dopé avec l'arsenic. L'exploitation des détails fins des spectres de la densité d'états, a permis d'obtenir des renseignements précieux sur le comportement des matériaux en cause et a répondu à la question de longue date posée dans la littérature concernant la diminution de la durée de vie dans a-Se par l'effet de dopage avec l'arsenic [6]. L'introduction de ce modèle a conduit le groupe de Koughia à réexaminer leur distribution de densité d'états, en soulignant que la présence de pics observés dans cette dernière étude pourrait être attribuée au phénomène de diffusion, bien connu dans les expériences de photoconductivité transitoire [7,8].

Dans le cadre de cette étude, nous proposons une nouvelle approche pour l'analyse de la dispersion anormale observée dans les semi-conducteurs désordonnés. Cette approche vise à modéliser les dynamiques complexes des porteurs de charge en s'appuyant sur les outils du calcul fractionnaire, reconnu pour sa capacité à représenter des phénomènes de transport non classiques, tels que les processus de diffusion anormale et les effets mémoire caractéristiques de ces matériaux. Nous nous intéressons aux équations cinétiques d'ordre fractionnaire issues du modèle à piègeages multiples.

Conformément à cette orientation, le modèle peut être utilisé pour interpréter les équations de transport fractionnaire, formuler les conditions initiales et aux limites correspondantes, ainsi que la construction des méthodes numériques permettant de résoudre ces équations cinétiques fractionnaires. Dans une première partie, Nous commençons par

introduire notre approche permettant la simulation des photocourants transitoires du temps de vol en présence du terme d'entraînement. Nous examinons ensuite les courants transitoires obtenus dans le cadre de l'équation de diffusion couplée aux processus de piégeage multiples et de libération. Les objectifs de ce travail s'articulent autour de trois chapitres principaux.

Le premier chapitre présente de manière générale les différentes familles de l'état solide ainsi que la notion de densité des états localisés. Cette revue bibliographique constitue une base théorique essentielle à la compréhension du reste de l'étude.

Le deuxième chapitre est consacré à la description des différentes techniques expérimentales utilisées dans le cadre de nos simulations. Nous y exposons brièvement le principe de chaque méthode de caractérisation, en précisant les paramètres d'acquisition employés au cours des expériences, notamment pour les méthodes spectroscopiques.

Le troisième chapitre rassemble les résultats obtenus, accompagnés de leur analyse et de leur interprétation.

Enfin, une conclusion générale vient clore ce travail en mettant en évidence les principaux apports et les points essentiels issus de notre étude.

Chapitre 1

Propriétés électroniques des semi-conducteurs amorphes

Pendant longtemps, et certainement après le développement de la théorie moderne des bandes pour les solides cristallins, il était hors de question que les matériaux amorphes se comportent comme des semi-conducteurs. L'existence de bandes d'états énergétiques permises, des intervalles d'énergie interdits, était intrinsèquement liée à l'interaction d'une fonction d'onde électronique et d'un réseau périodique. Pour ce faire, les physiciens ne pouvaient pas imaginer que des caractéristiques similaires puissent apparaître dans des matériaux qui manquent d'ordre à longue portée. Avec du recul, tous les indices nécessaires étaient pourtant déjà présents, le comportement transparent des verres conventionnels aux ondes lumineuses longues ou encore le comportement photoconducteur de solides comme le sélénium amorphe sont de bons exemples [9]. Les verres chalcogénures présentaient le comportement semi-conducteur mise au point deux décennies plus tard [10].

En outre, la variété des applications commerciales pour ces systèmes, allant de la xérographie à la conversion de l'énergie solaire [11], a stimulé l'intérêt international pour cette discipline. Malgré tout cela, le rythme du progrès est bien inférieur à celui des matériaux semi-conducteurs cristallins. L'absence totale d'ordre à longue portée empêche en effet l'usage de concepts simplificateurs fondamentaux, tels que le théorème de Bloch. Pour les systèmes désordonnés, un cadre théorique équivalent demeure difficile à établir. Un aspect frappant, après plus d'une décennie de recherche intense, aucun solide amorphe n'a révélé sa structure en bandes et les mécanismes de transport électronique à un degré de compréhension de la certitude absolue. Ces questions restent le sujet de débat et l'analyse continue avec aucun accord clair au sein de la communauté scientifique. Outre les défis théoriques posés par la conduction électronique dans des systèmes désordonnés, les méthodes expérimentales éprouvées sur les semi-conducteurs cristallins fournissent souvent des résultats ambigus lorsqu'elles sont appliquées aux matériaux amorphes.

Malgré ces obstacles, des avancées significatives ont été réalisées, permettant désormais d'identifier certains principes généraux gouvernant le comportement des matériaux désordonnés [12]. En discutant la structure en bandes d'énergie dans les matériaux non cristallins, il est essentiel de comprendre que, dans les faits, aucun solide réel n'est complètement « amorphe » au sens strict d'une absence totale d'ordre définissable.

C'est là la clé expliquant pourquoi plusieurs propriétés physiques des semi-conducteurs cristallins persistent dans leurs homologues amorphes. En d'autres termes, bien que dépourvus d'ordre à longue portée, ces matériaux conservent plusieurs caractéristiques fondamentales des cristaux, ce qui justifie la continuité de certaines de leurs propriétés électroniques et optiques.

Avant de plonger plus profondément dans les propriétés électroniques, quelques termes doivent d'abord être expliqués et clarifiés : en quoi réside la différence de matériau cristallin et amorphe et ce qui les définit. Ces intrications fondamentales ont un impact fondamental sur leurs propriétés électroniques et physiques, et sont obligatoire avant de poursuivre une discussion sur la façon dont les deux interagissent avec les électrons.

1.1. Différence entre les matériaux cristallins et amorphes

1.1.1. Matériaux cristallins

Un solide cristallin est constitué d'un réseau tridimensionnel d'atomes reliés par des liaisons chimiques. Ces liaisons se forment lorsque deux atomes ou plus partagent leurs électrons de valence, complétant ainsi la couche externe de chaque atome adjacent. En conséquence, les fonctions d'onde de ces électrons ne sont plus confinées à un seul atome, mais s'étendent à l'ensemble du solide. Les atomes sont disposés selon un ordre périodique, formant une structure régulière qui se répète dans tout le solide. Dans ces conditions, il est possible de définir une maille élémentaire, répétée par translation dans différentes directions de l'espace. La structure globale du cristal s'obtient ainsi par la répétition de cette maille élémentaire selon des vecteurs de translation le long des axes privilégiés du cristal.

Chaque point du réseau peut être obtenu par la translation d'un vecteur $\vec{R}$ défini par :

$$\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3 \in \mathbb{Z} \quad (1.1)$$

où : $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ sont les trois vecteurs unitaires correspondant aux trois axes du cristal et (n_1, n_2, n_3) sont des nombres entiers [13].

La figure 1.1 présente une Vue schématique de l'arrangement atomique dans cette structure :

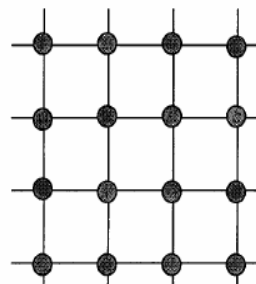


Figure 1.1 : Vue schématique de l'arrangement atomique dans la structure cristalline [14].

1.1.2. Matériaux amorphes

Dans de nombreux matériaux amorphes, la configuration atomique à courte portée autour d'un site spécifique est relativement bien définie et souvent proche de celle de la phase cristalline correspondante. Cela signifie que, bien que ces matériaux manquent d'ordre à longue portée, leur structure locale à l'échelle atomique demeure assez régulière. Ce phénomène est particulièrement marqué dans les matériaux où les atomes voisins sont arrangés de façon similaire à un cristal, mais où de petites irrégularités dans la longueur des et les angles des liaisons perturbent cet ordre à grande échelle. Ces variations mineures entraînent la perte de l'ordre à longue portée du réseau, comme illustré sur la figure 1.2. Toutefois, il est important de souligner que ces perturbations locales n'affectent pas significativement l'ordre à courte portée, ce qui permet à une grande partie des propriétés électroniques d'être conservées, même en l'absence d'un réseau cristallin parfait.

Dans certains cas, ce désordre peut être plus prononcé et empêche un atome de satisfaire pleinement ses exigences de liaison. Ce phénomène conduit alors à la formation de « liaisons pendantes », c'est-à-dire des liaisons non saturées. Ces défauts jouent un rôle crucial dans les propriétés physiques du matériau, car ils peuvent interagir avec d'autres atomes ou créer des centres de défauts influençant la conduction électronique, la photoconductivité, ou d'autres propriétés importantes. Cependant, dans la majorité des matériaux amorphes, l'ordre à courte portée reste relativement stable et ces défauts n'ont qu'un impact limité sur les caractéristiques électroniques globales.

Dans le cas des semi-conducteurs composés, en plus du désordre topologique (perturbation de la structure du réseau), il peut également exister un désordre chimique. Cela signifie que certains atomes du réseau sont remplacés par d'autres éléments, générant ainsi un désordre supplémentaire. Néanmoins, on suppose généralement que l'ordre à courte portée est préservé pour la majorité des atomes, ce qui permet à ces matériaux de conserver des propriétés électroniques similaires à celles des semi-conducteurs cristallins. En conséquence,

bien que la présence de différents types de désordre puisse accroître la concentration d'états de défauts électroniques comparativement à un cristal parfait, l'ordre local résiduel est souvent suffisant pour maintenir les propriétés globales de la structure des bandes.

Ainsi, les caractéristiques essentielles du matériau, telles que la conduction électrique ou les propriétés optiques, restent généralement préservées, bien que des effets subtils dus au désordre puissent influencer certaines propriétés spécifiques [15].

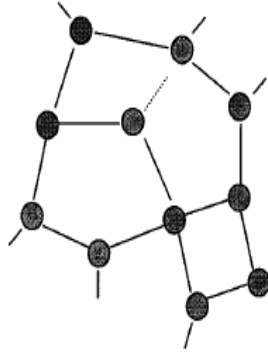


Figure 1.2: Vue schématique de l'arrangement atomique dans la structure amorphe [14].

Il est tout à fait compréhensible que, bien que certains types de défauts, tels que les lacunes atomiques ou les mauvaises coordinations chimiques, soient susceptibles d'apparaître dans les matériaux amorphes, il est peu probable que tous les défauts présentent des énergies identiques. En effet, dans les solides cristallins bien ordonnés, la concentration de défauts est généralement faible, de sorte que chaque site peut être considéré comme isolé au sein d'un réseau parfait, sans perturbations majeures dues aux autres défauts. Par conséquent, les états d'impuretés possèdent des énergies bien définies.

En revanche, dans les solides amorphes, où les défauts sont beaucoup plus nombreux, des variations aléatoires de l'environnement local des sites sont inévitables, entraînant des fluctuations dans l'énergie des sites individuels. Ces variations affectent non seulement la distribution énergétique des états localisés, mais influencent également directement le comportement des électrons libres. Ces derniers, soumis à des variations aléatoires du potentiel local, peuvent se retrouver localisés à différentes positions aux bords des bandes d'énergie. Ce phénomène introduit une incertitude dans la distribution des états électroniques, rendant difficile la prédiction précise de leur comportement [16].

1.2. Impact du désordre sur la distribution des états électroniques

Comme indiqué précédemment, notre thèse traite spécifiquement les semi-conducteurs amorphes, qui se caractérisent par l'absence d'ordre à longue portée. Cependant, de nombreux matériaux amorphes montrent une structure de liaison locale qui peut être similaire à celle des matériaux cristallins. Par une étude minutieuse, il est prouvé que les longueurs moyennes des liaisons et les angles de liaison dans la phase amorphe sont très similaires à ceux observés dans la phase cristallisée. Ce phénomène donne lieu à un ordre à courte portée, signifiant que les atomes voisins sont organisés de manière relativement régulière sur de courtes distances, sans répétition régulière à longue échelle caractéristique des cristaux. Une considération plus

attentive révèle que l'ordre à courte portée est similaire à ce qui est observé dans un matériau cristallin, mais le manque de structure à long distance empêche l'établissement d'une organisation cristalline parfaite. Étant donné de la similitude dans l'ordre local, on pourrait suggérer que les propriétés électroniques, y compris la conductivité et la photoconductivité, sont similaires entre ces phases. En effet, la conductivité d'un matériau dépend fondamentalement des interactions entre atomes voisins, c'est-à-dire des liaisons atomiques. Cependant, l'absence d'ordre à long portée peut affecter certaines propriétés physiques. Le désordre, en l'occurrence, joue un rôle important pour modifier la distribution des états électroniques.

Dans les sections suivantes, il sera possible de discuter plus en détail la différence entre la densité d'états d'un matériau cristallin et celle d'un matériau amorphe, en abordant les différences fondamentales de distribution des états électroniques entre ces deux types de matériaux.

1.3. Niveaux d'énergie d'un atome isolé et d'un atome dans un cristal : bandes d'énergie

Les niveaux d'énergie d'un atome isolé sont quantifiés. À la température du zéro absolu, les électrons occupent uniquement les niveaux d'énergie les plus bas accessibles. Lorsque la température augmente, les électrons situés sur des niveaux d'énergie supérieurs, où leur liaison à l'atome est plus faible, peuvent être excités vers des niveaux encore plus élevés. Dans un cristal, chaque atome subit l'influence de ses voisins. En raison des interactions atomiques, les niveaux d'énergie se scindent en plusieurs sous-niveaux, augmentant ainsi le nombre total de niveaux d'énergie disponibles. Ces interactions sont suffisamment fortes pour que les états énergétiques issus de cette subdivision soient très rapprochés. L'ensemble forme alors une bande d'énergie quasi continue. On observe ainsi des bandes d'énergie accessibles aux électrons, séparées par des bandes interdites où les électrons ne peuvent pas se trouver [17].

La figure 1.3 illustre la formation de ces bandes dans le cas d'un semi-conducteur. On y distingue deux bandes continues d'énergie : la bande de conduction (BC) et la bande de valence (BV), séparées par une bande interdite, appelée « gap », d'une largeur E_G caractéristique du matériau. L'énergie du bas de la bande de conduction est notée E_C et celle du haut de la bande de valence E_V , de telle sorte que $E_G = E_C - E_V$. La répartition des porteurs de charge dans ces bandes dépend de leur densité d'états ainsi que de leur probabilité

d'occupation. Dans le cadre de l'approximation parabolique, la densité d'états dans les bandes de conduction et de valence est donnée par les équations suivantes :

Densité des états délocalisés :

Aux bords de la bande de conduction (BC) et la bande de valence (BV) la densité d'états électronique varie de façon parabolique, ce cas correspondant aux semi-conducteurs cristallins [18]. Les densités d'états $N_{BV}(E)$ et $N_{BC}(E)$ correspondantes peuvent être décrites par les expressions ci-dessous :

$$N_{BV}(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_t^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E_V - E} \quad (1.2)$$

$$N_{BC}(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{-E - E_C} \quad (1.3)$$

dans ces équations, m_e^* , m_t^* sont les masses effectives des électrons et des trous.

E_V et E_C sont les positions énergétiques des bords de bande de valence et de conduction.

$\hbar = \frac{h}{2\pi}$ où h est la constante de Planck.

Densité des états localisés :

Ce sont les états qui peuplent la bande interdite : les états de la queue de bande de valence (QBV) et la queue de bande de conduction (QBC), correspondent aux liaisons faibles. Elles constituent les états les plus proches de la bande de valence et de conduction respectivement, et leurs densités d'états $N_{QBV}(E)$ et $N_{QBC}(E)$ ont une allure exponentielle [14]:

$$N_{QBV}(E) = N_V \exp \left[- \left(\frac{E - E_V}{k_B T_V} \right) \right] \quad (1.4)$$

$$N_{QBC}(E) = N_C \exp \left[- \left(\frac{E_C - E}{k_B T_C} \right) \right] \quad (1.5)$$

N_V et N_C sont les densités d'états aux bords de bande.

k_B la constante de Boltzmann .

Les valeurs $\frac{1}{k_B T_C}$ et $\frac{1}{k_B T_V}$ définissent les pentes d'Urbach [19], et caractérisent le degré de désordre du matériau.

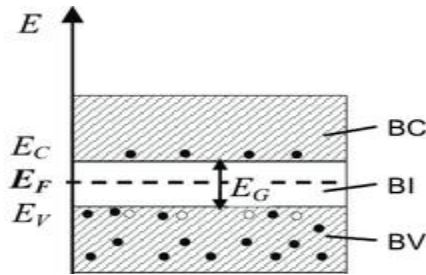


Figure 1.3: Diagramme de bandes d'énergie d'un cristallin [20].

Dans un semi-conducteur cristallin sans défaut, la distribution des états électroniques se termine brusquement aux bords de la bande de valence et de la bande de conduction. En revanche, dans un semi-conducteur désordonné, des queues d'états électroniques s'étendent dans la région du gap.

1.4. Densité d'états dans les semi-conducteurs amorphes

La forme exacte des états de queue est fortement influencée par la nature précise du désordre. Ces états de queue sont présents même dans les semi-conducteurs désordonnés « parfaits », pour lesquels toutes les liaisons sont satisfaites. Le désordre résulte des variations des longueurs et des angles de liaison est qualifié de désordre intrinsèque. En outre, dans les semi-conducteurs désordonnés réels, on trouve également des liaisons pendantes, et d'autres formes de désordre, qu'on appelle désordre extrinsèque. Ces défauts conduisent généralement à la formation d'états électroniques non complètement liés dans la région du gap. Les chercheurs ont ensuite développé la théorie selon laquelle ces états se trouvent dispersés au niveau du gap sous forme de queues résultant du désordre intrinsèque caractéristique de ces matériaux.

Les analyses montrent qu'un grand nombre de ces états de queue sont localisés par le désordre des sites, et des énergies critiques « limites de mobilité » séparent les états étendus des états [21,22] Un certain nombre de ces états localisés de queue sont responsables de nombreuses propriétés uniques observées dans les semi-conducteurs amorphes. Les figures suivantes montrent différents types de base pour la densité d'états dans ces matériaux et les différences essentielles entre eux. Les paragraphes suivants présentent les détails de ces types de base.

Le modèle de bande proposé par Mott [23], illustré sur la figure 1.4, décrit la densité d'états dans un semi-conducteur amorphe. En raison du désordre du réseau, le matériau forme

des queues étendues d'états localisés qui émergent le long des bandes de valence et de conduction et se propagent dans la zone interdite. Mott suppose que la transition entre les états de queue localisés et les bandes étendues est nette, marquée par une augmentation soudaine de la mobilité des électrons. Les électrons dans les bandes étendues se déplacent avec une mobilité semi-classique contrôlée par une masse effective, tandis que ceux dans les états localisés se déplacent de manière cohérente par effet tunnel, avec une mobilité se limitant à zéro à basses températures [24].

Une autre vue, par Cohen, Fritzsche et Ovshinsky montrée sur la figure 1.5 [21], est connue sous le nom de modèle CFO, suggère que les états de queue localisés s'étendent plus profondément dans l'espace de mobilité et se recouvrent dans la région du niveau de Fermi, augmentant la complexité de la transition entre les états localisés et les états étendus.

Enfin, Marshall et Owen [25,26] considèrent un modèle dans lequel les défauts à l'intérieur du réseau créent une densité significative d'états, tel que le montre la figure 1.6. Sous cette hypothèse, le niveau de Fermi est affecté par des bandes d'états de type donneur et accepteur qui s'auto-équilibrent et place le niveau de Fermi proche du centre de l'écart énergétique.

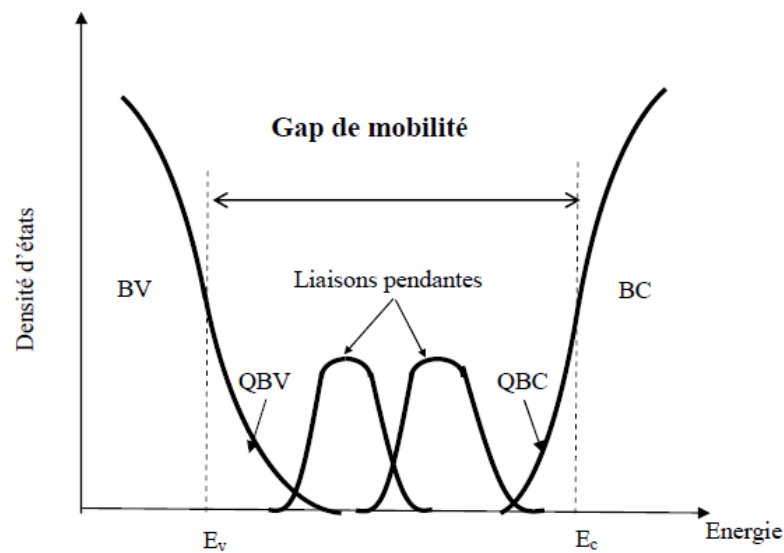


Figure 1.4 : Diagramme de bande selon le modèle de Mott [18].

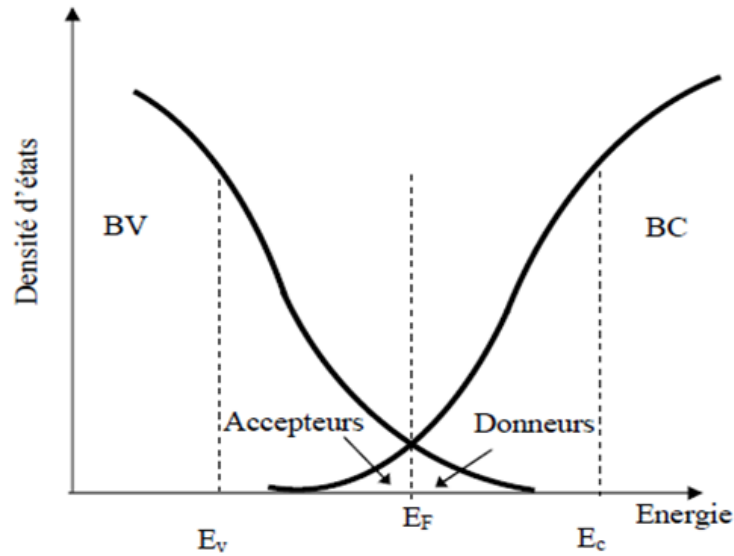


Figure 1.5 : Diagramme de bande selon le modèle de C.F.O [18].

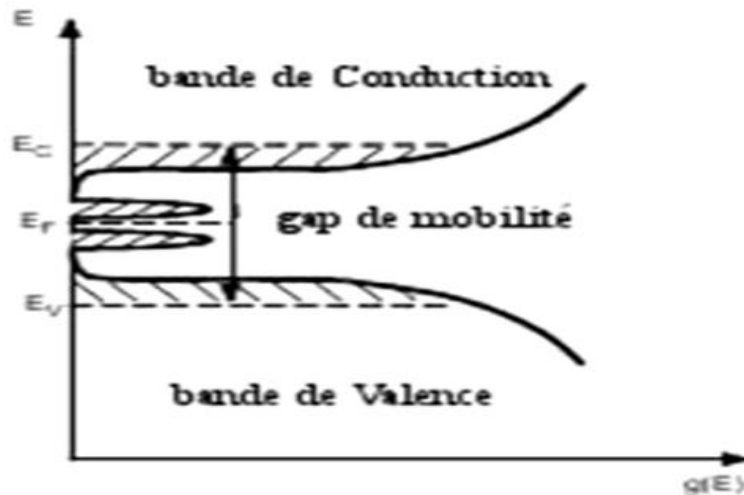


Figure 1.6 : Modèle de densité d'états dans les amorphes proposé par Marshall et Owen [26].

1.5. Transport électronique

1.5.1. Transport électronique dans les matériaux cristallins

La conduction électrique dans les métaux se produit principalement grâce aux électrons libres, des particules ayant une charge négative. Les semi-conducteurs contiennent également d'autres porteurs de charge connus sous le nom de trous et dotés d'une charge positive. Toutefois, lorsqu'ils ne sont pas soumis à un champ électrique, les porteurs de charge, qu'elles soient des électrons ou des trous, effectuent des mouvements aléatoires. Ces mouvements sont plus fréquents lorsque la température est plus élevée à cause des chocs entre les particules. Cependant, entre ces chocs, ils bougeront dans des directions rectilignes avec une vitesse constante. Sur le plan statistique, la moyenne de leurs déplacements est nulle, car ils suivent

une trajectoire aléatoire. Les principaux phénomènes régissant le mouvement des particules de charge, que ce soit les électrons ou les trous, dans les semi-conducteurs sont la diffusion et l'influence d'un champ électrique.

1.5.2. Evolution de la densité de porteurs de charge

Courant de dérive

Lorsque l'on applique un champ électrique, les porteurs de charge sont soumis à une force $\vec{f} = q \vec{F}$, où $\vec{F}$ est le champ électrique et q la charge de la particule. Cela entraîne un déplacement global des porteurs de charge, qui se superpose à leur agitation thermique désordonnée. Ce phénomène est responsable du courant électrique, car les porteurs se déplacent dans une direction préférentielle sous l'effet du champ électrique tout en continuant à subir des perturbations dues à l'agitation thermique.

La vitesse moyenne de déplacement des porteurs de charge dans un matériau est directement proportionnelle à l'intensité du champ électrique appliqué. Cette relation peut être exprimée par la formule suivante : $\vec{V} = \mu \vec{F}$.

Où $\vec{V}$ représente la vitesse moyenne de déplacement des porteurs de charge, μ est la mobilité des porteurs de charge.

La mobilité μ est une constante qui dépend du type de porteur de charge (électron ou trou) ainsi que des caractéristiques du matériau, comme la température, les impuretés, et la structure cristalline. Elle mesure la capacité d'un porteur de charge à se déplacer sous l'influence d'un champ électrique, c'est-à-dire la facilité avec laquelle un porteur de charge peut être accéléré par ce champ.

La densité de courant, associée à des porteurs de charge, peut être exprimée en fonction des densités d'électrons ou des trous par unité de volume. Pour les électrons, la densité de courant est donnée par :

$$\vec{j}_n = qn\mu_n \vec{F} \quad (1.6)$$

De manière similaire, pour les trous, la densité de courant est :

$$\vec{j}_p = qp\mu_p \vec{F} \quad (1.7)$$

Ainsi, la densité de courant totale dans le semi-conducteur est la somme des densités de courant dues aux électrons et aux trous, ce qui donne :

$$\vec{j}_t = \vec{j}_n + \vec{j}_p = (qn\mu_n + qp\mu_p) \vec{F} \quad (1.8)$$

Cette expression représente la loi d'Ohm généralisé. Pour un semi-conducteur extrinsèque, le terme dû aux porteurs majoritaires est prépondérant, et l'effet des porteurs minoritaires étant négligeable [27].

Courant de diffusion

Lorsque, dans un cristal semi-conducteur, les électrons et les trous ne sont pas répartis de manière uniforme, ou lorsque la température varie à travers le matériau, l'énergie cinétique des porteurs de charge par unité de volume devient également non uniforme. Ce déséquilibre dans la distribution des porteurs de charge et la température entraîne un phénomène de diffusion des porteurs.

La diffusion des porteurs se manifeste par un mouvement des particules (électrons ou trous) des régions où leur concentration est élevée vers les régions où elle est faible. De même, les porteurs tendent à se déplacer des zones à température élevée vers celles à température plus basse, en raison des différences d'énergie cinétique entre ces zones. Ce processus de diffusion est donc fortement influencé par les gradients de concentration des porteurs et par les gradients de température au sein du matériau. En l'absence de champ extérieur la diffusion est décrite par la lois de Fick qui relie le flux des particules au gradient de leurs concentration. Les courants de diffusion des porteurs valent [28] :

$$\vec{j}_{n,diff} = qD_n \vec{grad}(n) \quad (1.9)$$

$$\vec{j}_{p,diff} = -qD_t \vec{grad}(p) \quad (1.10)$$

dont D_n , D_t sont respectivement les coefficients de diffusion des électrons et des trous. Ces coefficients sont donnés par la relation d'Einstein :

$$D_n = \mu_n \frac{k_B T}{q} \text{ et } D_t = \mu_p \frac{k_B T}{q}$$

La densité de courant de porteurs de charge (positive ou négative), dans le cas où le système présente à la fois l'action d'un champ électrique $\vec{F}$ et le processus de diffusion s'écrit:

$$\vec{j}_n = q \left(n\mu_n \vec{F} + \vec{grad}(n) \right) \quad (1.11)$$

$$\vec{j}_p = q \left(p\mu_p \vec{F} - \vec{grad}(p) \right) \quad (1.12)$$

L'évolution de la densité des porteurs de charge dans un volume donné dépend de plusieurs facteurs, dont la densité de courant, les phénomènes de génération et de recombinaison, ainsi que de l'interaction avec des flux externes tels que ceux des photons. Lorsqu'un semi-conducteur est exposé à des phénomènes externes, comme l'absorption de photons dans le cas d'une excitation optique, des porteurs de charge supplémentaires peuvent être générés. Ce processus, appelé génération, augmente temporairement la densité de porteurs de charge dans le matériau. À l'inverse, des phénomènes de recombinaison surviennent lorsque des électrons et des trous se rencontrent et s'annihilent, réduisant ainsi la densité des porteurs de charge. Ces processus de génération et de recombinaison influencent directement la distribution des porteurs de charge dans le matériau.

Pour analyser les phénomènes de transport évoqués précédemment, il est primordial de disposer d'un ensemble d'équations qui décrivent l'évolution des concentrations des porteurs de charge et de la charge électrique au sein du milieu étudié. Ils peuvent être modélisés par des équations différentielles qui tiennent compte de plusieurs facteurs, notamment la diffusion et la dérive des porteurs sous l'influence d'un champ électrique qui coexistent avec les processus de génération et de recombinaison des porteurs de charge. Les équations qui intègrent l'ensemble de ces mécanismes et décrivent l'évolution temporelle de la densité de charge sont connue sous le nom d'équations de continuité.

Dans des conditions spécifiques, comme dans des dispositifs optoélectroniques ou des cellules solaires, la génération et la recombinaison des porteurs peuvent être particulièrement importantes, et l'équation de continuité devient essentielle pour modéliser et comprendre le comportement dynamique des porteurs de charge. Ces processus influencent non seulement les propriétés de conduction du semi-conducteur, mais aussi ses performances en tant que dispositif électronique ou optoélectronique.

Equation de continuité

L'équation de continuité est une équation locale fondamentale qui s'applique en chaque point du semi-conducteur et à chaque instant, permettant ainsi de décrire avec précision l'évolution spatiale et temporelle des porteurs de charge. Cette équation exprime le principe de conservation de la charge en tenant compte des flux de courant, ainsi que des phénomènes internes de génération et de recombinaison des porteurs. elle s'écrit pour les électrons et les trous [29] :

$$\frac{dn(t)}{dt} = \frac{d\Delta n(t)}{dt} = G_n - R_n + \frac{1}{q} \text{div}(\vec{j}_n) \quad (1.13)$$

$$\frac{dp(t)}{dt} = \frac{d\Delta p(t)}{dt} = G_p - R_p - \frac{1}{q} \text{div}(\vec{j}_p) \quad (1.14)$$

où :

- $\frac{dn(t)}{dt}, \frac{dp(t)}{dt}$ est la variation temporelle de la densité des porteurs de charge.
- $\vec{j}_n, \vec{j}_p$ est la densité de courant des électrons et de trous respectivement.
- G_n, G_p est le taux de génération des porteurs de charge d'électrons et des trous.
- R_n, R_p est le taux de recombinaison des porteurs de charge d'électrons et des trous.

1.5.3. Transport électronique dans les matériaux amorphes

Les propriétés de transport électronique dans les solides amorphes se distinguent fondamentalement de celles des cristaux par la présence d'états localisés. Ces états, qui résultent de la désorganisation structurelle caractéristique des matériaux amorphes, influencent directement la mobilité des porteurs de charge. Lorsque les sites localisés sont suffisamment proches en termes de position spatiale et d'énergie, les porteurs de charge peuvent se déplacer par saut d'un site à un autre. Ce mécanisme de conduction, connu sous le nom de hopping, se produit entre différents états d'énergie situés dans les queues de bandes. La conduction par sauts est généralement associée à une faible mobilité des porteurs de charge et prédomine à basses températures [12,30]. À des températures plus élevées, un autre mécanisme explique la conduction dans les matériaux amorphes : le piégeage multiple. Ce processus implique des porteurs de charge qui se déplacent en étant capturés et relâchés par des sites pièges à différentes énergies, facilitant ainsi la conduction sur de plus longues distances. Ce phénomène est crucial pour comprendre la construction de la densité des états localisés dans ces matériaux [31–33]. Ces différents mécanismes vont être détaillés dans les paragraphes ultérieurs. Nous nous focalisons sur le mécanisme de piégeage multiple le point de départ pour notre étude.

Processus de piégeage multiple

Le concept de piégeage multiple, ou d'interaction multiple avec des pièges, est fondamental pour comprendre le processus d'équilibre thermique entre les états localisés et les états étendus des bandes dans les semi-conducteurs amorphes.

- Ce phénomène décrit comment un porteur de charge, tel qu'un électron, progresse à travers les états étendus de la matière [34]. Ce mécanisme de transport est particulièrement dominant dans les semi-conducteurs amorphes à des températures relativement élevées, dépassant les 150 K.

- Dans un semi-conducteur amorphe, les porteurs de charge finissent inévitablement par quitter l'échantillon ou se recombiner. Entre ces deux événements, de la création à la recombinaison ou au départ, on postule que les porteurs se déplacent à travers les états étendus tout en subissant un ou plusieurs piégeages dans des pièges situés à diverses énergies au sein de la bande interdite du semi-conducteur. La durée pendant laquelle chaque porteur reste piégé dépend de la position énergétique du piège, décrite par la relation suivante :

$$t_r = \nu_i^{-1} \exp\left(-\frac{E_i}{k_B T}\right) \quad (1.15)$$

où ν représente la fréquence de tentative d'échappement, E_i est l'énergie du piège. Cette relation souligne que le temps passé dans un piège est exponentiellement dépendant de la température et de l'énergie du piège. Cette dynamique est illustrée pour un électron dans la figure 1.7 [14].

- Lorsque le semi-conducteur est exposé à une lumière de longueur d'onde appropriée, des paires électron-trou sont générées. En appliquant un champ électrique, nous pouvons, selon son orientation, examiner soit le déplacement des porteurs de charge négatifs, soit celui des porteurs positifs. Au cours de leur migration, les porteurs de charge peuvent subir divers phénomènes, notamment le piégeage et la recombinaison dans les états localisés de la bande interdite. Le temps nécessaire aux porteurs de charge pour traverser l'épaisseur de l'échantillon est appelé temps de transit, tandis que la durée pendant laquelle le porteur de charge se déplace librement dans sa bande, de sa création jusqu'à un centre recombinant, est appelée durée de vie.

- En présence d'états localisés dans la bande interdite, le transport de charge est contrôlé par les pièges. Les niveaux d'énergie très profonds sont souvent des centres recombinants.

- Cependant, les porteurs de charge piégés dans des états peu profonds peuvent être réémis dans leur bande respective après une période appelée temps de dépiégeage.

- En fin de compte, un porteur de charge peut être définitivement piégé par un piège recombinant ou subir une série de piégeages et de dépiégeages dans des pièges peu profonds [2]. La figure 1.7 ci-dessous schématise le mécanisme du multi-piégeage.

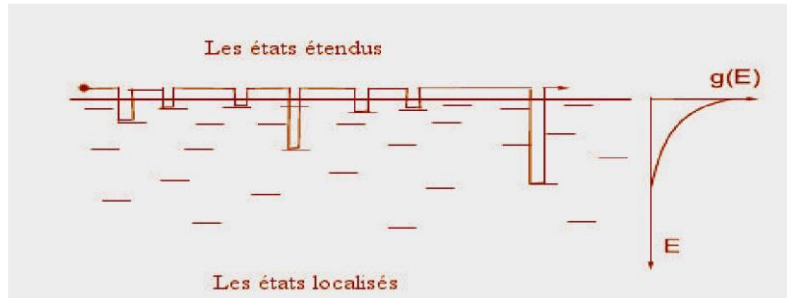


Figure 1.7 : Schématisation du mécanisme de conduction par piégeage multiple [35].

Processus de saut

Le mécanisme de saut, proposé dans les années 1950, a révolutionné notre compréhension de la conduction électrique dans les semi-conducteurs à très basse température [36]. Ce mécanisme explique comment les porteurs de charge, à des températures proches du zéro absolu, peuvent se déplacer d'un site localisé à un autre via l'effet tunnel, un phénomène clé pour les semi-conducteurs amorphes et désordonnés.

À des températures légèrement supérieures à 0 K [36], les transitions entre états localisés deviennent possibles. Les porteurs de charge, tels que les électrons, peuvent sauter d'un site à un autre grâce à l'effet tunnel, un phénomène où les particules traversent une barrière énergétique qui, en théorie classique, serait infranchissable. Ces sauts sont facilités par l'interaction entre les porteurs de charge et les phonons : les quanta d'énergie vibratoire du réseau cristallin.

1.6. Mécanismes de diffusion envisageables

Contribution de cette thèse

Dans cette section, nous introduisons un examen plus approfondi des principales théories et des concepts qui ont été explicités dans la littérature. Certains débats et points de controverse scientifique typiques dans la communauté scientifique peuvent être également identifiés. En dépit de nombreuses recherches théoriques et expérimentales, il y a encore une population active de partisans de diverses approches, de différentes hypothèses, et d'une distorsion d'accords entre ceux-ci. Les seuls points sur lesquels les scientifiques sont généralement en accord sont les caractéristiques générales de densité des états localisés, c'est-à-dire l'existence d'états localisés et l'impact de ces derniers sur la mobilité des porteurs de charge. Cependant, divers phénomènes associés à ces caractéristiques ne bénéficient pas de

consensus. Par exemple, l'un des principales questions est la description de la forme de la densité d'états. Certains modèles supposent une fonction d'énergie simple pour décrire la distribution des états localisés, mais d'autres insistent sur un caractère hétérogène. De plus, il existe des divergences radicales entre les approches théoriques reliant des effets différents dans les modèles.

Cette revue vise ainsi à élargir la compréhension de ces différents points de vue, en mettant en lumière non seulement les contributions majeures de la recherche actuelle, mais aussi les zones d'incertitude et les défis qui subsistent. Par la discussion des divers débats scientifiques sur ces sujets, nous cherchons à fournir une vision complète de l'état actuel de la recherche, en soulignant les approches qui semblent les plus prometteuses pour expliquer les phénomènes de transport dans les semi-conducteurs amorphes. L'étude du spectre de la densité d'états selon les trois modèles les plus populaires a montré une différence significative entre les semi-conducteurs cristallins et amorphes. Dans le dernier cas, elle se caractérise par l'existence d'états localisés dans le gap qui empêchent les porteurs de charge de se déplacer librement dans le matériau. Certains de ces états générés par les défauts, mais en majorité, ils résultent de la perte d'ordre à longue distance. A cet égard, l'existence de ces états jouent un rôle crucial dans les processus de conduction et, par conséquent, une caractérisation approfondie de ces derniers est nécessaire. En outre, les mesures expérimentales sont nécessaires pour caractériser ces matériaux en raison de la complexité mathématique des structures non périodiques. Les résultats expérimentaux permettent de caractériser le transport de charges de ces matériaux ou la présence d'états localisés a été largement discuté dans la littérature [37].

La densité et la position énergétique des états localisés sont des paramètres extrêmement importants car ils ont un impact majeur sur les propriétés de transport dans les matériaux mentionnés. Il est donc nécessaire de comprendre comment ces propriétés électroniques se comportent en termes de variation de la densité des états afin de modéliser le comportement de ces matériaux sous des conditions réelles.

À cette fin, des recherches expérimentales très concentrées ont été menées pour essayer de généraliser la forme de la fonction d'états. Parmi les méthodes utilisées pour étudier le processus du transport de charge, la photoconductivité transitoire avec ces deux variantes permet d'obtenir les paramètres clés tel que la mobilité et la durée de vie des porteurs de charges. Deux configurations d'échantillons sont couramment utilisées dans les mesures de la photoconductivité transitoire, à savoir les échantillons coplanaires et sandwich. La première, la configuration coplaire, est couramment utilisée pour les expériences de photoconductivité

transitoire standard, ou TPC. L'alternative consiste à étudier une configuration en sandwich, également appelée expérience du temps de vol. Cette configuration est très appropriée pour étudier le mouvement des porteurs de charge dans les semi-conducteurs résistants, et est également une technique excellente pour examiner la dynamique du transport dans ces matériaux [7]. Les photocourants mesurés à l'aide de ces configurations, ont provoqué une réaction vive en termes de théorie pour étudier le comportement des porteurs de charge dans les matériaux désordonnés et les effets de la conduction.

Nous pouvons constater que les résultats expérimentaux, à leur tour, ont montré que les photocourants sont souvent affectés par divers phénomènes, tels que l'existence d'états situés au sein du gap qui peuvent également affecter la mobilité des porteurs et le temps de vol à travers le matériau. Ces observations expérimentales ont joué un rôle crucial dans l'élaboration des modèles théoriques qui expliquent les phénomènes de transport dans les semi-conducteurs amorphes.

Les paragraphes suivants discuteront des modèles théoriques importants de la conduction et leur application permettra de mettre en lumière les approches prometteuses pour décrire le transport des charges dans ces matériaux complexes.

1.7. Modèles théoriques de conduction dans les structures désordonnées

En 1975, une avancée décisive dans l'étude des phénomènes de transport dispersif des charges dans les solides amorphes a été réalisée avec la publication du premier modèle détaillé capable de prédire les lois du photocourant mesuré par la technique du temps de vol (TOF). Ce modèle, fondé sur le concept de saut entre les états localisés, a permis de mieux comprendre les mécanismes sous-jacents à la conduction dans les matériaux désordonnés. Toutefois, l'analyse des caractéristiques du transport prédit par ce processus s'est avérée être un problème théorique complexe, et aucune solution exacte n'a été obtenue. Les traitements théoriques existants font appel à diverses approximations introduisant des hypothèses simplificatrices, dont la validité a été un sujet constant de débat dans la littérature [8].

Le modèle de piégeage multiple, qui a été proposé comme une explication plausible de nombreuses données expérimentales, fournit un lien direct entre la mesure du photocourant et la dynamique de piégeage des porteurs de charge dans les états localisés. Selon ce modèle, les informations relatives à la densité d'états sont codées dans les photocourants transitoires, qui dépendent des porteurs libres ou localisés. Cependant, les tentatives visant à relier la pente de la dépendance en loi de puissance du photocourant en fonction du temps, souvent observée dans les expériences de photoconductivité transitoire, à une distribution spécifique de ces états

localisés ont échoué. Il a été démontré que des pentes similaires pouvaient être obtenues pour différentes formes de distribution, ce qui a conduit à des simulations des équations du modèle [38]. Cette observation a mis en évidence la complexité du lien entre la forme exacte de la distribution des états localisés et les résultats expérimentaux obtenus.

Plus tard, Noolandi [4] a montré que le transport dispersif est dû à un certain nombre de mécanismes, dont l'un est associé à la capture de porteurs de charge par des pièges présents dans la bande interdite. Ce mécanisme, qui a été qualifié de formalisme de pièges multiples est équivalent à l'approche par saut de Scher et Montroll [1]. Le modèle ainsi construit est gouverné par un ensemble d'équations différentielles, qui décrivent l'évolution de la densité de charge libre et piégé en fonction du temps. Chaque piège est caractérisé par une probabilité de capture et une probabilité d'émission, ce qui permet de modéliser les processus de transport plus précisément et réaliste. Cette formulation a jeté les bases d'une compréhension plus profonde du transport de charges dans les matériaux amorphes et a ouvert la voie à de nouvelles études des phénomènes de conduction dans ces systèmes complexes.

Le groupe de recherche dirigé par Benkhedir a mené des études approfondies et exhaustives portant sur la déduction des états localisés dans le sélénium amorphe. Ces études se sont appuyées sur l'analyse détaillée des propriétés électroniques du matériau, permettant ainsi une meilleure compréhension des mécanismes fondamentaux qui gouvernent le comportement électronique et la nature des états localisés dans ce matériau. Grâce à une méthodologie rigoureuse combinant diverses techniques expérimentales. Ces recherches ont apporté des contributions significatives à la caractérisation électronique du sélénium amorphe. Ces études ont ouvert la voie à un débat scientifique crucial concernant la symétrie, ou l'asymétrie, de la densité des états électroniques situés respectivement du côté de la bande de valence et de la bande de conduction, un aspect fondamental pour comprendre les propriétés électroniques et optiques. Selon leur études le photocourant pré-transit constitue un outil adapté pour détecter la présence de défauts peu profonds. Le changement brusque de pente du courant indique le temps de transit, qui augmente lorsque la température diminue. Un changement de pente beaucoup moins marqué peut être observé à toutes les températures dans la partie pré-transit du courant. L'apparition de points d'inflexions dans les courbes du photocourant transitoire témoigne de la présence de caractéristiques discrètes au sein d'une densité d'états localisés qui ne varie pas de manière monotone. Un défaut suffisamment bien défini suite de capture des porteurs suivie de leur libération provoquent cet effet. À partir de la dépendance

en température du temps du point d'inflexion à t^* , il est possible de déduire la position énergétique de cette caractéristique discrète selon la relation :

$E^* = k_B T \ln(vt^*)$ où k_B est la constante de Boltzmann, T la température, et v la fréquence de tentative d'échappement.

Cette procédure a permis de couvrir les positions énergétiques des états situés de part et d'autre de la bande interdite [35,39–41]. Dans une autre étude [42] ils ont montré que dans le cas d'une densité d'états (DOS) purement exponentielle, le mécanisme de transport par piégeage multiple, qui contrôle la conductivité au-dessus de 200 K dans la plupart des semi-conducteurs amorphes [43], conduirait à une décroissance selon une loi de puissance du photocourant transitoire après une excitation pulsée. Cependant, un tel comportement n'est pas observé dans leur mesure de TPC. Un point d'inflexion dans les courants est visible dans la plage des microsecondes. Ce point indique la présence d'un niveau de piégeage discret dans la bande interdite, dont la densité dépasse celle du fond [44,45]. Lorsque le point d'inflexion n'est pas très marqué, c'est-à-dire lorsque la densité du niveau discret est de l'ordre de grandeur de la densité de fond, les photocourants mesurés peuvent être converti en diagrammes de $I(t) \times t$ ou $1/(I(t) \times t)$, ces derniers permettent d'extraire les temps t^* et la position énergétique du piège par rapport au bord de mobilité peut être déduite de la relation précédente [46].

Suite à cette étude ils ont examiné les modifications induites sur la densité d'états du sélénium amorphe suite au dopage par l'arsenic, et ont tenté d'apporter une explication à la diminution observée de la durée de vie des trous [47]. Les résultats montrent que le dopage engendre des modifications importantes de la densité d'états. Les mesures de photocourant transitoire (TPC) montrent que ces modifications comprennent la suppression des défauts peu profonds. En utilisant la même méthode, la position énergétique des défauts profonds déterminée pour les échantillons dopés avec 0,2 % et 0,5 % d'arsenic, respectivement est $E^* = (0.40 \pm 0.05)$ eV et $E^* = (0.33 \pm 0.02)$ eV

La différence entre ces deux positions a été expliquée par le fait que la méthode utilisée ne modélise que la libération des porteurs piégés à une énergie E^* , alors que les points d'inflexions observés dans les courants de TPC mesurés résulte de l'interaction conjointe des phénomènes de piégeage et de libération liés au piège. Par conséquent, les valeurs numériques mentionnées ci-dessus sous-estiment partiellement la profondeur réelle du piège, comme l'a montré Marshall [48]. Dans cette publication les auteurs ont démontré que même une très faible déviation par rapport à une densité d'états (DOS) exponentielle, telle que l'addition

d'une composante gaussienne étroite, entraîne une erreur significative dans l'estimation de l'énergie du pic de cette caractéristique lors de l'utilisation de la méthode analytique pré-transit $1/(I(t) \times t)$. Leur résultats peuvent être généralisés à d'autres formes de DOS et cette technique apparaît inadaptée pour toute étude quantitative des distributions des états localisés dans les matériaux semi-conducteurs désordonnés. En revanche, ils ont également montré que les méthodes post-transit et de transformation de Fourier peuvent fournir une représentation plus précise de la densité d'états localisés.

Plutôt que de se restreindre à l'approximation dans le domaine temporel décrite précédemment pour localiser le piège, il est, en principe, possible d'extraire non seulement la position du piège, mais également un profil détaillé de la densité d'états, en appliquant des transformées de Fourier et de Laplace dans le cadre de la photoconductivité transitoire. Ces techniques ont permis d'analyser la densité des états localisés sans d'hypothèses sur leur forme, ce qui a représenté un progrès majeur dans la modélisation de ces phénomènes [49,50]. L'absence de simplifications initiales représente une approche plus flexible du problème.

Malgré leurs réussites à décrire les mesures transitoires, les méthodes basées sur les transformées de Fourier et de Laplace sont souvent critiquées pour leur incapacité à fournir des solutions exactes permettant d'extraire la distribution de la densité des états localisés à partir des mesures du photocourant transitoire dans les semi-conducteurs amorphes. Ces méthodes, bien qu'efficaces dans l'analyse des phénomènes de transport, souffrent de limitations importantes dans le contexte des matériaux amorphes, où la structure désordonnée rend difficile la modélisation précise des états localisés et de leur contribution au transport.

Face à cette difficulté, le premier objectif de notre groupe de recherche a été de développer une technique innovante capable d'extraire de manière fiable la distribution énergétique des états localisés dans les semi-conducteurs amorphes à partir de leurs réponses phototransitoires. Afin de surmonter les défis associés à l'utilisation des méthodes traditionnelles, ils ont choisi de concevoir des algorithmes spécifiquement adaptés à cette tâche. Cette approche mise en œuvre avec succès pour résoudre et optimiser les problèmes posés, repose sur l'application de modèles mathématiques avancés.

La technique qu'ils ont développée découle du modèle de piégeage multiple et repose sur le calcul préalable de la fonction de densité d'états en résolvant le système d'équations de continuité par la transformée de Laplace. La relation obtenue conduit à une équation intégrale de Fredholm du premier type, un outil mathématique puissant mais complexe. Cette équation nécessite une attention particulière lors de son inversion numérique, car l'inversion des

équations intégrales de Fredholm est un problème reconnu pour être mal posé, ou « ill-posed problem ». Ce type de problème est difficile à traiter numériquement, car de petites erreurs dans les données d'entrée peuvent entraîner de grandes erreurs dans les résultats, rendant l'obtention d'une solution stable et précise particulièrement ardue.

Ainsi, bien que le recours aux équations de Fredholm et à la transformée de Laplace offre un cadre théorique solide pour l'extraction de la distribution des états localisés, il est impératif de mettre en œuvre des techniques numériques robustes et adaptées pour surmonter les défis inhérents à l'inversion de ces équations. Ces défis ont motivé le développement d'algorithmes spécialisés qui garantissent la stabilité et la fiabilité des résultats, même dans des conditions de données expérimentales bruitées ou incomplètes. Grâce à ces solutions, ils ont pu avancer de manière significative dans la compréhension du transport dans les semi-conducteurs amorphes et dans l'extraction de la distribution des états localisés à partir de leurs photocourants transitoires [26].

Les résultats obtenus ont été extrêmement prometteurs, mais après une analyse approfondie, il est apparu plus judicieux d'élargir leur étude en y intégrant des mesures expérimentales. Cette extension visait à surmonter certaines limitations présentes dans la littérature, en particulier celles concernant la forme exacte de la densité des états localisés dans le sélénium amorphe pur, notamment dans la moitié inférieure du gap. De plus, l'objectif était de répondre à une question essentielle soulevée dans les travaux précédents : celle de la réduction de la durée de vie des trous suite au dopage du sélénium avec l'arsenic, un phénomène généralement attribué dans la littérature à l'introduction de nouveaux pièges dans le matériau. Cependant, il convient de souligner qu'aucune preuve expérimentale n'a été fournie pour démontrer un changement significatif dans la distribution de la densité des états localisés en raison de ce dopage. Cette absence de données expérimentales précises a conduit à la nécessité d'approfondir leur approche et de proposer un modèle plus robuste basé sur des mesures réelles du photocourant obtenues par la technique de photoconductivité transitoire (TPC). Dans le cadre de cette recherche, le travail mené, visé d'examiner l'effet de l'ajout d'arsenic sur la distribution des états localisés dans le sélénium amorphe. Les résultats de cette étude ont été publiés dans leur article [51], où ils ont discuté en détail les observations expérimentales et leur interprétation, apportant ainsi de nouvelles perspectives sur l'impact du dopage par l'arsenic dans ce matériau. Ce travail a ouvert la voie à une compréhension plus approfondie des mécanismes de piégeage dans les échantillons dopés, et a fourni des éléments cruciaux sur leurs propriétés de transport et de durée de vie des porteurs de charge.

Les résultats essentiels tirés de cette étude sont les suivants :

- **Densité d'états dans le sélénium amorphe pur :** La simulation de la densité d'états dans la moitié inférieure du gap du sélénium amorphe pur révèle la présence d'une queue de bande de valence, qui est superposée à deux pics distincts : un pic peu profond situé à 0,32 eV et un autre plus profond autour de 0,45 eV. Ces caractéristiques témoignent la complexité de la structure électronique dans le matériau pur, soulignant l'importance de ces états localisés pour les propriétés de conduction.
- **Effet du dopage par l'arsenic :** Lors du dopage du sélénium amorphe par l'arsenic, le premier pic de la distribution de la queue de bande de valence disparaît. Ce changement suggère que l'arsenic joue un rôle significatif dans la modification de la structure électronique du sélénium amorphe, notamment en affectant la distribution des états localisés dans la moitié inférieure du gap.
- **Densité d'états dans le sélénium amorphe dopé par l'arsenic :** Pour les échantillons dopés avec 0,2 at% As et 0,5 at% As, la densité d'états simulée se compose d'une queue de bande de valence caractérisée par des températures caractéristiques respectives de $T_0 = 313$ K et $T_0 = 403$ K. Une distribution gaussienne est également observée, centrée respectivement à 0.406 eV et 0.375 eV au-dessus du niveau de valence. Pour le dopage avec 0,2 at% As, cette distribution présente une amplitude de $1.949 \times 10^{15} \text{ eV}^{-1} \cdot \text{cm}^{-3}$ et un écart-type de 0,038 eV. Dans le cas du dopage avec 0,5 at% As, l'amplitude est de $1.593 \times 10^{18} \text{ eV}^{-1} \cdot \text{cm}^{-3}$, avec un écart-type similaire de 0,038 eV. Ces résultats illustrent l'impact du dopage sur la densité des états localisés, notamment la création de nouvelles caractéristiques électroniques au-dessus de la bande de valence.
- **Influence du taux de dopage :** Il a été observé que le taux de dopage influence les paramètres de la distribution des états localisés dans le sélénium amorphe stabilisé. Cependant, ce taux n'a pas d'impact significatif sur la position du pic dans la distribution, suggérant que les variations dues au dopage concernent principalement les propriétés de la distribution elle-même plutôt que sa localisation énergétique.

La validation de leurs modèles de densité des états localisés pour les matériaux étudiés a été réalisée par la simulation des photocourants transitoires, suivie de leur comparaison avec les mesures expérimentales. Cette démarche a permis de confirmer la précision et la pertinence des modèles proposés, soulignant leur capacité à reproduire fidèlement les comportements observés dans les expériences réelles. Ces résultats constituent le principal point fort des

modèles de densité des états localisés qu'ils ont développés, et ils ouvrent la voie à de futures études visant à mieux comprendre les effets du dopage et du désordre sur les propriétés électroniques des matériaux amorphes.

L'émergence de ce modèle a incité le groupe de Koughia [7,8] à réexaminer leurs propres distributions, en soulignant que la présence des pics observés par notre groupe était due au phénomène de diffusion, un effet bien connu dans les expériences de photoconductivité transitoire [7,8]. Ce réexamen a mis en évidence des aspects importants du comportement des porteurs de charge dans les matériaux amorphes, en particulier en ce qui concerne l'interprétation des pics dans la densité d'états localisés. Globalement, les résultats présentés indiquent que, du côté de la bande de valence, la distribution de la densité d'états (DOS) est entièrement dominée par une queue exponentielle. Leur résultats a été comparé avec ceux obtenu par notre groupe où ils indiquent que la présence des pics dans les distributions est largement dispersés et ne dépasse que légèrement la distribution exponentielle. Ils soulignent dans les mêmes études que les mesures de photoconductivité en régime permanent sur sélénium amorphe utilisant également une structure à électrodes coplanaires ont été interprétés en termes de centres de recombinaison liés à des défauts situés à 0,36 eV au-dessus du bord de la bande de valence[52].Cependant, selon leur analyse, ces mesures de photoconductivité, qu'elles soient transitoires ou en régime permanent, sur des structures à électrodes coplanaires , peuvent facilement être dominées par la diffusion des trous vers la surface du sélénium amorphe [53]. La question sur la forme de cette distribution reste une interrogation clé, car elle influence directement la compréhension des mécanismes de transport et des propriétés électroniques des matériaux amorphes. Les divergences d'opinions dans la littérature illustrent clairement la difficulté à différencier les diverses distributions de densité d'états. La situation montre qu'il est nécessaire de poursuivre les recherches afin d'éclaircir la question sur la forme de la DOS à proximité de la bande de valence.

En réponse aux critiques et aux questions soulevées, notre groupe de recherche a cherché d'apporter des éléments de réponse à cette problématique encore non résolue dans la littérature scientifique. L'objectif cette fois ci est d'apporter des éclairages nouveaux en utilisant leur modèle non monotone pour simuler la durée de vie des porteurs de charge dans ce type de matériau. En simulant ces durées de vie et en les comparant aux résultats expérimentaux disponibles, le modèle vise à fournir des preuves plus solides et à confirmer ou infirmer les hypothèses relatives à la structure de la densité des états dans le sélénium amorphe[6]. Les résultats essentiels tirés de cette étude sont les suivants :

- **Durée de vie similaire dans les deux types de dopage :** La durée de vie des porteurs de charge reste du même ordre de grandeur et ne varie pas significativement entre les deux concentrations de dopage discutés dans cette étude.
- **Impact du dopage à l'arsenic :** À partir des résultats obtenus, il est possible de conclure que le dopage du sélénium amorphe avec de petites quantités d'arsenic conduit à une diminution de la durée de vie des trous.
- **Durée de vie dans le sélénium amorphe pur:** Les résultats expérimentaux indiquent que dans le sélénium amorphe pur, la durée de vie des trous se situe entre 10 et 50 μs .
- **Effet de la température sur la durée de vie des trous :** L'étude a également examiné l'effet de la température sur la durée de vie des trous. Les résultats numériques montrent que cette durée de vie diminue avec l'augmentation de la température, ce qui est en accord avec les mesures expérimentales de Fogal [54].

Validation des résultats numériques : Les valeurs numériques obtenues pour la durée de vie des trous confirment la concordance entre leur calculs et les résultats expérimentaux [54], ce qui soutient la validité du modèle non monotone pour la distribution de la densité des états localisés au-dessus du bord de la bande de valence.

Dans cette étude, nous proposons d'élargir notre travail afin de mieux comprendre les mécanismes de transport dans les matériaux amorphes. Pour ce faire, nous avons choisi d'explorer en détail la technique du temps de vol (TOF), qui constitue un outil puissant pour analyser le comportement des porteurs de charge dans les matériaux amorphes. En utilisant cette méthode, nous chercherons à simuler les propriétés de transport dans deux contextes distincts : en présence et en absence du phénomène de diffusion.

Dans ce travail, nous proposons d'étendre notre recherche dans ce domaine afin d'améliorer notre compréhension des mécanismes de transport dans les matériaux amorphes. Pour atteindre cet objectif, nous aborderons en détails la méthode du temps de vol qui représente un outil d'investigation puissant de la dynamique des porteurs de charge dans les matériaux amorphes. Nous tenterons de simuler les propriétés du transport dans deux contextes : en l'absence et en présence de diffusion. Le but principal est de visualiser l'effet du phénomène de diffusion sur les mouvements des porteurs de charge et de trouver comment ce terme influence les propriétés de la conduction. En comparant ces conditions, nous pourrions établir les différences significatives entre le transport idéal des charges en l'absence de la diffusion et les modes plus proches de la réalité où la diffusion influence nettement la mobilité. Finalement, l'investigation non seulement boostera notre compréhension mais présentera des

informations-clés sur les facteurs qui régissent la conduction dans ces systèmes. Les résultats des simulations comparées nous autoriseront de développer des modèles plus valides sur le comportement des matériaux amorphes dans des applications technologiques pratiques. Tout compte fait, l'analyse du transport dans ces systèmes dans le cadre de diffusion représentera une perspective nouvelle sur les problèmes probables dans la conception et optimisation des matériaux semi-conducteurs amorphes.

1.8. Justification de l'Approche Fractionnaire dans le Modèle à Pièges

Multiple

Le modèle à pièges multiples (MT), initialement développé pour modéliser les états d'énergie répartis, s'est révélé particulièrement efficace dans l'étude du transport hors équilibre des porteurs de charge au sein des semi-conducteurs amorphes. Des recherches pionnières menées par Schmidlin et al [55,56], Noolandi et al [4], Curtis et al [57], Tiedje et al [58], Schiff et al [59,60], ainsi que Uchaikin et Sibatov [61–64], ont mis en évidence sa capacité à interpréter les données expérimentales de mobilité de dérive dans des matériaux désordonnés [1,65–72]. Proposé initialement par Schmidlin et Noolandi [4,55,56], ce modèle s'appuie sur un système d'équations cinétiques qui décrit les taux de piégeage et de libération thermique des porteurs. Par un ajustement optimal de ses paramètres, il permet de reproduire fidèlement les signaux de courant transitoire $I(t)$, devenant ainsi un instrument essentiel pour analyser les décroissances de courant dans les semi-conducteurs, qu'ils soient inorganiques ou organiques. Néanmoins, son efficacité reste conditionnée par une caractérisation rigoureuse de la distribution des pièges, un élément crucial influençant les mécanismes de piégeage.

Les études sur la photoconductivité transitoire ont mis en lumière l'exploitation des courants transitoires comme source d'information sur les états localisés dans le gap, qui régissent les propriétés de transport anormal dans les semi-conducteurs désordonnés. Le courant transitoire $I(t)$ y suit souvent une loi de puissance en deux segments distincts :

$$I(t) \propto \begin{cases} t^{-1+\alpha}, & t < t_T \\ t^{-1-\alpha}, & t > t_T \end{cases} \quad \alpha < 1 \quad (1.16)$$

où α est le paramètre de dispersion, pouvant varier avec la température et d'autres paramètres, tandis que la configuration du signal normalisé en fonction du temps sans dimension reste pratiquement indépendante de la tension appliquée et de la taille de l'échantillon. Ce phénomène, connu sous le nom de transport dispersif, a été modélisé par Scher et Montroll [1,73,74] à travers un processus de marche aléatoire en temps continu (CTRW).

Ce modèle repose sur des sauts unidimensionnels des porteurs sous un champ externe, avec une distribution en loi de puissance des temps de séjour

$$P(\tau > t) \propto t^{-\alpha}, \quad t \rightarrow \infty \quad (1.17)$$

Cette distribution est fréquemment associée à une densité d'états exponentielle dans les queues de bande, largement utilisée dans les simulations de transport dans les semi-conducteurs désordonnés [75]. Ces observations soulignent la nécessité d'une approche plus nuancée pour capturer les dynamiques non locales et les effets de mémoire inhérents à ces systèmes.

1.8.1. Limites du Modèle Traditionnel et Transition vers le Fractionnaire

Le modèle à pièges multiples (MTM) traditionnel, basé sur des dérivées d'ordre entier, excelle dans la description du transport des porteurs de charge via des équations cinétiques interconnectées régissant les taux de piégeage et de libération thermique [4,55,56]. Cependant, il se heurte à des limitations face aux phénomènes de transport dispersif, marqués par des décroissances en loi de puissance du photocourant transitoire dans les mesures TOF [1,73,74]. Ces anomalies, liées à des distributions à queues des temps de séjour ($P(\tau > t) \propto t^{-\alpha}$, $t \rightarrow \infty$), traduisent des effets de mémoire et de non-localité que les dérivées entières, supposant un comportement markovien et des échelles temporelles homogènes, ne peuvent modéliser adéquatement.

Une distinction fondamentale entre le MTM et le CTRW réside dans la séparation explicite des charges libres et piégées dans le MTM, une caractéristique absente dans CTRW, qui s'appuie sur des longueurs de saut et des temps d'attente largement distribués [1,73,74]. Le CTRW modélise le transport comme un processus stochastique où la diffusion anormale émerge d'une distribution en loi de puissance, tandis que le MTM intègre une distribution exponentielle des états localisés en énergie influençant les transitions cinétiques. Bisquert [75] a établi une équivalence spécifique entre ces modèles sous certaines conditions, démontrant que la diffusion des porteurs libres dans le régime MTM peut être décrite par une équation de diffusion fractionnaire [75,76]. Cette passerelle conceptuelle repose sur un ajustement des paramètres cinétiques du MTM pour refléter une dynamique dispersive analogue à celle du CTRW.

Pour surmonter ces limites tout en préservant les principes fondamentaux du MTM – tels que la distinction entre porteurs libres et piégés, les sections efficaces de capture uniformes et la distribution exponentielle des états localisés – une transition vers le calcul fractionnaire

s'impose. Cette généralisation remplace les dérivées temporelles ordinaires par des dérivées fractionnaires d'ordre α intégrant des effets de mémoire via des opérateurs comme celui de Caputo ou de Riemann-Liouville. Bisquert [75,76] propose une substitution directe de la dérivée $\partial / \partial t$ par D_t^α dans les équations cinétiques, transformant ainsi l'équation de continuité en une forme fractionnaire qui décrit la diffusion anormale :

$$\frac{\partial^\alpha n}{\partial t^\alpha} = -\nabla \cdot J + G - R \quad (1.18)$$

où :

n est la densité de porteurs, J le flux, G la génération et R la recombinaison. Parallèlement, une approche inspirée de Sibatov et Uchaikin [61–64,77–82] dérive ces équations fractionnaires par des manipulations algébriques des équations MTM initiales, exploitant l'équivalence avec le CTRW.

1.8.2. Intégration et Enrichissement du Modèle Fractionnaire

Cette évolution conserve des indices physiques clés, notamment le paramètre de dispersion α , qui varie avec la température et la structure du matériau, tout en permettant de reproduire les régimes observés expérimentalement. Le modèle fractionnaire enrichit ainsi le cadre traditionnel sans le supplanter, offrant une flexibilité accrue pour analyser les dynamiques non locales dans les semi-conducteurs désordonnés. Cette synthèse s'appuie sur des solutions numériques comme l'inverse de la transformée de Laplace via les approximations Gaver-Wynn-Rho (GWR) ou de Padé [51], distinctes des approches antérieures utilisant des densités stables de Lévy [61–64,77–80,82–84].

L'intégration du calcul fractionnaire dans le MTM repose sur deux stratégies complémentaires issues de la littérature :

- (i) La substitution directe d'une dérivée fractionnaire, développée par Bisquert [75,76].
- (ii) Une dérivation algébrique à partir des équations MTM, proposée par Sibatov et al [61–64,77–82].

Ces méthodes, validées par des données expérimentales [61–64,77–82], fournissent une base solide pour étudier le transport de charges dans les semi-conducteurs amorphes.

Dans ce travail, une solution numérique est explorée pour analyser les photocourants transitoires transversal (T-TOF) et longitudinal (L-TOF) via l'inverse de la transformée de Laplace, offrant une alternative aux méthodes antérieures de Sibatov et Uchaikin.

Cette recherche se focalise sur les équations cinétiques fractionnaires dérivées du MTM dans le cadre des mesures de TOF. Elle permet d'interpréter les équations de transport fractionnaire, d'établir des conditions initiales et aux limites adaptées, et de développer des techniques numériques pour leur résolution. Ce cadre robuste ouvre des perspectives pour une analyse approfondie des phénomènes de transport anormal dans les semi-conducteurs amorphes, en harmonisant les contributions des modèles MTM, CTRW et des approches fractionnaires de Bisquert, tout en élargissant la compréhension physique des dynamiques non locales et des distributions d'états.

Chapitre 2

Techniques de transport et méthode de simulation

Le transport électronique dans les semi-conducteurs amorphes était d'un grand intérêt pour la communauté scientifique. Parmi les nombreux travaux en ce sens, l'une des voies les plus explorées est la photoconductivité, réalisée à la fois en régime permanent et en régime transitoire. L'analyse du régime transitoire de la photoconductivité a émergé des essais de compréhension des mécanismes de transport des porteurs, qui se présentent souvent avec un comportement anormalement dispersif. Une grande partie des travaux a été consacrée à la recherche sur des phénomènes physiques à l'origine de ce comportement en utilisant également des calculs des photocourants transitoires à l'aide de modèles de distribution de la densité des états localisés, qui sont caractéristiques des semi-conducteurs amorphes.

La théorie générale supposait que le transport des porteurs se faisait principalement via un piégeage multiple. En général, même si les calculs de domaine temporel sont effectués, l'étape suivante est l'inversion des transformées de Laplace pour obtenir la dynamique temporelle des photocourants, ce qui est crucial pour relier l'ingénierie des modèles théoriques aux expérimentations observées.

Le but de ce chapitre est de présenter la méthode de simulation utilisée : le fondement de tous les développements abordés dans le prochain chapitre. Cela nécessite la présentation et l'explication des calculs mathématiques liés au mécanisme de transport utilisé en lien avec les conditions expérimentales. Une discussion critique sur les hypothèses de modélisation et les choix méthodologiques sera alors proposée.

Enfin, nous examinons les modalités d'adaptation de cette approche aux besoins expérimentaux, à travers l'application à quelques cas concrets, notamment le transport de charge dans le sélénium amorphe. Ces exemples permettront d'illustrer l'efficacité et la pertinence de la méthode dans la construction des courbes de photocourants transitoires.

2.1. Rappel sur la transformée de Laplace

La transformée de Laplace constitue un outil mathématique fondamental, largement utilisé dans de nombreux domaines scientifiques et technologiques, en raison de sa capacité à simplifier l'analyse des systèmes dynamiques. Dans le cadre de notre étude, elle représente un instrument analytique essentiel pour le traitement du problème considéré, notamment dans le calcul des photocourants transitoires. Il apparaît donc judicieux de présenter, au préalable, un

bref rappel théorique sur ses définitions et propriétés fondamentales, afin de poser les bases nécessaires à la compréhension des développements qui suivront.

La transformée de Laplace d'une fonction $f(t)$ est donnée par l'expression suivante :

$$\mathcal{L}\{f(t)\} = \int_0^{\infty} f(t)e^{-st} dt \quad (2.1)$$

où le symbole $\mathcal{L}\{f(t)\}$ désigne la transformée de Laplace de la fonction $f(t)$. Cette notation indique que le résultat de la transformation n'est plus une fonction du temps t , mais une fonction de la variable s . Cette dernière est une variable complexe qui peut être interprétée comme une fréquence généralisée, inverse du temps. La transformée de Laplace permet ainsi de transférer un problème du domaine temporel au domaine fréquentiel, facilitant son analyse, notamment pour les systèmes linéaires.

Une fois la solution obtenue dans le domaine fréquentiel, il est possible de revenir au domaine temporel en appliquant la transformée inverse de Laplace, définie par :

$$f(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} F(s)e^{st} dt \quad (2.2)$$

Cette relation est connue sous le nom de formule de l'intégrale de Bromwich, dans laquelle c est une constante réelle choisie de manière à ce que le chemin d'intégration soit situé à droite de toutes les singularités de $F(s)$ [85]. Dans la pratique, la transformée de Laplace directe est généralement simple à appliquer. Dans de nombreux cas, elle peut être obtenue à l'aide de formules standards ou à partir de tables de transformées usuelles, ce qui rend son utilisation particulièrement accessible.

En revanche, l'inversion de la transformée de Laplace représente souvent une étape beaucoup plus complexe. Cette opération est qualifiée de problème mal posé (*ill-posed problem*), dans la mesure où de faibles perturbations dans les données d'entrée peuvent engendrer de grandes incertitudes dans la solution obtenue. Cette difficulté se manifeste notamment dans certains problèmes physiques, tels que la propagation d'ondes dans des milieux dispersifs, où l'inversion analytique peut devenir inapplicable ou instable.

Pour pallier ces limitations, plusieurs méthodes d'inversion ont été développées, que l'on peut regrouper en trois grandes catégories :

- Les méthodes classiques, fondées sur des règles simples et l'utilisation de tables de correspondances entre fonctions temporelles et leurs transformées ;

- La méthode analytique, basée sur le théorème de l'intégrale de Bromwich et les outils de l'analyse complexe, notamment le théorème de Cauchy et la méthode des résidus ;
- Les méthodes numériques, qui permettent une approximation efficace de l'inverse, en particulier lorsque les approches analytiques sont inapplicables ou trop lourdes à mettre en œuvre dans un cadre pratique.

Plus d'une centaine d'algorithmes ont été développés pour l'inversion numérique des transformées de Laplace. Trois études majeures: Davies et Martin [86], Narayanan et Beskos [87], et Duffy [88] ont comparé diverses approches, des plus classiques aux plus récentes, révélant les limites de nombreuses méthodes en termes de précision et de stabilité. Dans ce contexte, la méthode Gaver–Wynn–Rho (GWR) s'est imposée comme une solution à la fois précise, stable et simple à implémenter, particulièrement adaptée aux besoins actuels en calcul scientifique.

L'algorithme GWR repose sur une accélération de convergence avancée, le schéma Wynn–Rho, appliqué à la série des fonctionnelles de Gaver. Il présente l'avantage significatif de restreindre l'évaluation de la transformée de Laplace à l'axe réel uniquement, ce qui simplifie notablement la mise en œuvre numérique et réduit la charge computationnelle associée aux calculs en domaine complexe. Le seul paramètre libre de l'algorithme, M (nombre de termes de la sommation), permet de moduler la précision de l'inversion. L'augmentation de M améliore la précision, tout en restant compatible avec une implémentation concise dans les systèmes algébriques modernes.

Introduite par Valkó et Abate [89,90], cette méthode intègre systématiquement le calcul en précision multiple, l'algorithme adaptant automatiquement la précision interne en fonction du niveau d'exactitude exigé par l'utilisateur. Cette stratégie permet d'atteindre une stabilité et une robustesse accrues, même dans des cas où les méthodes classiques échouent ou produisent des résultats oscillants.

La fonction **GWR[F, t, M, precin]**, implémentée notamment dans Mathematica, permet une grande flexibilité :

- **GWR[F, t, M, precin]** : choix explicite du nombre de termes et de la précision.
- **GWR[F, t, M]** : utilise une précision adaptative ($\text{precin} = 2.1 \times M$).
- **GWR[F, t]**: configuration par défaut ($M = 32$, $\text{precin} = 67$) offrant un bon compromis entre performance et fiabilité.

La méthode GWR se distingue comme une solution algorithmique efficace et robuste pour l'inversion numérique des transformées de Laplace, particulièrement dans les contextes exigeants de modélisation mathématique, d'analyse de systèmes dynamiques et de traitement

du signal. Son intégration du calcul en précision multiple et son schéma d'accélération performant en font un outil de choix pour les chercheurs et ingénieurs confrontés à des problèmes mal posés ou sensibles aux erreurs numériques. Cette approche constitue une avancée significative en méthodes numériques appliquées.

Après avoir présenté la méthode de simulation, celle-ci sera appliquée aux équations décrivant l'évolution de la densité des porteurs de charge, conformément au modèle de conduction par piégeage multiple. La section suivante sera ainsi consacrée à l'analyse détaillée de ce mécanisme.

2.2. Mécanisme de conduction par piégeage multiple (MTM)

Plusieurs modèles ont été proposés dans la littérature afin d'expliquer les propriétés électroniques inhabituelles des semi-conducteurs amorphes. Ces modèles diffèrent notablement dans leurs prédictions concernant la densité des états localisés situés dans la bande interdite.

Le modèle d'Anderson [91], par exemple, suppose que les états localisés s'étendent sur l'ensemble du gap avec de faibles variations de densité. À l'inverse, d'autres approches partent de l'hypothèse d'un nombre limité de défauts structuraux, caractérisés par un spectre d'énergies étroit et un gap relativement vide. Cette divergence théorique illustre une controverse fondamentale, amplifiée par l'absence d'une méthode spectroscopique fiable permettant de mesurer directement la densité des états localisés. Des études ultérieures ont toutefois démontré que la photoconductivité transitoire constitue précisément une méthode spectroscopique indirecte mais efficace pour sonder ces états.

Lorsque des paires électron-trou sont générées par une excitation optique, elles induisent une conductivité excédentaire, proportionnelle au produit de leur densité et de leur mobilité. Dans les semi-conducteurs amorphes, il est observé que le photocourant décroît avec le temps, même lorsque le nombre total de porteurs excités reste constant. Ce comportement traduit une diminution de la mobilité effective des porteurs en fonction du temps, phénomène connu sous le nom de transport dispersif.

Ce phénomène a été mis en évidence pour la première fois grâce à la technique du temps de vol (*time-of-flight*). Les travaux réalisés ont souligné l'importance du transport dispersif comme outil d'exploration de la distribution des états localisés dans les matériaux amorphes. En particulier, il a été montré que la photoconductivité suit une loi de décroissance en puissance du type t^{-n} , avec un exposant n dépendant de la température T . Ces observations peuvent être

interprétées comme les conséquences d'un processus de piégeage multiple et de libération thermiquement activée à partir des états localisés.

De nombreux travaux ont été consacrés à l'étude de ce processus, combinant des approches analytiques et numériques. Parmi ces contributions, le traitement proposé par Schmidlin [2], initialement développé pour un ensemble de pièges à énergies discrètes, a été étendu avec succès aux cas de distributions continues des états localisés. Cette généralisation a permis d'obtenir des résultats exacts et exploitables, renforçant ainsi la validité du modèle dans un cadre plus réaliste. L'utilisation de ce modèle a considérablement facilité l'interprétation qualitative des résultats expérimentaux et a contribué à une meilleure compréhension des mécanismes de transport dans les semi-conducteurs amorphes.

Afin de démontrer comment la photoconductivité transitoire peut constituer une méthode spectroscopique indirecte de la densité des niveaux localisés, il convient de présenter de manière rigoureuse la formulation théorique du mécanisme de piégeage multiple. Compte tenu de son efficacité dans la modélisation des phénomènes observés, cette formulation sera exposée en détail dans la section suivante. L'analyse du mécanisme de piégeage multiple s'impose ainsi comme une étape clé pour l'étude du transport électronique dans les matériaux amorphes.

2.2.1. Cadre théorique

En 1977, Schmidlin [2] a décrit le photo-transport dans les semi-conducteurs amorphes à travers des équations de continuité qui expriment la variation de la densité des porteurs de charge en fonction du temps. Dans ce modèle, l'évolution des porteurs de charge (électrons ou trous) est décrite en fonction de leur génération, leur recombinaison et leur transport à travers le matériau. Ces porteurs peuvent être piégés dans des niveaux d'énergie localisés à la suite de diverses interactions, telles que des transitions assistées par des phonons ou des relaxations dues à la structure désordonnée du matériau.

L'équation de continuité générale pour les porteurs de charge dans un matériau semi-conducteur peut être écrite sous la forme suivante :

$$\frac{\partial n(\vec{r}, t)}{\partial t} = g(\vec{r}, t) - R(\vec{r}, t) + D_f \nabla^2 n(\vec{r}, t) \quad (2.3)$$

où : $n(\vec{r}, t)$ est la densité des porteurs de charge à la position $\vec{r}$ et au temps t , $g(\vec{r}, t)$ est le terme de génération des porteurs de charge, $R(\vec{r}, t)$ est le terme de recombinaison des porteurs de charge et enfin $D\nabla^2 n(\vec{r}, t)$ est le terme de diffusion, avec D_f la constante de diffusion des porteurs dans le matériau, et ∇^2 le Laplacien (qui décrit le transport diffusif des porteurs de charge).

Dans le modèle de piégeage multiple (MTM) des niveaux d'énergie localisés sont introduit dans le matériau semi-conducteur qui peuvent capturer les porteurs de charge, ralentissant ainsi leur transport. Ces niveaux sont généralement représentés par des niveaux d'énergie E_i , situés en dessous de la bande de conduction ou au-dessus de la bande de valence.

Des équations supplémentaires nécessaires pour modéliser l'évolution des porteurs piégés qui tiennent compte de l'occupation de ces niveaux d'énergie et de la capture ou libération.

L'équation de continuité pour les porteurs piégés est donnée par :

$$\frac{\partial n_i(\vec{r}, t)}{\partial t} = \omega_i n(\vec{r}, t) - \gamma_i n_i(\vec{r}, t) \quad (2.4)$$

où : $n_i(\vec{r}, t)$ est la densité des porteurs piégés au niveau E_i , $\omega_i n(\vec{r}, t)$ est le terme de capture, qui représente la probabilité qu'un porteur libre soit capturé par un niveau de piégeage i , et enfin $\gamma_i n_i(\vec{r}, t)$ est le terme de libération, qui représente la probabilité qu'un porteur piégé au niveau E_i soit relâché et retourne dans la bande de conduction ou la bande de valence. En combinant ces équations de continuité pour les porteurs libres et piégés, on peut obtenir un modèle complet de transport et de piégeage des porteurs dans les semi-conducteurs amorphes, qui permet de prédire les propriétés de conduction et les réponses photoélectriques du matériau en fonction des conditions expérimentales. Ces équations sont souvent résolues numériquement pour étudier le comportement dynamique des porteurs dans des dispositifs tels que les cellules solaires ou les dispositifs à semi-conducteurs amorphes.

Dans notre cas, nous nous limiterons dans cette étude à un film semi-conducteur d'épaisseur dx . Suite à la génération, les trous se déplacent vers le substrat. 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 $\tau_{i,r}$, donc les probabilités de capture et d'émission par unité de temps sont respectivement $\omega_i = \tau_i^{-1}$, $\gamma_i = \tau_{r,i}^{-1}$ les équations précédentes prennent la forme suivante:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = g_v(x,t) + \sum_{i=1}^k p_i \gamma_i - p \sum_{i=1}^k \omega_i - \frac{\partial f_i}{\partial x} \quad (2.5)$$

$$\frac{\partial p_i}{\partial t} = p \omega_i - p_i \gamma_i \quad (2.6)$$

Le flux des trous est exprimé par la relation suivante:

$$f_p = p \mu_0 F - D_t \frac{\partial p}{\partial x} \quad (2.7)$$

La mobilité microscopique est représentée par μ_0 et D_t est le coefficient de diffusion des trous. Il convient de noter que l'équation (2.6) correspond à un système d'équations, chacune étant associée à un piège distinct k . Les équations (2.5) et (2.7) sont formulées pour une dimension, mais leur extension à trois dimensions est évidente. Des équations similaires peuvent être établies pour les électrons, et leur solution sera obtenue de la même manière que celle des trous. Dans le cas particulier où un porteur de charge se déplace à travers les états de valence ou de conduction, les paramètres de piégeage peuvent être exprimés comme suit :

$$\omega_i = N_i \sigma_i \bar{v} \quad (2.8)$$

$$\gamma_i = \nu_i e^{-E_i / K_B T} \quad (2.9)$$

où N_i est la concentration du piège i par unité de volume, σ_i est la section efficace de capture, $\bar{v}$ est la vitesse moyenne d'un porteur mobile, ν_i est la fréquence de tentative d'échappement, et E_i est l'énergie d'activation pour la libération du porteur de charge .

Afin de mettre en évidence les caractéristiques du transport dispersif, le modèle de piégeage multiple est développé selon deux approches théoriques complémentaires. Une attention particulière est portée à l'analyse des photocourants transitoires, en s'appuyant sur deux techniques expérimentales de référence : la photoconductivité transitoire classique (TPC) et la méthode du temps de vol (Time-of-Flight, TOF). La résolution des équations précédemment établies nécessite l'intégration des conditions expérimentales propres à chacune de ces techniques, afin d'assurer une modélisation cohérente et fidèle aux phénomènes observés.

Avant de présenter les résultats issus des simulations numériques, un aperçu synthétique des principes fondamentaux de la TPC et de la méthode de TOF est proposé. Cette mise au point vise à contextualiser les modèles théoriques adoptés et faciliter l'interprétation des résultats qui suivront.

2.3. Méthodes expérimentales

Dans le cadre des mesures de la photoconductivité transitoire, deux configurations d'échantillon sont principalement utilisées : la configuration coplanaire, associée à l'expérience de photoconductivité transitoire standard (TPC), et la configuration en sandwich, correspondant à l'expérience du temps de vol (TOF). Cette dernière représente une méthode particulièrement efficace pour l'analyse du déplacement des porteurs de charge au sein des semi-conducteurs résistifs.

2.3.1. Photoconductivité transitoire (TPC)

L'expérience de la photoconductivité transitoire standard (TPC), illustrée schématiquement sur la figure 2.1, repose sur l'excitation des porteurs de charges libres dans la bande de transport à l'instant $t = 0$ au moyen d'une excitation lumineuse courte. Ces porteurs peuvent être générés soit par une impulsion laser d'une durée approximative de 1 ns, soit par une diode électroluminescente (LED) produisant des impulsions de plus longue durée. Les lasers employés, dont la puissance maximale peut atteindre 100 kW, nécessitent généralement une atténuation d'un facteur 1000 afin d'éviter la saturation des pièges ciblés par l'étude. Sous l'effet d'un champ électrique, ces porteurs se déplacent jusqu'à leur recombinaison, tout en subissant des immobilisations temporaires répétées dues aux divers pièges présents dans le matériau [92].

Au commencement de l'expérience, les distributions des porteurs de charge se trouvent en équilibre thermique, ce qui implique que les sites de piégeage des électrons situés au-dessus du niveau de Fermi et ceux des trous positionnés en dessous sont inoccupés. Cette condition permet aux porteurs de charge d'interagir librement avec ces sites. La libération des porteurs piégés étant un phénomène thermiquement activé, les pièges profonds retiennent les porteurs pendant des périodes prolongées, ce qui se traduit par de faibles valeurs du courant transitoire. À l'inverse, les pièges peu profonds libèrent les porteurs plus rapidement. Ces derniers peuvent ensuite être capturés de nouveau, augmentant ainsi la population des états plus profonds et réduisant davantage le courant.

Bien que de nombreuses équipes de recherche [49,93,94] aient tenté d'extraire des informations à partir des corrélations entre l'évolution du photo courant en fonction du temps, cette approche demeure complexe dans les cas généraux. Une solution élégante pour surmonter ces difficultés consiste à transposer la décroissance du courant dans le domaine fréquentiel au moyen de la transformée de Laplace . Cette technique, appliquée à l'analyse des signaux de TPC, permet d'obtenir des informations précieuses sur la distribution de la densité des états localisés dans la bande interdite.

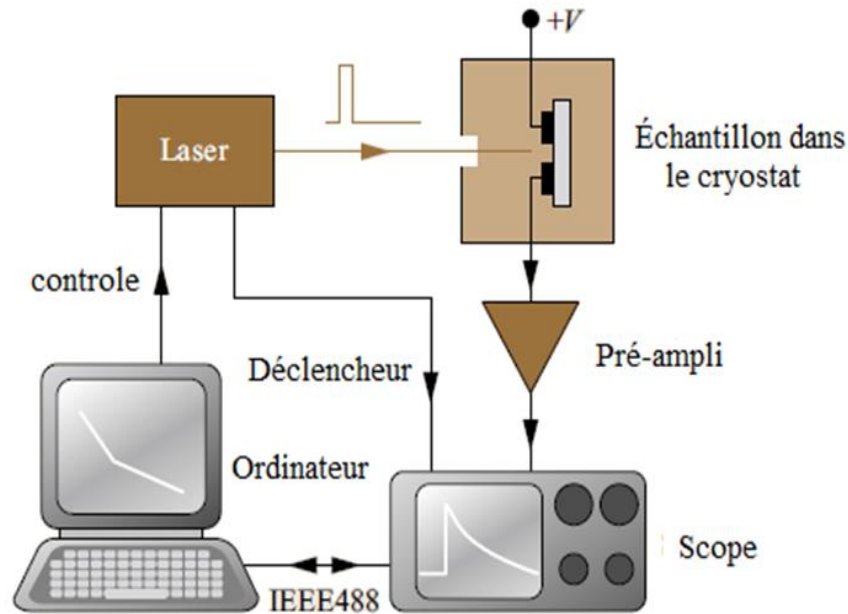


Figure 2.1 : Photoconductivité transitoire standard (TPC) [92].

2.3.2. Technique du Temps de Vol (TOF) : principes, configurations et comparaison avec TPC

La technique du Temps de Vol (TOF), initialement connue sous le nom de méthode de Spear, a émergé dans les années 1960 comme une adaptation de l'expérience fondatrice de Haynes-Shockley [95,96]. Elle s'est rapidement imposée comme un outil incontournable pour la caractérisation des propriétés de transport dans les semi-conducteurs désordonnés, notamment ceux à faible mobilité et haute résistivité, tels que les verres de chalcogénure.

Configuration expérimentale

La méthode de TOF repose sur un dispositif en configuration sandwich, dans lequel l'échantillon présente une épaisseur typique comprise entre 1 et 100 μm . Les électrodes doivent respecter certaines conditions :

- Elles doivent être bloquantes pour au moins un type de porteurs de charge (électrons ou trous).
- Au moins l'un des contacts doit être semi-transparent, permettant l'illumination d'une face de l'échantillon par une brève impulsion lumineuse.

L'excitation optique est appliquée à travers ce contact semi-transparent. Il existe principalement deux variantes géométriques de la technique de TOF : longitudinale (L-TOF) et transversale (T-TOF). La figure 2.2 illustre les configurations expérimentales typiques de ces méthodes.

Configuration L-TOF

L'excitation lumineuse et le champ électrique sont appliqués dans la même direction (orthogonale à la surface de l'échantillon). Les porteurs se déplacent perpendiculairement à la surface. C'est la configuration la plus répandue et celle utilisée dans la majorité des travaux sur les verres de chalcogénure [97].

Configuration T-TOF

Moins courante, cette configuration implique que les électrodes et l'excitation soient déposées latéralement, de sorte que les porteurs se déplacent parallèlement à la surface. Elle est utilisée pour sonder les hétérogénéités latérales ou les couches minces où la géométrie sandwich est difficile à mettre en œuvre [97].

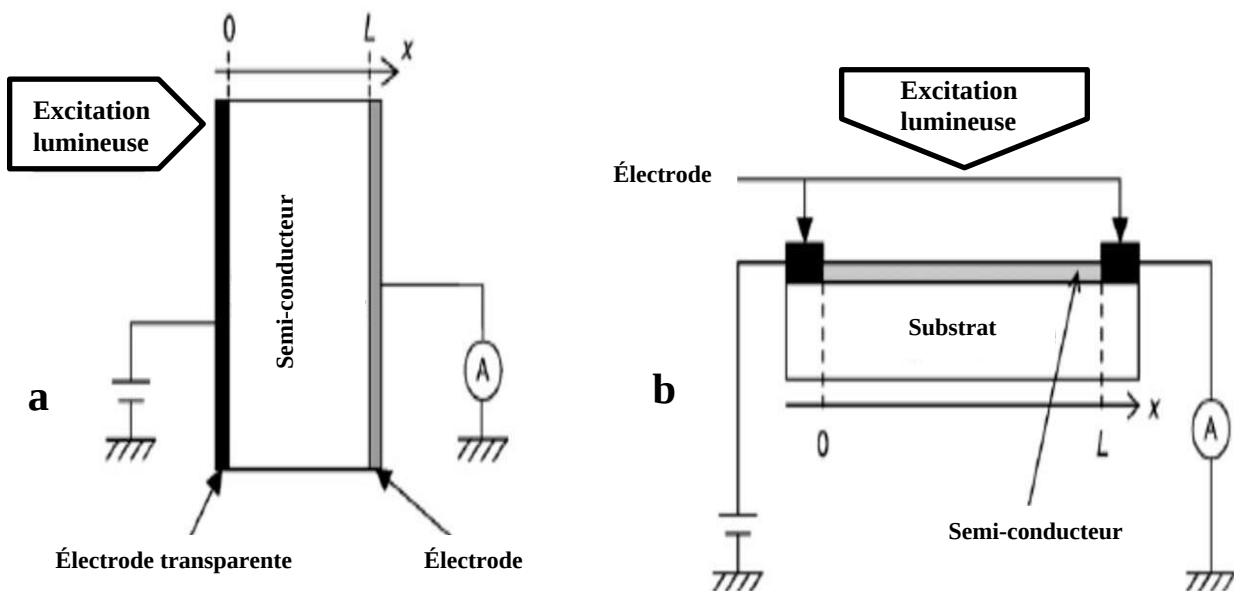


Figure 2.2 : Configuration temps de vol (a) L-TOF et (b) T-TOF [97].

Dans la technique de TPC, une brève impulsion lumineuse est appliquée à la surface de l'échantillon (configuration coplanaire), générant des porteurs de charge dont la décroissance du photocourant reflète les processus de relaxation et de recombinaison, fortement influencés par les états localisés présents dans la bande interdite.

En revanche, la méthode TOF repose sur une configuration sandwich, où l'excitation optique et la collecte des charges sont spatialement séparées. Cette approche permet de mesurer directement la mobilité effective des porteurs, le temps de transit t_r , ainsi que la distribution énergétique des états de piégeage. Cette séparation spatiale entre la génération et la détection rend la TOF particulièrement adaptée à l'étude du transport dispersif dans les semi-conducteurs amorphes.

Les deux techniques, TPC et TOF, permettent, grâce à des traitements numériques avancés, d'accéder à la densité des états localisés. Parmi les méthodes couramment utilisées, on peut citer :

- les méthodes de transformation de Laplace, notamment la méthode à basse et à haute résolution (LT) et (HLT) respectivement.
- la méthode de régularisation de Tikhonov.
- les méthodes pré-transit et post-transit propres à la technique de TOF, permettant de déterminer avec précision le temps de transit et d'interpréter la dynamique de piégeage.

Ces approches mathématiques permettent de reconstruire différentes formes de DOS, notamment :

- des distributions exponentielles caractéristiques des queues de bande.
- ainsi que des composantes gaussiennes, traduisant la présence d'états profonds localisés.

Une compréhension fine de ces distributions d'états est essentielle, car elles gouvernent directement les propriétés de transport des porteurs de charge. Elle joue ainsi un rôle crucial dans la conception, l'optimisation et la fiabilité des dispositifs électroniques et optoélectroniques basés sur les semi-conducteurs amorphes, tels que les détecteurs à rayons X, les cellules photovoltaïques et les mémoires résistives [7].

2.4. Traitement analytique du signal de photocourant dans le cadre des processus de piégeage multiples :

2.4.1. Cas de l'expérience de photoconductivité transitoire standard (TPC)

Il y a une trentaine d'années, Naito [49] a apporté une avancée significative en parvenant à résoudre, à l'aide de la transformée de Laplace, le système d'équations proposé par Noolandi [4] pour décrire les processus de piégeage et de libération multiples.

Dans le cadre de l'analyse théorique de cette mesure, il est pertinent d'adopter certaines hypothèses simplificatrices afin de rendre le problème traitable analytiquement. On suppose ainsi une conduction unipolaire, des sections efficaces de capture identiques pour l'ensemble des états localisés, ainsi que des conditions de petit signal. Sous ces hypothèses, les équations fondamentales du modèle de piégeage multiple peuvent être exprimées comme suit [45] :

$$\frac{dp(t)}{dt} = -\sum_i \frac{dp_i(t)}{dt} - \frac{p(t)}{\tau} + p_0 \delta(t) \quad (2.10)$$

$$\frac{dp_i(t)}{dt} = \omega_i p(t) - \gamma_i p_i(t) \quad (2.11)$$

La constante du taux de capture :

$$\omega_i = \sigma_e v_{th} g(E_i) \Delta E \quad (2.12)$$

dont σ_e est la section efficace de capture et v_{th} la vitesse thermique. La constante du taux d'émission γ_i est donnée par :

$$\gamma_i = \nu \exp\left(-\frac{E_i}{k_B T}\right) \quad (2.13)$$

où E_i est le i -ème niveau d'énergie situé au-dessous du bord de la bande de conduction ou au-dessus du bord de la bande de valence, ν est la fréquence de tentative d'échappement [98].

La fonction delta dans l'équation (2.10) définit la condition de l'état initial pour l'expérience de photoconductivité transitoire [49,73,74].

Les deux équations (2.10) et (2.11) peuvent être résolues en utilisant la transformée de Laplace ou de Fourier. Dans notre étude, nous avons choisi la transformée de Laplace pour les raisons suivantes :

- Elle permet de contourner la difficulté de résolution des équations différentielles.
- Elle offre une résolution algébrique.
- Enfin, la convergence est rapide.

Les solutions suivantes résument la configuration de l'expérience de photoconductivité transitoire (TPC) ; les solutions seront discutées ultérieurement dans le chapitre 3.

Pour l'expérience de la photoconductivité transitoire, le photo-courant est donné par la formule suivante:

$$I(t) = q\mu_0 F p(t) \quad (2.14)$$

A partir des équations en haut, la distribution des états localisés peut être donnée par :

$$g(E_0) = \frac{1}{\sigma_e v_{th} K_B T} \left[\frac{d}{d \ln(s)} \left(\frac{I(0)}{I(s)} \right) - s \right] \quad (2.15)$$

où :

$$E_0 = K_B T \ln \left(\frac{v}{s} \right) \quad (2.16)$$

$I(0)$ est estimé par l'extrapolation de $I(t)$ à $t = t_0$. Enfin, le courant de Laplace s'écrit par

$$I(s) = \frac{I(0)}{a(s)} = \frac{I(0)}{s + \frac{1}{\tau} + s \int_0^{EF} \frac{\sigma_e v_{th} g(E)}{s + v \exp \left(-\frac{E}{K_B T} \right)} dE} \quad (2.17)$$

dont :

$$a(s) = s \left[1 + \int_0^{E_{min}} \frac{\sigma_p v g(E)}{s + v \exp(-E/kT)} dE \right] \quad (2.18)$$

À partir de la relation (2.17), il est possible de simuler les courants transitoires en appliquant la transformation inverse de Laplace donnée par l'expression (2.2). Il est essentiel de noter que la dépendance de la densité des états localisés est explicitement contenue dans l'équation (2.17), et ainsi, pour simuler les courants transitoires, une telle connaissance doit être acquise au préalable. Cette fonction est donnée par la relation (2.15), qui permet d'avoir accès à la distribution énergétique des états piégeants au sein du matériau.

On peut ainsi effectuer la transformée de Laplace de $I(t)$ par une simple intégration numérique sur les N points de l'échantillon

$$I(s) = \sum_{j=2}^{N-1} I(t_j) e^{-t_j s} \Delta t_j \quad (2.19)$$

où : $\Delta t_j = (t_{j+1} - t_{j-1})/2$, et la distribution des états localisés peut être obtenue à partir des équations (2.15) et (2.16). La distribution obtenue n'est pas affectée par τ , comme le montre

l'équation (2.15). De ce fait, cette méthode est valable dans les régimes avant et après la recombinaison de la photoconductivité transitoire.

2.4.2. Cas de l'expérience de photoconductivité transitoire du temps de vol

Pour une analyse rigoureuse des expériences de temps de vol (TOF), les hypothèses suivantes doivent être intégrées lors de la résolution des équations de continuité[97] :

- (i) Transport dominé par les états de bande : Le mouvement des porteurs photogénérés est principalement régi par un mécanisme de transport en bande, influencé par les interactions avec les états localisés (pièges) du matériau.
- (ii) Unicité des porteurs mobiles : Le modèle considère exclusivement un type de porteurs (électrons ou trous), en fonction des paramètres expérimentaux.
- (iii) Uniformité des sections efficaces de capture : Tous les états localisés partagent la même section efficace de capture, simplifiant la modélisation des processus de piégeage et dépiégeage.
- (iv) Non-saturation des états localisés : Les pièges restent actifs et disponibles pour interagir continuellement avec les porteurs mobiles. Cette approximation est applicable lors de la mesure du photo courant transitoire en TOF sous des conditions d'excitation lumineuse brève.

Dans ce cadre théorique, les équations fondamentales décrivant le transport en bande contrôlé par les pièges sont formulées comme suit :

$$\frac{\partial p(x,t)}{\partial t} = -\sum_i \frac{\partial p_i(x,t)}{\partial t} - \mu_0 F \frac{\partial p(x,t)}{\partial x} + p_0 \delta(t) \delta(x) \quad (2.20)$$

$$\frac{\partial p_i(x,t)}{\partial t} = \omega_i p(x,t) - \gamma_i p_i(x,t) \quad (2.21)$$

où x représente la distance à partir de la surface éclairée, $p(x,t)$ désigne la densité des trous libres, $p_i(x,t)$ la densité des trous piégés dans le i -ème état localisé, et p_0 la densité de porteurs libres injectés par unité de surface. $E_i = i\Delta E$ correspond au i -ème niveau d'énergie au-dessus du bord de mobilité. Les fonctions delta présentes dans l'équation (2.20) fixent la condition initiale de l'expérience de temps de vol (TOF).

Dans le cadre de l'expérience TOF, le photo-courant est alors donné par :

$$I(t) = \frac{q\mu_0 F}{L} \int_0^L p(x,t) dx \quad (2.22)$$

La transformée de Laplace de ce dernier nous donne :

$$I(s) = qp_0 \frac{1 - \exp[-a(s) t_0]}{a(s) t_0} \quad (2.23)$$

Nous dérivons l'équation (2.23) par rapport à $\ln(s)$, on trouve :

$$\frac{d}{d \ln(s)} \left[\frac{1}{I(s)} \right] = \frac{t_0}{qp_0} \frac{da(s)}{d \ln(s)} B(s) \quad (2.24)$$

où :

$$B(s) = \frac{1 - [1 + a(s) t_0] \exp[-a(s) t_0]}{\{1 - \exp[-a(s) t_0]\}^2} \quad (2.25)$$

La distribution des états localisés dans les conditions de l'expérience du temps de vol est obtenue à partir de la relation suivante :

$$g(E_0) = \frac{1}{\sigma_p \nu k_B T} \left\{ \frac{1}{B(s)} \frac{d}{d \ln(s)} \left[\frac{I(0)}{I(s)} \right] - s \right\} \quad (2.26)$$

Après avoir présenté les solutions des équations du modèle de piégeage multiple dans le cadre des expériences de la photoconductivité standard et du temps de vol (TOF), on remarque que les expressions analytiques du photocourant propres à chaque configuration reposent toutes sur l'utilisation de la transformation inverse de Laplace. Il convient de rappeler que cette approche constitue un problème mal posé, notamment en ce qui concerne l'unicité de la solution. Dès lors, une validation rigoureuse de cette méthode s'impose, afin de pouvoir l'exploiter avec fiabilité dans les analyses et les simulations ultérieures.

Validation de la méthode GWR

Dans un premier temps, nous avons entrepris de valider la méthode GWR par la simulation théorique des courants transitoires observés dans les expériences de type TPC et TOF, en nous appuyant sur la formulation analytique proposée par Naito [49,93,94,97]. Cette méthode est appliquée à différentes valeurs du paramètre τ , en tenant compte de distributions représentatives des états localisés caractéristiques des semi-conducteurs amorphes. Plus précisément, deux cas types sont considérés :

1. une distribution de type queue de bande purement exponentielle,
2. une distribution exponentielle superposée par une gaussienne.

Cette approche vise à tester l'applicabilité de la méthode GWR dans des configurations réalistes, tout en évaluant sa capacité à reproduire fidèlement les dynamiques de transport électronique discutées précédemment. La pertinence de cette méthode en fait un outil central

pour l'analyse des résultats numériques développés dans le chapitre 3, où elle constituera le pilier des calculs réalisés.

Les paramètres physiques employés dans nos calculs sont :

$$\sigma v = 10^{-7} (cm^3 / s), k_B = 8.62 \times 10^{-5} eV / K, T_0 = 500 K.$$

Les figures 2.3(a) et 2.4(a) présentent les photocourants simulés pour différentes valeurs de τ , respectivement pour les distributions exponentielle, et superposée d'une gaussienne . Ces distributions sont décrites par les expressions suivantes :

- Pour la distribution exponentielle :

$$g(E) = g_0 \exp\left(\frac{-E}{k_B T_0}\right) \quad \text{où : } g_0 = 10^{21} cm^{-3} . eV^{-1} \quad (2.27)$$

- Pour la distribution exponentielle + gaussienne :

$$g(E) = g_0 \exp\left(\frac{-E}{k_B T_0}\right) + g_G \exp\left[-\left\{\frac{E - E_G}{E_W}\right\}^2\right] \quad (2.28)$$

$$\text{où : } g_0 = 10^{21} cm^{-3} eV^{-1}, g_G = 10^{19} cm^{-3} eV^{-1}, E_G = 0.4 eV, E_W = 0.06 eV.$$

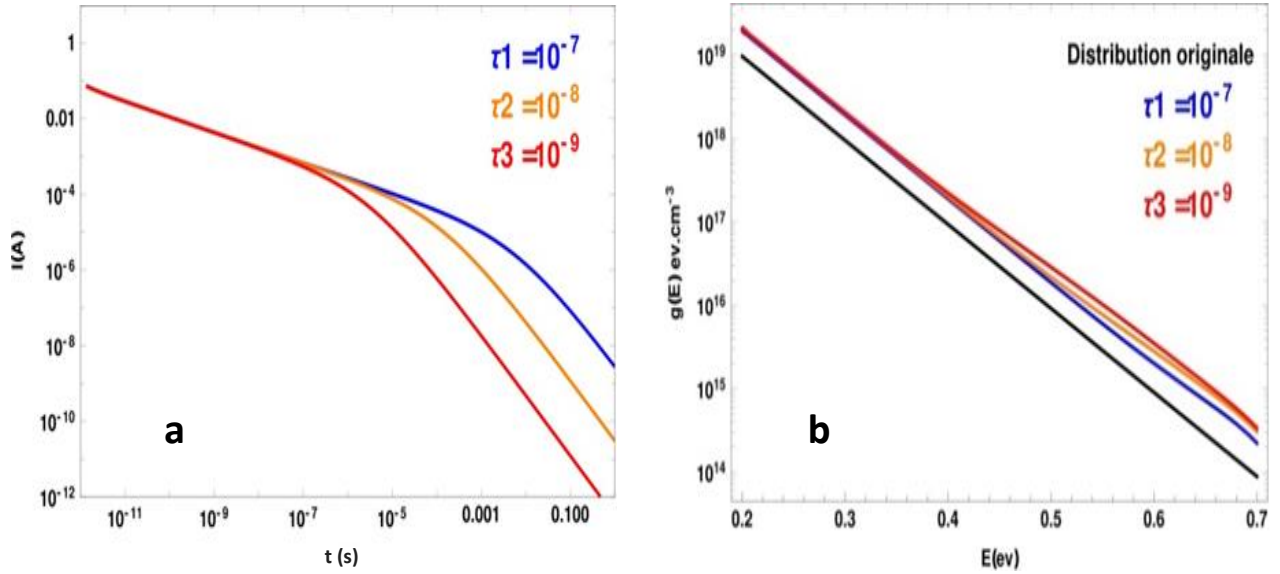


Figure 2.3 : (a) Photocourant transitoire (TPC) simulé pour une distribution exponentielle des états localisés à différentes valeurs de τ . (b) Densité des états localisés simulée à partir de la figure 2.3 (a).

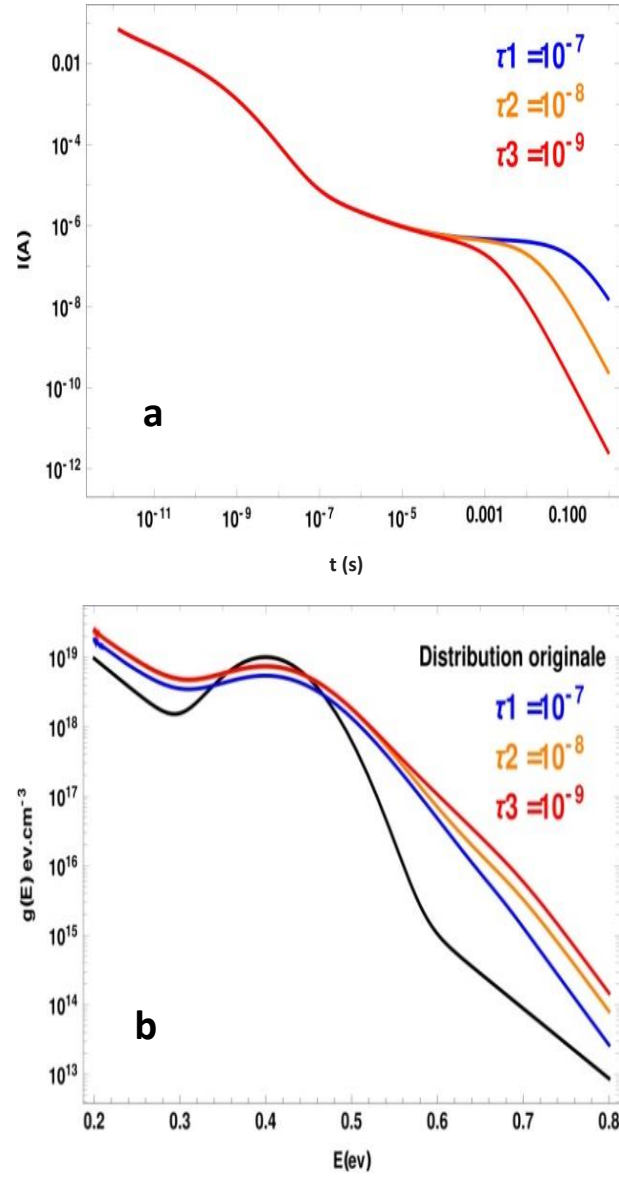


Figure 2.4 : **(a)** Photocourant transitoire (TPC) simulé pour une distribution gaussienne des états localisés à différentes valeurs de τ . **(b)** Densité des états localisés simulée à partir du la figure 2.4 (a).

L'analyse des courbes simulées montre que les durées de vie effectives des porteurs, estimées à partir des points d'inflexion des photocourants transitoires, augmentent avec τ . Cette observation souligne l'impact direct de ce paramètre sur la dynamique des charges, et notamment sur les phénomènes de piégeage, qui retardent la relaxation des porteurs. Plus la valeur de τ est grande, plus la décroissance du courant est lente : cela indique un temps de libération plus long des porteurs, ce qui est en accord avec la théorie du transport dispersif [1]. La forme quasi-linéaire des courbes en échelle log-log confirme le comportement anormal (non-exponentiel), bien connu dans les systèmes désordonnés.

Afin de démontrer l'applicabilité de la méthode LT (Laplace Transform) dans l'extraction de la densité des états, nous avons reconstitué les profils de densité d'états localisés à partir des courants simulés dans les figures précédentes. Les figures 2.3 et 2.4 illustrent ces résultats. Il est remarquable que les deux types de distributions (exponentielle et mixte) sont fidèlement reconstruits. Des résultats similaires ont été obtenus dans les travaux de Naito et al. pour des films amorphes de type a-Se et a-Si:H, où la méthode LT est utilisée pour extraire les profils de densité d'états à partir des mesures de la photoconductivité[49,93,94,97].

Les profils reconstruits pour chaque τ parviennent à capturer à la fois la partie exponentielle et le pic gaussien, ce qui témoigne la robustesse de la méthode GWR couplée à la transformée de Laplace pour l'étude des propriétés électroniques des semi-conducteurs amorphes.

2.5. Validation expérimentale de la méthode GWR appliquée au sélénium dopé par l'arsenic

Après avoir démontré l'applicabilité de la transformée de Laplace pour la reconstruction des distributions d'états localisés à partir des photocourants transitoires simulés, nous avons poursuivi notre étude en appliquant la méthode GWR à des cas expérimentaux réels. Cette étape vise à valider la pertinence de la modélisation numérique en confrontant les résultats simulés aux données expérimentales disponibles pour le sélénium amorphe dopé par l'arsenic (a-Se:As).

Données expérimentales et conditions d'étude

Les photocourants transitoires mesurés ont été obtenus sur des échantillons de sélénium dopé avec deux concentrations distinctes en arsenic : 0.2 at% et 0.5 at%, à différentes températures, rapporté dans l'étude de Benkhedir et al [43].

Les photocourants théoriques ont été calculés à l'aide du modèle de densité d'états localisés proposé par Serdouk et Benkhedir [6], dont l'expression est donnée par les équations:

$$g(E)_{0.5at\%As} = 4.074 \times 10^{23} \exp(-28.785 E) + 1.593 \times 10^{18} \exp\left[-\left\{\frac{E - 0.375}{0.045}\right\}^2\right] \quad (2.29)$$

$$g(E)_{0.2at\%As} = 6.636 \times 10^{21} \exp(-37.027 E) + 1.949 \times 10^{15} \exp\left[-\left\{\frac{E - 0.406}{0.046}\right\}^2\right] \quad (2.30)$$

Ces densités d'états incluent à la fois des queues de bande exponentielles et des pièges profonds gaussiens, représentant une structure énergétique réaliste des états localisés dans le sélénium stabilisé.

Méthodologie de simulation

La méthode GWR a été utilisée pour simuler les photocourants transitoires en intégrant les effets :

- de piégeage et de libération dans les états localisés.
- de la durée de vie effective des porteurs obtenue lors des simulations précédentes.
- et de la densité d'états énergétique propre à chaque concentration d'arsenic.

Pour affiner la précision des résultats, les courants calculés ont été transformés dans le domaine de Laplace, puis inversés numériquement, afin d'obtenir les profils temporels des photocourants.

Les paramètres physiques aux conditions expérimentales de la mesure dans le sélénium amorphe stabiliser :

Température (k)	La durée de vie de recombinaison (s)	Constantes de piégeage
253	8.94×10^{-6}	$\sigma v = 10^{-7} \frac{cm^3}{s}, v = 10^{12} s^{-1}$
263	7.645×10^{-6}	
273	5.963×10^{-6}	
283	3.646×10^{-6}	

Présentation des résultats

La Figure 2.5 représente une comparaison entre les photocourants transitoires mesurés expérimentalement (TPC) et ceux simulés numériquement pour le sélénium amorphe dopé avec 0.2 at% As, à différentes températures. Une comparaison équivalente pour une concentration de 0.5 at% As est démontré sur la Figure 2.6. Les courants calculés reproduisent fidèlement les caractéristiques temporelles des signaux mesurés, notamment les temps d'inflexion.

L'augmentation de la concentration en arsenic accentue l'effet des états profonds, ralentissant la décroissance du photocourant, ce qui est bien capturé par le modèle.

Dans les deux cas, les résultats montrent une excellente concordance entre les courants mesurés et simulés, confirmant ainsi la validité de l'approche GWR combinée à la transformée de Laplace pour modéliser avec précision la réponse transitoire du système.

Ces résultats confirment les prédictions théoriques et expérimentales établies dans la littérature sur le transport dispersif dans les systèmes désordonnés, et valident la méthodologie adoptée pour les simulations numériques du chapitre 3.

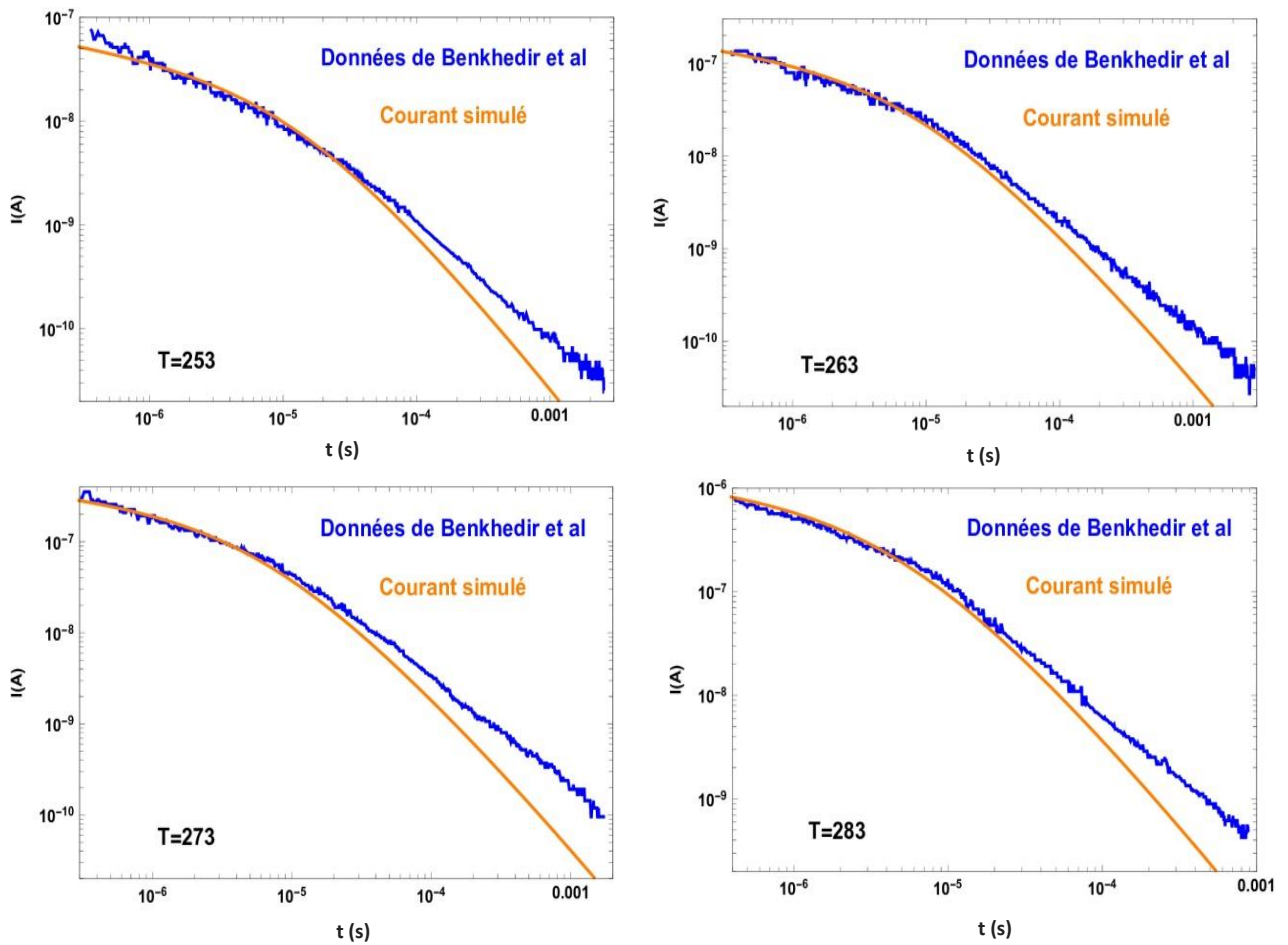


Figure 2.5 : Comparaison entre le photocourant transitoire mesuré et simulé par la méthode GWR dans a-Se :0.2at%As à différente température.

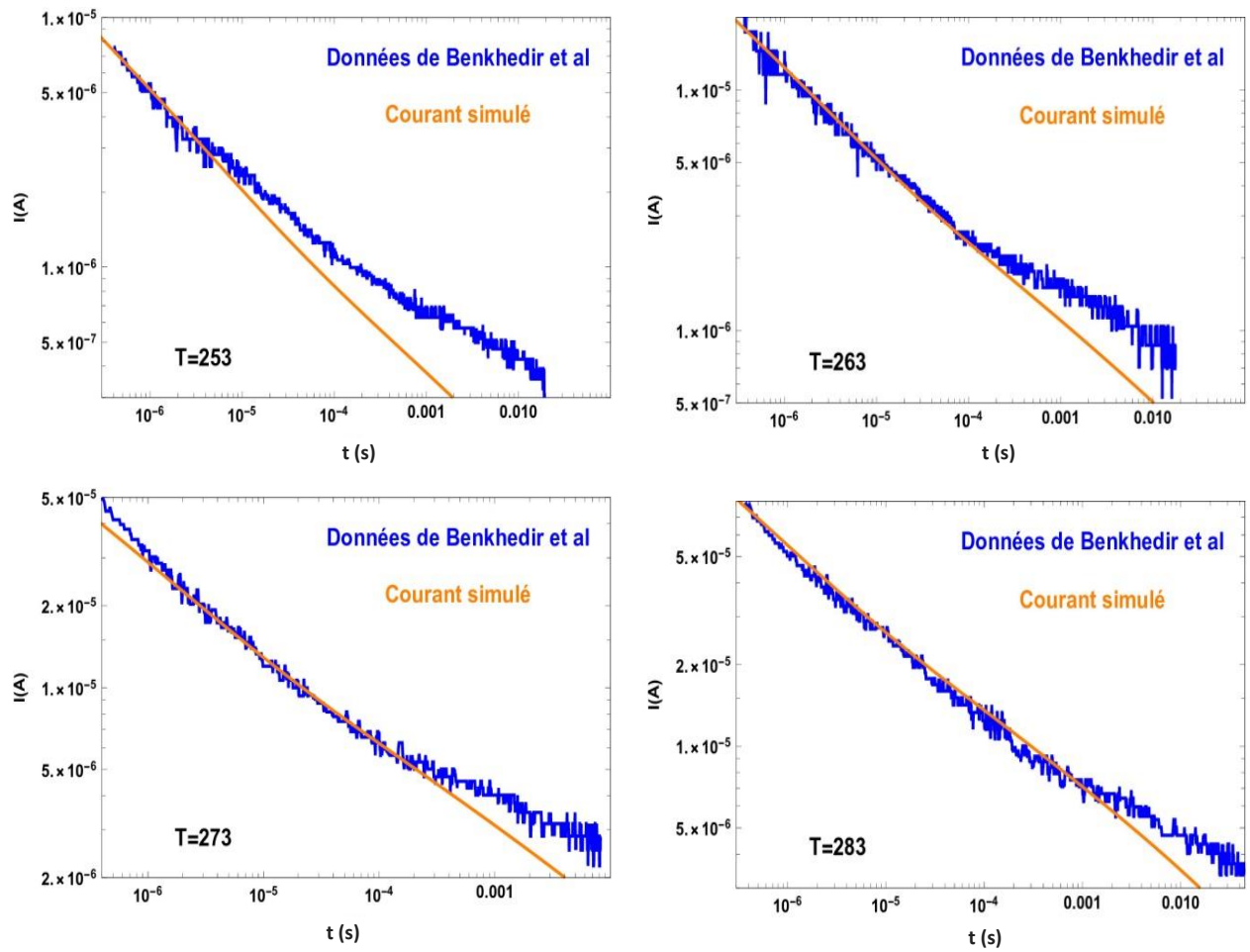


Figure 2.6 : Comparaison entre le photocourant transitoire mesuré et simulé par la méthode GWR dans a-Se :0.5 at%As à différente température.

Chapitre 3

Modèle de Piégeage Multiple Fractionnaire des Photocourants Transitoires dans les Semi-conducteurs Amorphes.

Comme mentionné dans le chapitre précédent, les équations décrivant le mécanisme de piégeage multiple (MTM), dérivées dans le cadre des expériences de temps de vol (TOF) et de photoconductivité transitoire (TPC), seront reprises et approfondies dans le présent chapitre. Cette reprise vise à assurer une continuité logique et à faciliter le suivi conceptuel pour le lecteur. L'objectif est de résoudre ces équations à l'aide de la transformée de Laplace, une méthode mathématique puissante permettant de traiter efficacement les équations différentielles dans le domaine temporel.

Dans un premier temps, nous analyserons la configuration TPC, qui permet d'étudier la réponse en courant induite par une impulsion lumineuse brève dans un dispositif à électrodes coplanaires. Par la suite, nous aborderons la configuration TOF, en détaillant les deux géométries standards : L-TOF (longitudinale) et T-TOF (transversale). Ces deux configurations sont essentielles pour caractériser les propriétés de la mobilité et de la recombinaison des porteurs dans les semi-conducteurs désordonnés.

Afin d'approfondir notre compréhension du transport dispersif, nous introduirons ensuite une extension fractionnaire du modèle de piégeage multiple. Cette approche repose sur le calcul fractionnaire, qui remplace les dérivées entières classiques par des opérateurs d'ordre non entier. Physiquement, cela permet de mieux capturer la nature mémoire des processus de piégeage/dépiégeage et de relaxation observés dans les matériaux désordonnés, où les lois de transport suivent souvent des décroissances de type loi de puissance au lieu de comportements exponentiels. Le calcul fractionnaire offre ainsi un cadre plus général et plus fidèle aux observations expérimentales que le modèle classique.

3.1. Modèle de piégeage multiple de la photoconductivité transitoire (TPC)

Dans cette première section, nous entamons l'étude détaillée du modèle de piégeage multiple (MTM) appliqué à la photoconductivité transitoire (TPC). Cette approche constitue une étape essentielle pour la modélisation du transport dispersif dans les semi-conducteurs amorphes. Le modèle repose sur l'hypothèse selon laquelle les porteurs photogénérés peuvent

être temporairement piégés dans des états localisés avant d'être libérés et contribuer au courant mesuré.

Nous débuterons par la présentation du cadre classique du MTM, en formulant les équations fondamentales gouvernant l'évolution temporelle des porteurs libres et piégés en présence de la recombinaison. La résolution par la transformée de Laplace permettra d'obtenir des expressions analytiques du courant transitoire, base indispensable pour la comparaison avec les résultats expérimentaux.

Cette formulation classique sera ensuite généralisée dans les sections ultérieures par l'introduction du calcul fractionnaire, permettant une meilleure représentation des phénomènes non exponentiels et à mémoire observés dans les matériaux désordonnés.

3.1.1. Équations de base du modèle MTM avec recombinaison

Dans le cadre classique [49,73,74], les équations décrivant l'évolution des densités des porteurs libres et piégés avec recombinaison s'écrivent :

$$\frac{dn(t)}{dt} = -\sum_i \frac{dn_i(t)}{dt} - \frac{n(t)}{\tau} + n_0 \delta(t) \quad (3.1)$$

$$\frac{dn_i(t)}{dt} = \omega_i n(t) - \gamma_i n_i(t) \quad (3.2)$$

en appliquant la transformée de Laplace aux équations (3.1) et (3.2), on obtient :

$$sn(s) = -\sum_i sn_i(s) - \frac{n(s)}{\tau} + n_0 \quad (3.3)$$

$$sn_i(s) = \omega_i n(s) - \gamma_i n_i(s) \quad (3.4)$$

à partir de (3.4), on isole $n_i(s)$:

$$n_i(s)(s + \gamma_i) = \omega_i n(s) \Rightarrow n_i(s) = \frac{\omega_i n(s)}{s + \gamma_i}, \quad (3.5)$$

l'injection de (3.5) dans (3.3) conduit à :

$$sn(s) = -\sum_i s \frac{\omega_i n(s)}{s + \gamma_i} - \frac{n(s)}{\tau} + n_0 \Rightarrow n(s) = \frac{n_0}{s + \sum_i \frac{s\omega_i}{s + \gamma_i} + \frac{1}{\tau}} \quad (3.6)$$

pour trouver l'expression du photocourant , on pose

$$n(s) = \frac{n_0}{a(s)} \quad (3.7)$$

dont :

$$a(s) = s + \sum_i \frac{s\omega_i}{s + \gamma_i} + \frac{1}{\tau} = s + \frac{1}{\tau} + s \int_0^{E_F} \frac{\sigma v g(E)}{s + v \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right)} dE \quad (3.8)$$

avec :

$$\sum_i \frac{s\omega_i}{s + \gamma_i} = s \int_0^{E_F} \frac{\sigma v g(E)}{s + v \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right)} dE \quad (3.9)$$

la relation du photocourant en régime transitoire est donnée par :

$$I(t) = q\mu_0 F n(t) \quad (3.10)$$

la transformée de Laplace de cette expression s'écrit :

$$I(s) = q\mu_0 F n(s) \quad (3.11)$$

ainsi, l'expression finale du photocourant dans le domaine de Laplace devient :

$$I(s) = \frac{I(0)}{a(s)} = \frac{I(0)}{s + \frac{1}{\tau} + s \int_0^{E_F} \frac{\sigma v g(E)}{s + v \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right)} dE} \quad (3.12)$$

Cette expression constitue la base de la comparaison entre différents régimes de transport. Avant d'aborder la généralisation fractionnaire, rappelons que cette approche classique repose sur une mémoire courte du système, c'est-à-dire que l'évolution du courant dépend surtout de l'état immédiat du système. Toutefois, dans les milieux fortement désordonnés, cette hypothèse peut être trop restrictive. Dans la section suivante, nous proposerons une extension du modèle classique en cadre fractionnaire, en intégrant explicitement deux éléments essentiels :

La mémoire à long terme, qui permet de tenir compte des effets historiques sur le comportement des porteurs.

La diffusion spatiale, qui introduit un couplage plus réaliste entre les effets de dérive, de piégeage et de diffusion.

Ce passage au modèle fractionnaire nous permettra d'explorer un comportement plus complexe et plus fidèle au transport observé expérimentalement dans les semi-conducteurs amorphes.

3.2. Modèle de piégeage multiple fractionnaire de TPC

Poursuivant l'analyse abordée dans la section précédente, nous introduisons ici une généralisation du modèle de piégeage multiple en nous appuyant sur le formalisme du calcul fractionnaire. Cette nouvelle formulation vise à surmonter les limitations du modèle classique, notamment dans les matériaux amorphes où les processus de transport présentent une forte dispersion temporelle et une mémoire à long terme. Le comportement des porteurs dans ces milieux est en effet régi par des lois de relaxation non exponentielles, que le calcul fractionnaire permet de décrire plus fidèlement.

3.2.1. Reformulation du modèle intégral

Afin d'introduire ce cadre généralisé, nous partons de l'expression classique (3.2) décrivant la densité des porteurs piégés dans un état énergétique donné où la solution cherchée est :

$$n_i(t) = \omega_i \int_0^t e^{-\gamma_i(t-t')} n(t') dt' \quad (3.13)$$

avec $\gamma_i = v e^{-\frac{\varepsilon_i}{k_B T}}$ et $\omega_i = \sigma \vartheta g(\varepsilon_i) \Delta \varepsilon_i$

cette expression, une fois réinjectée dans l'équation différentielle régissant la densité des porteurs libres (3.1) donne :

$$\frac{dn}{dt} = -\frac{d}{dt} \int_0^t \left(\sum_i \sigma \vartheta g(\varepsilon_i) \Delta \varepsilon_i e^{-\gamma_i(t-t')} \right) n(t') dt' - \frac{n}{\tau} + n_0 \delta(t) \quad (3.14)$$

en considérant un spectre continu d'états localisés dans le matériau, cette équation devient :

$$\frac{dn}{dt} = -\frac{d}{dt} \int_0^t \left(\int_0^\infty \sigma \vartheta e^{-v(t-t') e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T}}} g(\varepsilon) d\varepsilon \right) n(t') dt' - \frac{n}{\tau} + n_0 \delta(t) \quad (3.15)$$

ce double intégrale peut être simplifiée à l'aide d'un noyau de mémoire, donnant :

$$\frac{dn}{dt} = -\frac{d}{dt} \int_0^t Q(t-t') n(t') dt' - \frac{n}{\tau} + n_0 \delta(t) \quad (3.16)$$

où :

$$Q(t) = \int_0^\infty \sigma \vartheta e^{-v t e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T}}} g(\varepsilon) d\varepsilon \quad (3.17)$$

la transformée de Laplace de ce noyau de mémoire s'écrit :

$$Q(s) = \int_0^\infty \frac{\sigma \vartheta g(\varepsilon) d\varepsilon}{s + \nu e^{-\frac{\varepsilon_i}{k_B T}}} \quad (3.18)$$

en insérant cette expression dans l'équation de conservation des porteurs, on obtient :

$$\left(s[1 + Q(s)] + \frac{1}{\tau} \right) n(s) = n_0 \quad (3.19)$$

ce qui donne :

$$n(s) = \frac{n_0}{s[1 + Q(s)] + \frac{1}{\tau}} \quad (3.20)$$

le photocourant transitoire dans le domaine de Laplace est alors :

$$I(s) = q\mu F n(s) = \frac{I_0}{s(1 + Q(s)) + \frac{1}{\tau}} \quad (3.21)$$

Cette formulation constitue le socle du modèle fractionnaire, qui tient compte des effets de mémoire et de relaxation lente dans les matériaux amorphes.

3.2.2. Cas d'une densité d'états exponentielle

Dans la continuité de la section précédente, nous considérons ici un cas particulier pour la fonction de densité d'états localisés : une distribution exponentielle. Ce choix, couramment utilisé pour représenter les matériaux amorphes, permet de simplifier l'expression du noyau mémoire tout en conservant les caractéristiques essentielles du transport dispersif. Il aboutit à une formulation naturelle en termes de dérivées fractionnaires, facilitant ainsi le lien entre relaxation non exponentielle et mémoire à long terme.

Supposons que le produit $\omega_0 = \sigma \vartheta$ soit indépendant de l'énergie et que la densité d'états suit la loi : $g(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon_0} \exp(-\varepsilon/\varepsilon_0)$ le noyau de mémoire devient [78,83]:

$$Q(t) = \frac{\omega_0}{\varepsilon_0} \int_0^\infty \exp(-\nu t e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T}}) \exp\left(-\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}\right) d\varepsilon \quad (3.22)$$

en introduisant un changement de variable cette intégrale possède une asymptotique pour $t \rightarrow \infty$:

$$Q(t) = \frac{\alpha \omega_0}{(\nu t)^\alpha} \int_0^{\nu t} \exp(-\xi) \xi^{\alpha-1} d\xi \sim \omega_0 \alpha \Gamma(\alpha) (\nu t)^{-\alpha} \quad t \rightarrow \infty \quad (3.23)$$

où :

$$\alpha = \frac{k_B T}{\varepsilon_0} \in]0, 1] \quad (3.24)$$

finalement, le noyau de la mémoire se refactorise sous forme asymptotique [77,78] :

$$Q(t) = \frac{\omega_0 \alpha \Gamma(\alpha)}{(\omega_0 N_f / N_t)^\alpha} t^{-\alpha} = \frac{\pi \omega_0 \alpha}{(\omega_0 N_f / N_t)^\alpha \sin \alpha \pi \Gamma(1-\alpha)} \frac{t^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)} = \omega_0 \frac{(c_\alpha t)^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)}, \quad 0 < \alpha \leq 1 \quad (3.25)$$

$$\int_0^t Q(t-t') n(t') dt' = \frac{\omega_0 c_\alpha^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t (t-t')^{-\alpha} n(t') dt' \quad (3.26)$$

avec :

$$c_\alpha = \omega_0 \frac{N_f}{N_t} \left(\frac{\sin \pi \alpha}{\pi \alpha} \right)^{1/\alpha} \quad (3.27)$$

en réinjectant cette expression (3.26) dans l'équation de conservation (3.16), on obtient : une équation différentielle fractionnaire :

$$\frac{dn}{dt} = -\omega_0 c_\alpha^{-\alpha} \frac{d}{dt} \left[\frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t (t-t')^{-\alpha} n(t') dt' \right] - \frac{n}{\tau} + n_0 \delta(t) \quad (3.28)$$

$$\frac{dn}{dt} + \omega_0 C_\alpha^{-\alpha} D_t^\alpha n = -\frac{n}{\tau} + n_0 \delta(t) \quad (3.29)$$

où :

$D_t^\alpha n$ est la dérivée fractionnaire de Riemann-Liouville d'ordre $\alpha = k_B T / \varepsilon_0$, définie par :

$$D_t^\alpha n = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{d}{dt} \int_0^t \frac{n(\tau)}{(t-\tau)^\alpha} d\tau \quad (3.30)$$

la transformée de Laplace de l'équation (3.29) donne :

$$s \tilde{n}(s) + \omega_0 C_\alpha^{-\alpha} \tilde{n}(s) + \frac{\tilde{n}(s)}{\tau} = n_0 \quad (3.31)$$

ce qui permet d'écrire :

$$\tilde{n}(s) = \frac{n_0}{s \left(\frac{\omega_0}{C_\alpha^\alpha} s^{\alpha-1} \right) + \frac{1}{\tau}} \quad (3.32)$$

et le photocourant transitoire associé devient :

$$\tilde{I}(s) = \frac{I_0}{s \left(\frac{\omega_0}{C_\alpha^\alpha} s^{\alpha-1} \right) + \frac{1}{\tau}}, \quad I_0 = q \mu F n_0 \quad (3.33)$$

Cette forme finale traduit explicitement la contribution des effets de mémoire à long terme via l'ordre fractionnaire α , en établissant un lien direct entre la dynamique du transport et la distribution énergétique des états localisés dans la bande interdite du matériau amorphe.

3.2.3. Formes asymptotiques et interprétation physique

Dans cette sous-section, nous examinons les comportements asymptotiques des solutions précédemment obtenues, afin d'en dégager une interprétation physique plus claire du transport dans les milieux désordonnés à longue mémoire.

pour $s \rightarrow 0$ (correspondant aux grands temps), l'expression de $\tilde{n}(s)$ se simplifie :

$$\tilde{n}(s) = \tau n_0 \frac{\chi}{s^{\alpha+\chi}}, \quad (3.34)$$

ce qui donne après transformation inverse :

$$n(t) = n_0 \tau \chi^{\alpha-1} E_{\alpha,\alpha}(-\chi t^\alpha) \quad (3.35)$$

où $E_{\alpha,\beta}(z)$ est la fonction de Mittag-Leffler [99] à deux paramètres définie par :

$$E_{\alpha,\beta}(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\Gamma(\alpha n + \beta)} \quad (3.36)$$

même en l'absence de la recombinaison ($\tau \rightarrow \infty$), le système présente une décroissance intrinsèque due à la mémoire du milieu :

$$\tilde{n}(s) = \frac{n_0}{s \left(1 + \frac{\omega_0}{C_\alpha^\alpha} s^{\alpha-1}\right)} = n_0 \frac{s^\alpha}{s^{\alpha-1} + \frac{\omega_0}{C_\alpha^\alpha}} \quad (3.37)$$

ce qui donne :

$$n(t) = n_0 E_{1-\alpha} \left(-\frac{\omega_0}{C_\alpha^\alpha} t^{1-\alpha} \right) \quad (3.38)$$

Cette solution met en évidence la dynamique non-exponentielle du système, typique des milieux amorphes. Le terme de dérivée fractionnaire traduit ici un processus de relaxation à mémoire longue, où les temps caractéristiques de dépiégeage sont fortement dispersés. Cela rend compte de la complexité du transport dans les matériaux désordonnés, où les porteurs de charge peuvent rester piégés sur de longues durées avant de contribuer au courant. La fonction de Mittag-Leffler permet de généraliser les lois exponentielles usuelles, fournissant une meilleure description des processus à cinétique anormale observés expérimentalement.

3.3. Analyse des résultats simulés et discussion

Les simulations présentées dans la figure 3.1 illustrent l'évolution temporelle des photocourants normalisés en configuration de la photoconductivité transitoire (TPC), modélisée par un cadre fractionnaire de piégeage multiple. Ces résultats, obtenus numériquement en résolvant les équations cinétiques fractionnaires, mettent en évidence le rôle

clé du paramètre fractionnaire α et la durée de vie de recombinaison τ dans la dynamique de relaxation des porteurs de charge dans des matériaux semi-conducteurs désordonnés.

a. Influence du paramètre α

Dans le panneau (a), où τ est fixe, la variation de α de 0.4 à 0.99 révèle une dépendance marquée de la décroissance du courant. On observe que plus α est faible ($\alpha = 0.4$), plus la relaxation est lente et étirée sur plusieurs ordres de grandeur temporels. Cela résulte du piégeage fréquent et de la réémission des porteurs libres dans les distributions des états localisés. La décroissance du courant suit une loi de puissance. Les porteurs initialement délocalisés sont capturés dans des états profonds, avec des temps de libération prolongés par le désordre structural, menant à un effet de mémoire longue où l'historique des piégeages influence les probabilités futures. Ce type de transport est connu comme un transport dispersif généralement observé dans les semiconducteurs amorphes tels que a-As₂Se₃ [100]. À l'opposé, pour des valeurs plus élevées de α élevés, la décroissance est plus abrupte, approchant d'une relaxation classique. Cela traduit un désordre réduit, où les temps de piégeage sont plus uniformes. Les porteurs sont libérés rapidement, minimisant les effets dispersifs. Le transport est non dispersif souvent reporté dans a-Se [101] et a-Si:H [102] à température ambiante.

b. Effet de la durée de vie τ

Dans le panneau (b), avec α fixe et τ variant, les photocourants transitoires montrent une sensibilité marquée au paramètre τ . Pour des valeurs faibles de τ , la relaxation décale vers les temps courts, car les libérations sont accélérées, réduisant les durées de piégeage moyen et compressant la phase dispersive. Inversement, des valeurs élevées de τ étend le plateau initial et décale la transition vers des temps plus longs, prolongeant l'effet de mémoire en permettant aux porteurs d'explorer une gamme plus large de la densité des états localisés avant la relaxation. Cela illustre comment τ agit comme un facteur d'échelle, préservant les exposants de puissance tout en ajustant la fenêtre temporelle observable. Nos simulations concordent avec les résultats de Naito qui montrent que les photocourants calculés pour une distribution exponentielle avec une température caractéristique $T_0 = 500\text{K}$, décalent les points d'inflexions vers les temps longs avec l'augmentation de τ [49].

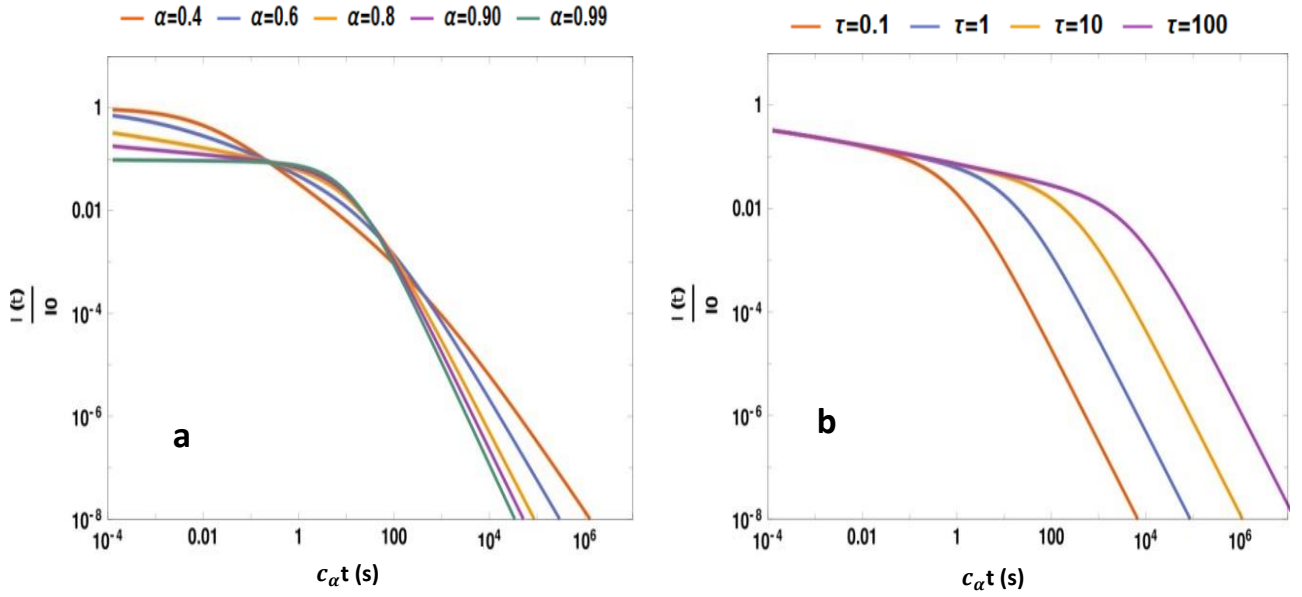


Figure 3.1: (a) Courant transitoire normalisé de TPC en fonction du temps pour différents α , (b) pour différents τ .

3.3.1. Comparaison avec la littérature et apport du modèle fractionnaire

Les travaux de Naito et al.[49,103] ont établi la référence historique en reproduisant quantitativement les courbes expérimentales de TPC, par résolution numérique inverse de la transformée de Laplace appliquée aux équations intégrales du modèle de piégeage multiple. Cette approche, bien que très précise, reste opaque : les effets du désordre énergétique et de la perte de porteurs sont mélangés dans des calculs, sans expression analytique fermée ni lien direct entre les pentes observées. Le modèle développé dans le cadre de ce travail permet d'interpréter finement les caractéristiques des courants transitoires observés dans les expériences de TPC. Dans ce formalisme, les paramètres α et τ jouent des rôles conceptuellement distincts mais étroitement couplés dans la forme des courbes de courant. Le paramètre fractionnaire α , compris entre 0 et 1, encode le degré de dispersion du transport et la force de la mémoire liée au désordre : lorsque α est proche de 1, le comportement se rapproche du transport non dispersif, tandis que pour des valeurs plus faibles de α la décroissance du photocourant est gouvernée par des lois de puissance, avec des queues de courant longues et un régime de transport dispersif. À l'inverse, la durée de vie intervient comme paramètre de recombinaison : pour un α donné, une diminution de τ entraîne un déplacement du point d'inflexion des courbes vers des temps plus courts. L'atténuation rapide de la queue post-transit traduit la disparition accélérée des porteurs libres par recombinaison. Une augmentation de τ prolonge au contraire la contribution des porteurs survivants et allonge

la queue de courant. Ainsi, α contrôle essentiellement la nature dispersive et la pente en loi de puissance des courants, tandis que τ fixe l'échelle de temps sur laquelle les porteurs sont effectivement recombinaison. La combinaison des deux paramètres permet de distinguer, dans les signaux expérimentaux, les régimes dominés respectivement par le transport dispersif et par la recombinaison.

3.4. Extension à la configuration du temps de vol (TOF)

Dans la continuité des sections précédentes, où l'on a modélisé le comportement du courant dans la configuration de TPC (coplanaires) à l'aide d'outils fractionnaires, cette section propose une extension naturelle à la configuration du temps de vol (TOF). L'objectif est d'explorer comment les phénomènes de transport dispersif se traduisent lorsque l'on passe à une géométrie expérimentale plus adaptée à l'étude de la propagation spatiale des porteurs photogénérés sous champ électrique. Alors que la TPC permet d'accéder à la dynamique temporelle globale, la configuration TOF qu'elle soit longitudinale (L-TOF) ou transversale (T-TOF) – permet de suivre la dynamique spatio-temporelle des porteurs. Cela permet d'extraire des paramètres essentiels tels que la mobilité, le temps de transit, et la nature du transport.

3.4.1. Modèle de piégeage multiple en configuration de TOF

On considère un semi conducteur entre deux électrodes espacées d'une distance L , à travers lequel une tension est appliquée. À l'instant $t=0$, une densité surfacique de porteurs est injectée depuis l'anode située en $x=0$. Deux géométries expérimentales sont couramment utilisées : L-TOF (longitudinale) et T-TOF (transversale), figure 2.2 (a) et (b) respectivement. Pour modéliser cette situation, nous faisons les hypothèses suivantes :

1. Le transport des porteurs photogénérés est dominé par le piégeage dans la bande.
2. Le courant est unipolaire (seuls les trous ou les électrons sont mobiles).
3. Les sections efficaces de capture sont identiques pour tous les états localisés.
4. Les états localisés ne sont pas saturés, ce qui est valable sous faible excitation (small-signal).

Les équations fondamentales décrivant l'évolution de la densité de charges libres et piégées sont alors données par :

Configuration L-TOF

$$\frac{\partial n(x, t)}{\partial t} = - \sum_i \frac{\partial n_i(x, t)}{\partial t} - \mu_0 F \frac{\partial n(x, t)}{\partial x} + D_f \frac{\partial^2 n(x, t)}{\partial x^2} + n_0 \delta(t) \delta(x) \quad (3.39)$$

Configuration T-TOF

$$\frac{\partial n(x, t)}{\partial t} = - \sum_i \frac{\partial n_i(x, t)}{\partial t} - \mu_0 F \frac{\partial n(x, t)}{\partial x} - \frac{n(x, t)}{\tau} + D_f \frac{\partial^2 n(x, t)}{\partial x^2} + n_0 \delta(t) \quad (3.40)$$

où :

$x \in [0, L]$ est la coordonnée spatiale.

Les deux équations précédentes sont soumises à la contrainte dynamique suivante, régissant l'évolution des porteurs piégés dans l'état localisé i :

$$\frac{\partial n_i(x, t)}{\partial t} = \omega_i n_i(x, t) - \gamma_i n_i(x, t) \quad (3.41)$$

Les équations en haut dépendent des conditions initiales et aux limites correspondant aux expériences de TOF. La densité injectée est supposée suffisamment faible pour éviter la saturation, et est prise comme constante. Nous notons que ce cadre modélise un processus CTRW unidimensionnel, bien adapté aux matériaux désordonnés. Il permet de rendre compte du comportement dispersif observé expérimentalement. En négligeant la diffusion dans certains régimes, ces équations se simplifient encore et permettent d'obtenir des solutions analytiques pertinentes, comme détaillé dans les travaux [74,75]. La section suivante développera ces solutions dans divers cas limites, mettant en évidence l'influence des paramètres α et τ , et du champ électrique.

Dans ce qui suit nous détaillerons la résolution analytique par la transformée de Laplace pour les deux géométries L-TOF et T-TOF, en mettant en évidence les solutions de la densité de charge et du courant en régime fréquentiel. L'objectif est de relier ces résultats à des quantités mesurables expérimentalement, comme la mobilité effective ou le courant transitoire, et de discuter l'influence des paramètres physiques comme la diffusion ou la densité de pièges.

3.4.2. Résolution analytique dans le cas L-TOF en présence et absence de la diffusion

Pour obtenir les expressions de la densité de charges et du courant, nous allons résoudre les équations du modèle de transport en configuration L-TOF (longitudinale). Par le biais de la transformée de Laplace de l'équation (3.39), on trouve pour les porteurs libres :

$$sn(x, s) = -s \sum_i n_i(x, t) - \mu_0 F \frac{\partial n(x, s)}{\partial x} + D_f \frac{\partial^2 n(x, s)}{\partial x^2} + n_0 \delta(x) \quad (3.42)$$

et pour les porteurs piégés :

$$sn_i(x, s) = \omega_i n_i(x, s) - \gamma_i n_i(x, s) \quad (3.43)$$

à partir de cette dernière, on en déduit que :

$$n_i(x, s) = \frac{\omega_i}{s + \gamma_i} n(x, s) \quad (3.44)$$

en injectant l'équation (3.44) dans (3.42), on obtient :

$$sn(x, s) = -s \left[\sum_i \frac{\omega_i}{s + \gamma_i} \right] n(x, s) - \mu_0 F \frac{\partial n(x, s)}{\partial x} + D_f \frac{\partial^2 n(x, s)}{\partial x^2} + n_0 \delta(x) \quad (3.45)$$

on regroupe les termes on trouve :

$$\mu_0 F \frac{\partial n(x, s)}{\partial x} + \left(s + \sum_i \frac{s \omega_i}{s + \gamma_i} \right) n(x, s) - D_f \frac{\partial^2 n(x, s)}{\partial x^2} = n_0 \delta(x) \quad (3.46)$$

on introduit alors :

$$a(s) = s + s \int_0^1 \frac{\sigma v g(E)}{s + v e^{-E/k_B T}} dE \quad (3.47)$$

ce qui permet de simplifier l'équation de transport en :

$$\mu_0 F \frac{\partial n(x, s)}{\partial x} + a(s) n(x, s) - D_f \frac{\partial^2 n(x, s)}{\partial x^2} = n_0 \delta(x) \quad (3.48)$$

cette équation aux dérivées partielles peut être résolue sous les conditions initiales suivantes :

$$n(x; 0) = 0 \quad n(0; t) = 0 \quad \text{et} \quad n'(0, t) = 0$$

on obtient alors :

$$n(x, s) = \frac{1}{\sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f \cdot a[s]}} n_0 \left(e^{\frac{1}{2}x \left(\frac{\mu_0 F}{D_f} - \sqrt{\frac{(\mu_0 F)^2 + 4D_f \cdot a[s]}{D_f}} \right)} - e^{\frac{1}{2}x \left(\frac{\mu_0 F}{D_f} + \sqrt{\frac{(\mu_0 F)^2 + 4D_f \cdot a[s]}{D_f}} \right)} \right) \quad (3.49)$$

après simplification :

$$n(x, s) = \frac{1}{\sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f \cdot a[s]}} n_0 \left(e^{\frac{1}{2}x \left(\frac{\mu_0 F}{D_f} - \sqrt{\frac{(\mu_0 F)^2 + 4D_f \cdot a[s]}{D_f}} \right)} \right) \quad (3.50)$$

pour les cas limites sans diffusion $D_f \rightarrow 0$, on retrouve

$$n(x, s) = \frac{n_0}{\mu_0 F} e^{\frac{-a(s)t_0 x}{L}} \quad (3.51)$$

$$\text{avec } t_0 = \frac{L}{\mu_0 F}$$

le courant associé en domaine temporel est donné par :

$$I(t) = \frac{q\mu_0 F}{L} \int_0^L n(x, t) dx \quad (3.52)$$

et en régime fréquentiel :

$$I(s) = \frac{q\mu_0 F}{L} \int_0^L n(x, s) dx \quad (3.53)$$

en injectant l'expression $n(x, s)$, on obtient :

$$\frac{I_{L-TOF}(s)}{I(0)} = \frac{2D_f \left(1 - e^{-\frac{L(-\mu_0 F + \sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a[s]})}{2D_f}} \right)}{\sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a[s]} (-\mu_0 F + \sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a[s]})} - \frac{2D_f \left(-1 + e^{\frac{L(\mu_0 F + \sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a[s]})}{2D_f}} \right)}{4D_f a[s] + \mu_0 F (\mu_0 F + \sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a[s]})} \quad (3.54)$$

ou :

$$\frac{I_{L-TOF}(s)}{I(0)} = \frac{2D_f \left(1 - e^{-\frac{L(-\mu_0 F + \sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a[s]})}{2D_f}} \right)}{\sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a[s]} (-\mu_0 F + \sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a[s]})} \quad (3.55)$$

Pour le traitement du cas d'absence de diffusion dans la configuration L-TOF : on reprend de nouveau l'équation (3.55) dans cette circonstance on réglie le terme de diffusion , on obtient une expression simple du courant :

$$\frac{I_{L-TOF}(s)}{I(0)} = \frac{1 - e^{-a(s)t_0}}{a(s)} \quad (3.56)$$

La résolution analytique présentée ici met en évidence le rôle combiné de trois mécanismes fondamentaux : la dérive sous champ électrique, la diffusion, et le piégeage/dépiégeage des porteurs dans des états localisés. L'équation obtenue en domaine de Laplace intègre ces phénomènes à travers trois termes :

- Le terme de dérive $\mu_0 F \frac{\partial n(x, s)}{\partial x}$, qui traduit le transport dirigé des porteurs sous l'effet du champ électrique.

- Le terme de diffusion $D_f \frac{\partial^2 n(x,s)}{\partial x^2}$, qui décrit l'élargissement de la distribution des porteurs.
- Le terme effectif $a(s)$, qui résume le comportement de piégeage/dépiégeage via le modèle de piégeage multiple. Ce terme dépend de la densité d'états des pièges et de leur dynamique de relaxation.

L'introduction du terme $a(s)$ permet de reformuler le problème de transport dispersif de manière compacte, en remplaçant la somme discrète des pièges par une représentation continue. Ce terme contrôle à la fois la vitesse de relaxation et le ralentissement du transport induit par le piégeage, ce qui modifie considérablement la réponse temporelle du courant.

Dans le cas sans diffusion, la solution devient purement exponentielle, et la réponse du courant dépend directement de $a(s)$ et du temps de transit t_T . Ce comportement est typique des expériences de TOF où la diffusion est négligeable. La forme du courant est donnée par la dernière équation et illustre comment le piégeage affecte le temps de réponse global du système.

En comparaison avec la configuration de TPC, la géométrie L-TOF met d'avantage en évidence les effets de dérive et permet une meilleure résolution des effets de piégeage dans la zone active. Le profil de densité et la dynamique du courant révèlent des signatures caractéristiques de la profondeur des pièges et de leur distribution énergétique.

3.4.3. Résolution analytique dans le cas T-TOF en présence et absence de la diffusion

Dans le cadre du mode T-TOF (transversale), la dynamique de transport est régie par une équation analogue à celle du cas L-TOF, à la différence près que la génération initiale des porteurs de charge est spatialement étendue sur tout le volume de l'échantillon, au lieu d'être localisée à l'interface d'injection. Dans les conditions de cette géométrie, la transformée de Laplace de l'équation (3.40) est la suivante :

$$\mu_0 F \frac{\partial n(x,s)}{\partial x} + a'(s)n(x,s) - D_f \frac{\partial^2 n(x,t)}{\partial x^2} = n_0 \quad (3.57)$$

où :

$$a'(s) = s + s \int_0^1 \frac{\sigma v \rho(E)}{s + v e^{-E/k_B T}} dE + \frac{1}{\tau} \quad (3.58)$$

la solution analytique sous conditions similaires donne :

$$n(x, s) = -\frac{1}{2a'[s]\sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a'[s]}} n_0 \left(e^{\frac{1}{2}x \left(\frac{\mu_0 F}{D_f} - \frac{\sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a'[s]}}{D_f} \right)} \mu_0 F - \right. \quad (3.59)$$

$$e^{\frac{1}{2}x \left(\frac{\mu_0 F}{D_f} + \frac{\sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a'[s]}}{D_f} \right)} \mu_0 F - 2 \sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a'[s]} + e^{\frac{1}{2}x \left(\frac{\mu_0 F}{D_f} - \frac{\sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a'[s]}}{D_f} \right)} \sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a'[s]} +$$

$$\left. e^{\frac{1}{2}x \left(\frac{\mu_0 F}{D_f} + \frac{\sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a'[s]}}{D_f} \right)} \sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a'[s]} \right)$$

ou :

$$n(x, s) = -\frac{1}{2a'[s]\sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a'[s]}} n_0 \left(e^{\frac{1}{2}x \left(\frac{\mu_0 F}{D_f} - \frac{\sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a'[s]}}{D_f} \right)} \mu_0 F - e^{\frac{1}{2}x \left(\frac{\mu_0 F}{D_f} + \frac{\sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a'[s]}}{D_f} \right)} \mu_0 F - \right. \quad (3.60)$$

$$\left. 2 \sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a'[s]} \right)$$

dans la limite sans diffusion $D_f \rightarrow 0$, cette expression se réduit à :

$$n(x, s) = \frac{n_0}{a'(s)} \left(1 - e^{\frac{-a'(s)t_0 x}{L}} \right) \quad (3.61)$$

en injectant dans l'expression du courant :

$$\frac{I_{T-TOF}(s)}{I(0)} = \frac{1}{a'[s]} \left(L + \frac{D_f \left(-1 + e^{\frac{L(-\mu_0 F + \sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a'[s]})}}{2D_f} \right)}{-\mu_0 F + \sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a'[s]}} - \frac{D_f \left(1 - e^{\frac{L(-\mu_0 F + \sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a'[s]})}}{2D_f} \right) \mu_0 F}{\sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a'[s]}(-\mu_0 F + \sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a'[s]})} - \right.$$

$$\left. \frac{D_f \left(-1 + e^{\frac{L(\mu_0 F + \sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a'[s]})}}{2D_f} \right)}{\mu_0 F + \sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a'[s]}} + \frac{D_f \left(-1 + e^{\frac{L(\mu_0 F + \sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a'[s]})}}{2D_f} \right) \mu_0 F}{4D_f a'[s] + \mu_0 F(\mu_0 F + \sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a'[s]})} \right) \quad (3.62)$$

on obtient une forme explicite :

$$\frac{I_{T-TOF}(s)}{I(0)} = \frac{1}{a'[s]} \left(L + \frac{D_f \left(-1 + e^{-\frac{L(-\mu_0 F + \sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a'[s]})}}{2D_f} \right)}{-\mu_0 F + \sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a'[s]}} - \frac{D_f \left(1 - e^{-\frac{L(-\mu_0 F + \sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a'[s]})}}{2D_f} \right) \mu_0 F}{\sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a'[s]} (-\mu_0 F + \sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a'[s]})} \right) \quad (3.63)$$

En absence de la diffusion $D_f \rightarrow 0$, l'expression du courant dans la configuration T-TOF se réduit à :

$$\frac{I_{T-TOF}(s)}{I(0)} = \frac{(e^{-a'(s)t_0} - 1)/t_0 + a'(s)}{[a'(s)]^2} . \text{ ou } I(0) = \frac{qn_0}{t_0} \quad (3.64)$$

3.5. Résultats de simulation en présence et absence de la diffusion dans les deux configuration (L-TOF ,T-TOF) .

La figure 3.2 montrent les résultats de la simulation dans les deux configuration en présence et absence du terme de diffusion. À partir de ces figures on constate que :

- Le terme $a'(s)$ remplit le même rôle que $a(s)$, représentant le ralentissement dû aux pièges.
- La réponse en courant tient compte à la fois du temps de transit, de la distribution spatiale initiale et des effets diffusifs.

L'effet principe de la diffusion dans la géométrie T-TOF est d'atténuer les gradients de densité, ce qui allonge la durée de réponse du courant. La forme finale du courant dépend de la compétition entre la dérive rapide des porteurs libres et l'immobilisation temporaire dans les pièges. La comparaison avec le mode L-TOF permet d'identifier l'influence de la géométrie expérimentale sur l'interprétation des dynamiques de transport. (La diffusion agit comme un mécanisme d'étalement spatial des porteurs de charge, en réduisant les fortes variations locales de densité. Ce lissage des profils de concentration rend la propagation des charges moins directe, ce qui se traduit par une réponse en courant plus étalée dans le temps, c'est-à-dire un courant transitoire plus lent à décroître. La diffusion « freine » en quelque sorte la vitesse d'extinction du courant, parce qu'elle redistribue les porteurs dans le matériau au lieu de les laisser suivre directement le champ électrique.

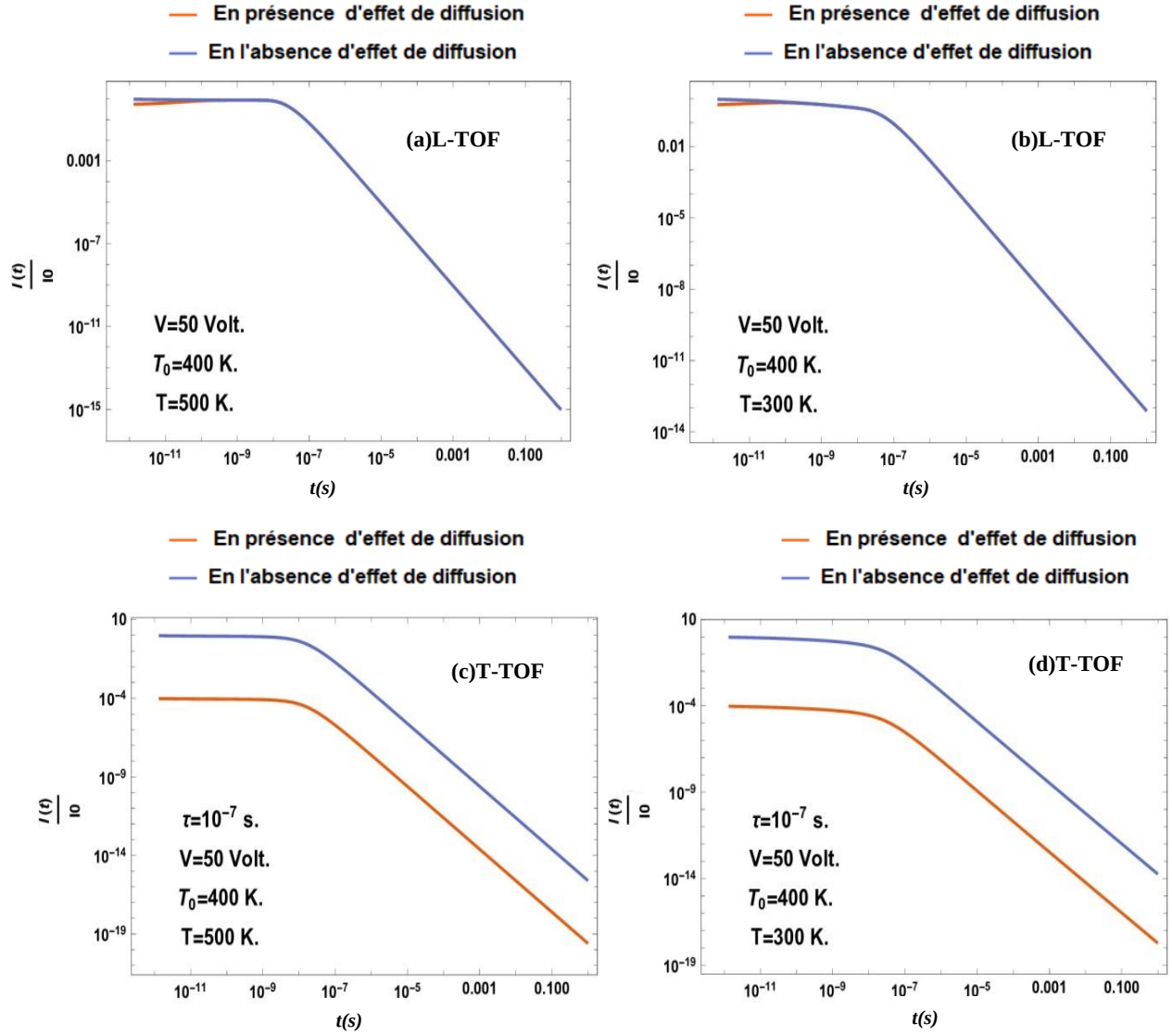


Figure 3.2: Influence de la diffusion dans les configurations L-TOF et T-TOF dans le cas d'un transport dispersif et non dispersif .

3.6. Modèle de piégeage multiple fractionnaire dans les conditions de l'expérience de temps de vol

Dans les semi-conducteurs amorphes, le transport dispersif des porteurs de charge, en particulier sous excitation transitoire (TOF), ne peut être pleinement décrit par les équations différentielles classiques. Pour tenir compte des effets de mémoire associés aux temps de piégeage très dispersés, on adopte le modèle de piégeage multiple fractionnaire. Celui-ci repose sur une formulation intégrale du comportement de la mémoire, puis sur une reformulation en équations différentielles à dérivées fractionnaires.

Dans un premier temps, considérons le cas sans diffusion, l'équation de continuité décrivant la densité de porteurs libres, en tenant compte du couplage aux niveaux piégeants, s'écrit :

$$n_i(x, t) = \omega_i \int_0^t e^{-\gamma_i(t-t')} n(x, t') dt' \quad (3.65)$$

en réinjectant les expressions des paramètres microscopiques, on obtient les équations gouvernantes pour les deux configurations expérimentales : L-TOF et T-TOF.

3.6.1. Représentation Intégrale de la Mémoire

Dans l'hypothèse d'un spectre continu d'états piégeants, la somme discrète est remplacée par une intégrale sur l'énergie :

$$\frac{\partial n(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial t} \int_0^t \left(\sum_i \sigma v g(\varepsilon_i) \Delta \varepsilon_i e^{-\gamma_i(t-t')} \right) n(x, t') dt' - \mu_0 F \frac{\partial n(x, t)}{\partial x} + n_0 \delta(t) \delta(x) \quad (3.66)$$

$$\frac{\partial n(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial t} \int_0^t \left(\sum_i \sigma v g(\varepsilon_i) \Delta \varepsilon_i e^{-\gamma_i(t-t')} \right) n(x, t') dt' - \mu_0 F \frac{\partial n(x, t)}{\partial x} - \frac{n(x, t)}{\tau} + n_0 \delta(t)$$

Ces équations peuvent être résolues en utilisant des transformations de Laplace sous les conditions initiales et aux limites $n(x, 0) = 0$, $n_i(x, 0) = 0$ et $n(0, t) = 0$.

$$\frac{\partial n(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial t} \int_0^t \left(\int_0^\infty \sigma v e^{-v_0(t-t')} e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T}} g(\varepsilon) d\varepsilon \right) n(t') dt' - \mu_0 F \frac{\partial n(x, t)}{\partial x} + n_0 \delta(t) \delta(x) \quad (3.67)$$

$$\frac{\partial n(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial t} \int_0^t \left(\int_0^\infty \sigma v e^{-v_0(t-t')} e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T}} g(\varepsilon) d\varepsilon \right) n(t') dt' - \mu_0 F \frac{\partial n(x, t)}{\partial x} - \frac{n(x, t)}{\tau} + n_0 \delta(t)$$

Ces équations peuvent être réécrites sous la forme :

$$\frac{\partial n(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial t} \int_0^t Q(t-t')n(x, t')dt' - \mu_0 F \frac{\partial n(x, t)}{\partial x} + n_0 \delta(t) \delta(x) \quad (3.68)$$

$$\frac{\partial n(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial t} \int_0^t Q(t-t')n(x, t')dt' - \mu_0 F \frac{\partial n(x, t)}{\partial x} - \frac{n(x, t)}{\tau} + n_0 \delta(t)$$

Le noyau de mémoire $Q(t)$, qui encode les effets de rétention liés aux états profonds, est défini par :

$$Q(t) = \int_0^\infty \sigma v e^{-v_0 t e^{-\varepsilon/k_B T}} g(\varepsilon) d\varepsilon \quad (3.69)$$

$$Q(t) = \int_0^\infty \omega_\varepsilon e^{-\omega_\varepsilon t (N_f/N_t) e^{-\varepsilon/k_B T}} \rho(\varepsilon) d\varepsilon \quad (3.70)$$

La transformée de Laplace du noyau peut être calculée à l'aide de la formule :

$$Q(s) = \int_0^\infty \left(\frac{\sigma v g(\varepsilon)}{s + v_0 e^{-\varepsilon/k_B T}} \right) d\varepsilon \quad (3.71)$$

où :

$$Q(s) = \int_0^\infty \frac{\omega_\varepsilon g(\varepsilon)}{s + \omega_\varepsilon (N_f/N_t) e^{-\varepsilon/k_B T}} d\varepsilon. \quad (3.72)$$

Sous l'hypothèse d'une densité exponentielle d'états localisés $g(\varepsilon) = \varepsilon_0^{-1} \exp(-\varepsilon/\varepsilon_0)$ et d'un taux de piégeage peu dépendant de l'énergie $\omega_\varepsilon \approx \omega_0$ l'analyse asymptotique donne : [61–64,75,78–80,83] .

$$Q(t) = \frac{\omega_0}{\varepsilon_0} \int_0^\infty e^{-\omega_0 t (N_f/N_t) e^{-\varepsilon/k_B T}} e^{-\varepsilon/\varepsilon_0} d\varepsilon. \quad (3.73)$$

introduisant la notation $\alpha = \frac{k_B T}{\varepsilon_0} \in]0, 1]$ et la nouvelle variable

$$\xi = \omega_0 t \frac{N_f}{N_t} e^{-\varepsilon/k_B T}. \quad (3.74)$$

on transforme l'équation (3.73) en :

$$Q(t) = \frac{\alpha \omega_0}{(\omega_0 t N_f/N_t)^\alpha} \int_0^{\omega_0 t N_f/N_t} e^{-\xi} \xi^{\alpha-1} d\xi \sim \frac{\omega_0 \alpha \Gamma(\alpha)}{(\omega_0 N_f/N_t)^\alpha} t^{-\alpha}, \quad t \rightarrow \infty. \quad (3.75)$$

Ici, $\Gamma(\alpha) = \int_0^\infty e^{-t} t^{\alpha-1} dt$ est la fonction Gamma. Le comportement asymptotique pour les grands temps ($t \rightarrow \infty$) signifie physiquement qu'un trou (ou un électron) subit un grand nombre d'actes de localisation-délocalisation pendant le temps t . Ainsi, le noyau se réduit à la forme :

$$Q(t) = \frac{\omega_0 \alpha \Gamma(\alpha)}{(\omega_0 N_f / N_t)^\alpha} t^{-\alpha}. \quad (3.76)$$

en utilisant la relation :

$$\Gamma(\alpha) \Gamma(1 - \alpha) = \pi / \sin(\pi \alpha) \quad (3.77)$$

on peut écrire le noyau sous la forme[61–64,78–82,84] :

$$Q(t) = \frac{\omega_0 \alpha \Gamma(\alpha)}{(\omega_0 N_f / N_t)^\alpha} t^{-\alpha} = \frac{\pi \omega_0 \alpha}{(\omega_0 N_f / N_t)^\alpha \sin \alpha \pi} \frac{t^{-\alpha}}{\Gamma(1 - \alpha)} = \omega_0 \frac{(c_\alpha t)^{-\alpha}}{\Gamma(1 - \alpha)}, \quad 0 < \alpha \leq 1 \quad (3.78)$$

avec :

$$c_\alpha = \omega_0 \frac{N_f}{N_t} \left(\frac{\sin \pi \alpha}{\pi \alpha} \right)^{1/\alpha}. \quad (3.79)$$

Cette décroissance en loi de puissance est une signature d'un transport anormal ,reflétant une large distribution des temps de piégeage.

3.6.2. Formulation Fractionnaire de l'Équation de Transport

La décroissance en $t^{-\alpha}$ suggère une modélisation en dérivées fractionnaires, en particulier via la dérivée de Riemann–Liouville :

$${}^{RL}D_t^\alpha n = \frac{1}{\Gamma(1 - \alpha)} \frac{\partial}{\partial t} \int_0^t \frac{n(\tau)}{(t - \tau)^\alpha} d\tau. \quad (3.80)$$

L'équation de transport fractionnaire devient alors :

- **Configuration L-TOF**

$$\frac{\partial n(x, t)}{\partial t} + \omega_0 c_\alpha^{-\alpha} {}^{RL}D_t^\alpha n(x, t) + \mu_0 F \frac{\partial n(x, t)}{\partial x} = n_0 \delta(t) \delta(x) \quad (3.81)$$

- **Configuration T-TOF**

$$\frac{\partial n(x, t)}{\partial t} + \omega_0 c_\alpha^{-\alpha} {}^{RL}D_t^\alpha n(x, t) + \mu_0 F \frac{\partial n(x, t)}{\partial x} + \frac{n(x, t)}{\tau} = n_0 \delta(t) \quad (3.82)$$

où c_α est un facteur de normalisation dépendant de α , Nf/Nt , et de la fonction Gamma.

Interprétation physique

L'introduction du formalisme fractionnaire permet de rendre compte des phénomènes de transport anormal observés expérimentalement dans les matériaux amorphes, en particulier dans le régime TOF. Contrairement au modèle classique, où le piégeage suit une dynamique exponentielle, ici les porteurs présentent un comportement subdiffusif, dû à des temps d'attente largement distribués dans les états localisés.

- Le terme fractionnaire remplace les effets de piégeage classique par une mémoire à longue portée, caractéristique des matériaux fortement désordonnés.
- Le paramètre α contrôle la dynamique de relaxation : plus α est petit, plus le transport est lent et piégé.
- Comparé aux résultats de la section 3.4.2 et 3.4.3 (modèle classique), le modèle fractionnaire permet de reproduire les cinétiques lentes du courant TOF, et les courbes en loi de puissance souvent observées dans les mesures expérimentales.

Ce passage au modèle fractionnaire constitue ainsi une généralisation plus fidèle de la dynamique réelle dans les semi-conducteurs amorphes, en rendant compte de l'influence fondamentale de la mémoire dans le transport des charges.

3.6.3. Solution en Espace de Laplace et Courant de TOF

Par application de la transformation de Laplace, on peut obtenir des expressions analytiques de la densité de porteurs pour les deux configurations expérimentales. Ces solutions permettent de calculer le courant transitoire de TOF normalisé.

• Pour le mode L-TOF :

$$n_{L-TOF}(x, s) = \frac{n_0}{\mu_0 F} \exp \left[- \frac{s \left(\frac{\omega_0}{c_\alpha^\alpha} s^{\alpha-1} + 1 \right) t_0 x}{L} \right] \quad (3.83)$$

$$\frac{I_{L-TOF}(s)}{I(0)} = \frac{1 - \exp \left[\left(- \frac{\omega_0}{c_\alpha^\alpha} s^\alpha + s \right) t_0 \right]}{\frac{\omega_0}{c_\alpha^\alpha} + s} \quad (3.84)$$

• Pour le mode T-TOF :

$$n_{T-TOF}(x, s) = \frac{n_0}{\frac{\omega_0}{c_\alpha^\alpha} s^\alpha + s + \frac{1}{\tau}} \left(1 - \exp \left[- \frac{(\frac{\omega_0}{c_\alpha^\alpha} s^{\alpha-1} + s + \frac{1}{\tau}) t_0 x}{L} \right] \right) \quad (3.85)$$

$$\frac{I_{T-TOF}(s)}{I(0)} = \frac{\frac{1}{t_0} \left(\exp \left[- \left(\frac{\omega_0}{c_\alpha^\alpha} s^\alpha + s + \frac{1}{\tau} \right) t_0 \right] - 1 \right) + \frac{\omega_0}{c_\alpha^\alpha} s^\alpha + s + \frac{1}{\tau}}{\left(\frac{\omega_0}{c_\alpha^\alpha} s^\alpha + s + \frac{1}{\tau} \right)^2} \quad (3.86)$$

Ces expressions modélisent avec précision la réponse transitoire observée dans les expériences TOF, en intégrant l'effet mémoire à travers l'ordre fractionnaire . Elles montrent clairement comment le transport dispersif affecte l'évolution temporelle du courant, en comparaison aux solutions classiques présentées précédemment.

3.7. Simulation des photocourants transitoires par transformation de Laplace en Configuration L-TOF

Pour approfondir la compréhension des effets du transport dispersif dans les semi-conducteurs amorphes, une série de simulations numériques a été effectuée. Ces simulations s'appuient sur les solutions analytiques obtenues dans l'espace de Laplace, avec inversion numérique pour restituer l'évolution temporelle du courant TOF .

3.7.1. Méthodologie et paramètres physiques

Les courants transitoires ont été calculés à partir de l'expression analytique précédente (3.84), en appliquant une inversion numérique de la transformée de Laplace. Cette méthode prend pleinement en compte les effets mémoire liés au piégeage multiple, à travers la dépendance en α . Les paramètres physiques adoptés pour les simulations sont :

$$\sigma v = 10^{-7} \frac{cm^3}{s}, v = 10^{12} s^{-1}, T = 300 K, \alpha = 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9, k_B = 8.625 \times 10^{-5} eV/K .$$

Champs électriques F variant entre 10^4 et 10^8 V/cm, $g(\varepsilon) = \varepsilon_0^{-1} \exp(-\varepsilon/\varepsilon_0)$.

3.7.2. Objectif de l'analyse

L'analyse des courants simulés permet de :

- Évaluer l'impact du paramètre α sur la forme du courant , en particulier sur la pente dans les représentations log-log, reflétant le régime subdiffusif.

- Étudier l'influence du champ électrique sur la position du point d'inflexion du courant, indicateur du temps de transit effectif.
- Observer la transition caractéristique entre deux régimes de décroissance :
 - Avant le transit : $I(t) \propto t^{-1+\alpha}$
 - Après le transit : $I(t) \propto t^{-1-\alpha}$

Cette transition constitue une signature expérimentale forte du transport dispersif, et permet de relier les observations à l'ordre fractionnaire, rendant ce modèle particulièrement pertinent pour la modélisation des matériaux désordonnés.

3.7.3. Résultats et discussion

a. Effet du paramètre de dispersion α

Conditions de simulation :

- Champ électrique constant $F=10^5$ V/cm
- Température $T=300$ K
- $\alpha= 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9$.

Les résultats des simulations sont présentés sur les figures en échelle log-log afin de mettre en évidence les régimes en lois de puissance caractéristiques du transport dispersif. La Figure 3.3(a) représente les photocourants normalisés de la configuration L-TOF pour les conditions de simulations décrites en haut. On observe une décroissance du courant en loi de puissance, typique d'une dynamique subdiffusive. Lorsque α est faible, les porteurs restent piégés plus longtemps, ce qui allonge la durée du régime pré-transitoire. Ce comportement traduit une plus grande influence des états profonds du gap. À l'inverse, des valeurs plus élevées de α (plus proche de 1) indiquent un transport plus rapide, avec un raccourcissement du régime transitoire et un déplacement du point d'inflexion vers des temps plus courts. Ces résultats sont en accord avec les observations expérimentales sur les chalcogénures amorphes. D'après la littérature, l'a-As₂Se₃ représente un transport dispersif dans les expériences du temps de vol TOF où le courant varie en lois de puissance en fonction du temps. On signale que la température caractéristique de ce matériau est de l'ordre de 550K [104,105]. L'inspection des courants de cette figure montre que les régimes avant transit et après transit sont reproduits par le modèle, validant son caractère prédictif.

b. Influence du champ électrique F

Conditions de simulation :

- Deux cas ont été considérés :
 - $\alpha=0.5$
 - $\alpha=0.9$
- Champs électriques : $F=[10^4, 10^8] \text{ V/cm}$

les Figures 3.3(b) et 3.3(c) représentent les Photocourants simulés pour deux valeurs de α et sous différents champs électriques . D'après ces figures une augmentation du champ électrique accélère la dérive des porteurs, ce qui réduit le temps de transit et déplace le point d'inflexion du courant vers des temps plus courts. Cela confirme que le point d'inflexion est directement lié au temps de transit des porteurs photogénérés. En effet, la vitesse de dérive est donnée par $v_d = \mu_0 F$, et le temps de transit s'écrit $t_T = L/v_d$. Lorsque F augmente, v_d augmente, entraînant une diminution de t_T et donc une transition plus rapide dans le profil du courant.

Cet effet est plus marqué pour $\alpha=0.5$, où les porteurs subissent un piégeage prolongé et un retard de dépiégeage important, amplifiant l'impact du champ sur le transit. En revanche, pour $\alpha=0.9$, où le désordre est moins faible, les porteurs atteignent plus rapidement l'électrode collectrice.

Ces résultats sont cohérents avec les mesures des courants de TOF des électrons à température ambiante pour un voltage allant de 5V-11V réalisés par Benkhedir et al [106] dans des échantillons de a-Se d'épaisseur de $2 \mu\text{m}$. Ces derniers montrent une sensibilité du courant transitoire à l'intensité du champ où le temps de transit décale vers les temps les plus courts avec l'augmentation du champ. Le modèle fractionnaire offre donc un cadre robuste pour décrire les modifications du comportement de désordre en fonction des conditions expérimentales.

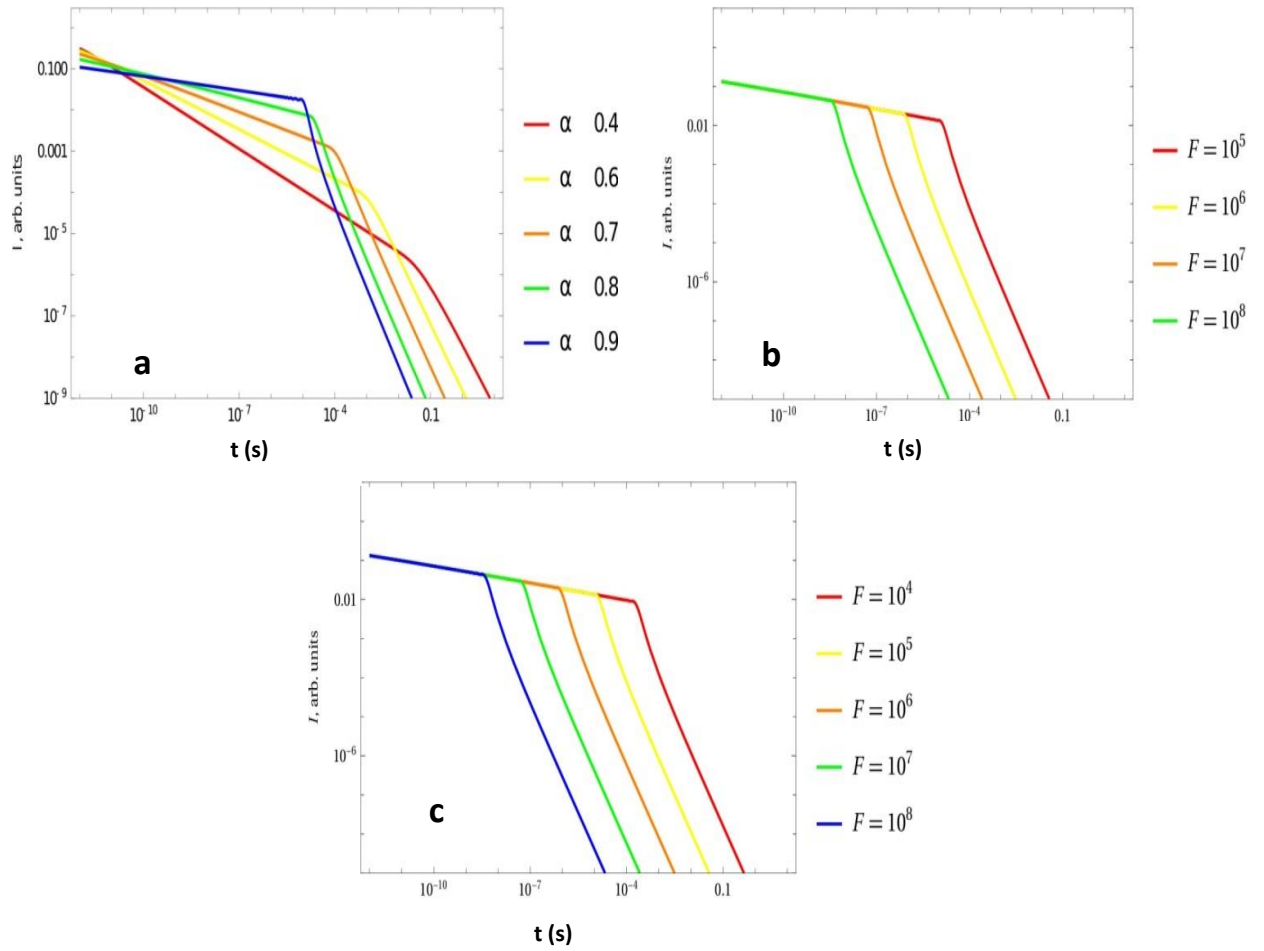


Figure 3.3 : Photocourants transitoires L-TOF pour différentes valeurs du champ et du paramètre de désordre : (a) pour $F = 10^5$ V/cm et α variable; (b) F variable et α fixe = 0,5 et (c) F variable et α fixe = 0,9 .

3.7.4. Confirmation expérimentale du temps de transit

Les résultats simulés permettent d'établir une méthode fiable d'extraction du temps de transit :

- Le point d'inflexion observé sur $\log I$ en fonction de $\log t$ correspond au passage du régime de collecte au régime de recombinaison.
- Son décalage vers la gauche avec l'augmentation de F est un indicateur que ce point est proportionnel à t_T .
- Cette propriété est directement exploitable expérimentalement pour déterminer t_T à partir des mesures de TOF.

A partir des résultats obtenus on constate que :

- Plus α est grand , plus le transport s'approche d'un comportement quasi-ohmique, avec des transitions rapides et un profil de courant plus symétrique.
- Plus F est élevé, plus la réponse en courant est rapide, avec un temps de transit plus court.
- Le comportement asymptotique du courant valide les prédictions du modèle fractionnaire de piégeage multiple, notamment la forme $I \propto t^{-1 \pm \alpha}$, observée dans les mesures expérimentales sur les semi-conducteurs désordonnés [40,41].

3.8. Simulation des photocourants transitoires par transformation de Laplace en Configuration T-TOF

Cette section présente les résultats numériques obtenus pour la configuration T-TOF, où l'on considère une injection homogène de porteurs dans l'échantillon. L'analyse permet d'évaluer l'effet combiné du paramètre de dispersion α , du champ électrique F , du temps de la durée de vie de recombinaison τ et de la distance transport L , sur le profil du courant transitoire .

a. Influence du paramètre de dispersion α

- $F=10^5$ V/cm, $\tau=10^{-6}$ s
- $\alpha \in [0.4, 0.9]$

La Figure 3.4(a) représente les courants transitoires simulés de la configuration T-TOF pour différentes valeurs de α . On observe une décroissance du courant suivant une loi de puissance, avec une pente qui augmente avec α . Pour des faibles valeurs de α , le désordre est plus important, les temps de piégeage sont plus étalés, ce qui prolonge le régime pré-transitoire.

À mesure que α augmente, la dynamique devient plus rapide et se rapproche du comportement classique. Dans le cas d'un transport dispersif les courants L-TOF et T-TOF décroît après la photoexcitation. Pour un même interval de temps de mesure les courants des deux configurations coïncident. Cela veut dire qu'on peut déterminer le temps de transit dans la configuration T-TOF à partir du point d'inflexion dans une représentation double logarithmique. Cette conclusion est justifiée par le fait que les porteurs photo injectés sont réparties de manière assez uniforme dans les mesures de L-TOF avant le transit [4].

b. Influence du champ électrique F

Conditions de simulation

- $\alpha=0.85, \tau=10^{-6} \text{ s}$
- $F=10^4, 10^5, 10^6 \text{ V/cm}$

La figure 3.4(b) exploite les courants transitoires pour différentes intensités de champ. Ce panneau met l'accent sur le rôle du champ comme accélérateur du transport dispersif. Pour des valeurs de champ élevées, la relaxation accélère, avec un décalage des points d'inflexion vers des temps courts, car le champ favorise le balayage latéral des porteurs photogénérés vers l'électrode collectrice, réduisant le temps de transit $tr \approx \frac{L}{\mu F}$. Cela compresse la phase dispersive initiale et accentue la transition vers la queue post-transit, reflétant une extraction plus rapide des porteurs avant une exploration complète des pièges profonds. Inversement, pour des champs plus faibles, les courbes s'étendent, prolongeant le plateau initial et l'effet de mémoire en permettant une gamme plus large d'états localisés d'être sondée avant collection. Dans ce cas les inflexions décalées vers des temps longs. Si les points d'inflexions varient avec F , cela confirme qu'ils correspondent au temps de transit, distinguant les régimes dominés par la recombinaison où les courbes se superposent indépendamment du champ. Cela illustre comment le champ module l'intensité des interactions piège-porteur dans la configuration transversal, préservant les exposants de puissance tout en ajustant la fenêtre temporelle observable. Nos résultats sont en bon accord avec les études du transport dispersif dans les semiconducteurs amorphes élaborées par Yoshikawa [97].

c. Effet de la durée de vie de recombinaison τ

Conditions de simulation

- $\alpha=0.85, F=4 \cdot 10^5 \text{ V/cm}$
- $\tau=10^{-5}, 10^{-6}, 10^{-7} \text{ s}$

La figure 3.4(c) représente les courants transitoires pour différentes valeurs de τ . ce panneau souligne le rôle de la durée de vie τ comme échelle de temps pivot pour la recombinaison monomoléculaire. Physiquement, τ module les pertes de porteurs libres. Pour une valeur faible de τ , la relaxation commence précocement, avec un shift vers des temps courts et une atténuation rapide des queues. Les recombinaisons accélèrent, réduisant les durées de piégeage moyen et compressant la phase dispersive, masquant le transit si $\tau \ll tr$. Inversement, pour des valeurs plus élevées de τ le plateau initial s'étend et décale la transition vers des temps plus longs, prolongeant l'effet de mémoire en permettant aux porteurs d'explorer une gamme plus large de la densité des états localisés avant perte, avec des courbes inchangées indiquant un régime où le transit domine.

Nos simulations illustrent comment l'inflexion observée dans une représentation double logarithmique du photocourant transitoire dans la configuration T-TOF, permet de distinguer si la dynamique du courant est limitée par le temps de transit des porteurs ou par leurs recombinaison, selon les conditions expérimentales. Si le point d'inflexion se déplace avec l'augmentation du champ, il est dû au transit. Ces analyses sont essentielles pour déterminer la mobilité des porteurs dans les semi-conducteurs amorphes sous condition que le temps de transit des porteurs de charge est inférieur à τ . Le critère d'identification du temps de transit ou de recombinaison basé sur la variation du point d'inflexion avec F ou τ est validé aussi bien dans le modèle classique et le fractionnaire. Le même critère peut être appliqué dans le cas du transport non dispersif [104].

d. Influence de l'espacement horizontal entre les électrodes

Conditions de simulation

- $\alpha=0.85, F=4 \cdot 10^5 \text{ V/cm}$
- $L=(10,30,50,70,90,100) \mu\text{m}$.

La distance L , définie comme la distance caractéristique de transport des porteurs de charge dans les expériences de temps de vol, est un paramètre fondamental modifiant la dynamique des courants transitoires dans les deux géométries. Les figures fournies illustrent les profils log-log de $I(t)$ en fonction de t pour différentes valeurs de L .

À partir de la Figure 3.4(d), l'augmentation de L , correspondant à l'espacement horizontal entre les électrodes coplanaires bloquants, prolonge significativement le temps de transit, étendant la phase pré-transit. Les courbes se décalent vers des temps plus longs avec l'augmentation de L , et le point d'inflexion migre approximativement de 10^{-6} s, pour $L=10 \mu m$ à 10^{-4} s pour $L=100 \mu m$.

La réduction de L accélère le temps de transit et améliore la résolution du point d'inflexion. La représentation en double échelle logarithmique du photocourant transitoire facilite l'extraction de la mobilité. Le prolongement de la phase pré-transit augmente les pertes par recombinaison et renforce la dispersion. Dans le modèle de Scher et Montroll [1], une distance plus grande augmente la probabilité de retards, modifiant l'exposant apparent.

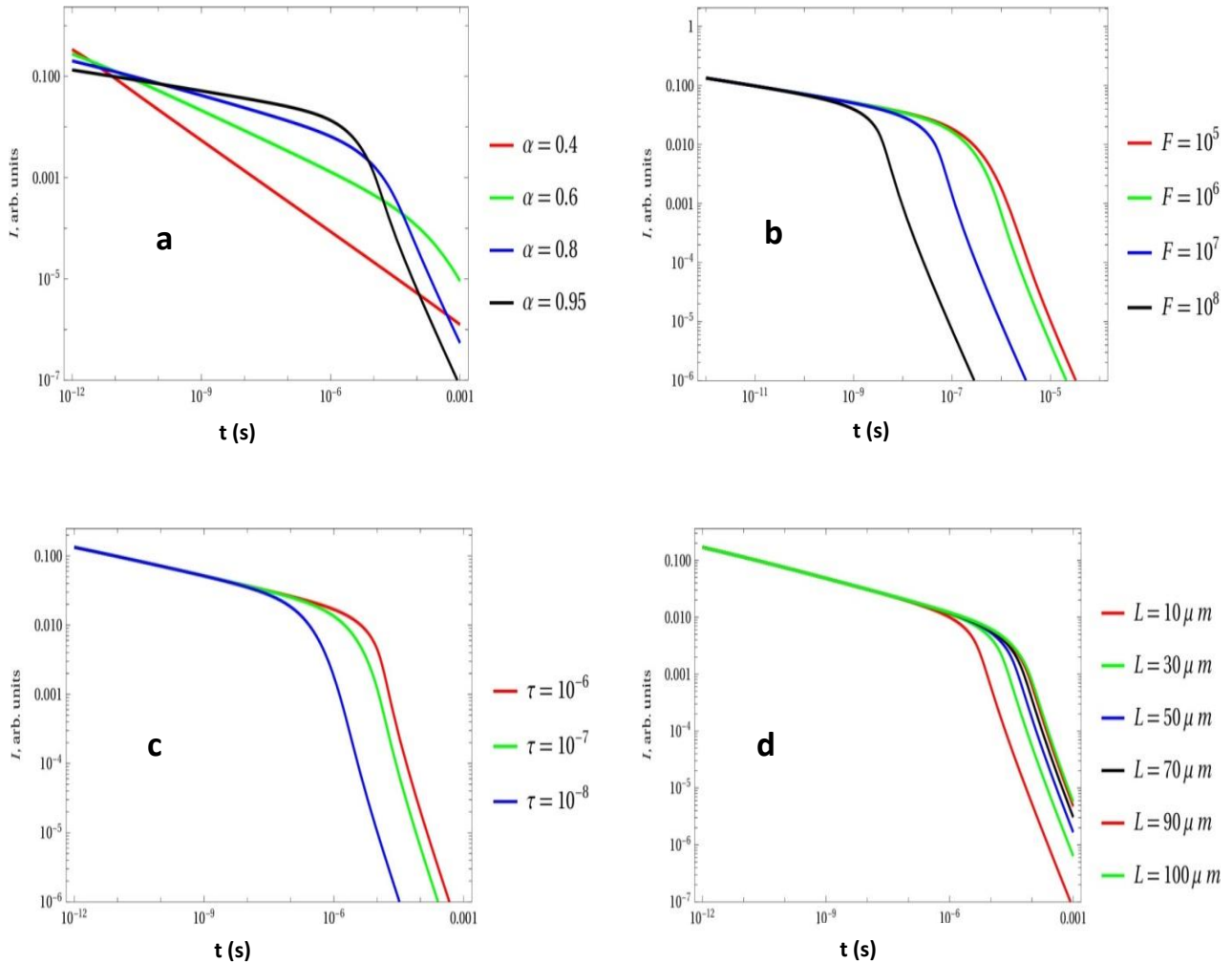


Figure 3.4 : Photocourants transitoires T-TOF pour différentes valeurs de F , α et τ :
 (a) $F = 10^5 \text{ V/cm}$, $\tau = 10^{-6} \text{ s}$ et variable α ; (b) $\tau = 10^{-6} \text{ s}$, $\alpha = 0,85$ et variable F ; (c) pour $F = 4 \times 10^5 \text{ V/cm}$, $\alpha = 0,85$ et variable τ . (d) α et F fixe et L variable.

3.9. Détermination du Temps de Transit ou de Recombinaison :

Critère d'Identification

Après l'étude par simulation de l'influence de plusieurs paramètres sur les photocourants en configuration T-TOF , les critères d'interprétation des courants TOF qui permettent de distinguer entre un régime dominé par le transit ou par la recombinaison sont :

Critère expérimental

- Si le point d'inflexion varie avec le champ électrique F mais reste stable face aux variations de τ , il est lié au temps de transit .
- En revanche, si le point d'inflexion reste constant avec F mais se déplace avec τ , il est alors dominé par les processus de recombinaison.

Importance physique

- Ce critère est fondamental pour éviter des erreurs d'interprétation dans l'extraction de la mobilité à partir de mesures de TOF dans les matériaux amorphes.
- Il permet également de discriminer les régimes de transport : un régime dominant par le transit révèle une dynamique de collecte des porteurs, tandis qu'un régime dominant par la recombinaison signale des pertes importantes avant extraction.

Cette approche renforce la robustesse du modèle fractionnaire pour modéliser le transport dispersif et interpréter les signaux TOF dans des matériaux à fort désordre énergétique.

3.10. Validation par Comparaison aux Données Expérimentales

Afin de consolider la validité du modèle de piégeage multiple fractionnaire à mémoire présenté dans les sections précédentes, une comparaison quantitative avec des données expérimentales issues de la littérature a été menée. Les résultats concernent les courants transitoires mesurés par Benkhedir sur le sélénium amorphe (a-Se), un matériau de référence largement étudié dans le cadre du transport dispersif [1,40].

3.10.1. Méthodologie de comparaison

Les simulations numériques ont été réalisées à partir de l'équation maîtresse fractionnaire obtenue précédemment (3.84) , en utilisant la transformation de Laplace et son inversion numérique.

Les paramètres physiques utilisés pour le modèle ont été ajustés aux conditions expérimentales spécifiques de la mesure dans l'a-Se :

T Température (C)	α Dispersion	$\sigma v, v$ Constantes de piégeage	V Tension (Volt)	L l'épaisseur (μm)
23	0.84	$\sigma v = 10^{-7} \frac{cm^3}{s},$ $v = 10^{12} s^{-1}$	50	16
-10	0.73			
-25	0.685			
-40	0.646			

3.10.2. Analyse de la concordance

La figure 3.5 illustre la comparaison entre les courants de TOF mesurés expérimentalement sur un film de sélénium amorphe et les courants simulés numériquement à l'aide du modèle développé. La superposition des courbes montre une très bonne concordance globale ou la montée initiale est bien reproduite dans les simulations, traduisant une dynamique de génération rapide suivie d'un début de transit. Le Point d'inflexion est situé à des temps similaires, confirmant la capacité du modèle à reproduire fidèlement le temps de transit des porteurs. La Queue asymptotique décrivant la décroissance selon une loi de puissance est observée dans les deux cas, validant la pertinence du cadre fractionnaire.

Ce bon accord permet d'interpréter les signatures expérimentales à travers les mécanismes microscopiques modélisés par piégeage, libération retardée, et recombinaison.

Une légère déviation du photocourant est notée dans la région après le point de transit à température ambiante. Cela peut être expliqué par l'absence, dans notre modélisation, du terme de diffusion. Ce phénomène a été enregistré dans le travail de Emelianova et al [72]. Cet article présente l'analyse du spectre d'états localisés dans le sélénium amorphe du côté de la bande de conduction. Le modèle dégagé a donné un décalage entre les courants de TOF mesurés et simulés à la même température.

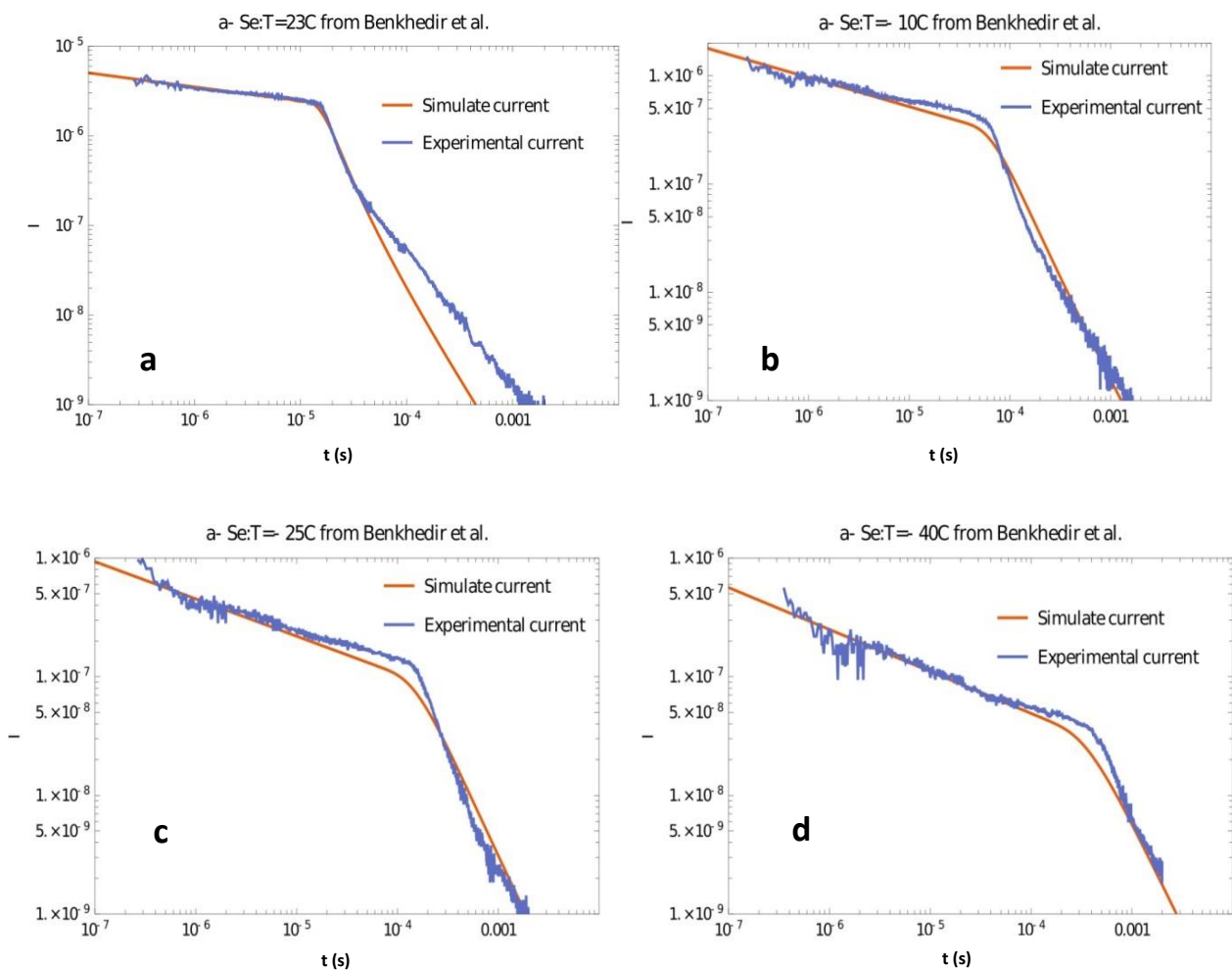


Figure 3.5 : Comparaison entre les courants mesurés et simulés de TOF dans le sélénium amorphe.

3.10.3. Validité du modèle et implications

Les résultats obtenus permettent d'établir plusieurs points clés :

- Le modèle de transport dispersif fractionnaire est capable de reproduire fidèlement les dynamiques expérimentales dans les matériaux amorphes.
- L'approche par la transformée inverse de Laplace fournit un outil robuste pour simuler les courants de TOF sur une large gamme de paramètres.
- Il est possible d'extraire avec précision des grandeurs physiques essentielles telles que la mobilité, la durée de vie, ou le paramètre de dispersion α , à partir des mesures de photocourants.

En conclusion, cette validation expérimentale conforte l'usage du modèle fractionnaire comme cadre théorique pertinent pour décrire les processus complexes de transport dans les semi-conducteurs fortement désordonnés.

3.11. Prise en Compte du Terme de Diffusion dans le Modèle Fractionnaire

Afin d'améliorer la fidélité du modèle de transport dispersif aux conditions expérimentales réalistes, nous avons étendu l'équation de transport fractionnaire en y intégrant un terme de diffusion spatiale. Cette généralisation permet de tenir compte de la contribution de la diffusion, en particulier dans les régimes pré-transitoires, où elle influence la largeur du front de porteurs photogénérés.

3.11.1. Équation fractionnaire modifiée

L'équation de continuité tenant compte à la fois du piégeage, du champ électrique et de la diffusion dans le cadre fractionnaire s'écrit :

dans la configuration L-TOF

$$\frac{\partial n(x,t)}{\partial t} + \omega_0 c_{\alpha}^{-\alpha RL} D_t^{\alpha} n(x,t) + \mu_0 F \frac{\partial n(x,t)}{\partial x} - D_f \frac{\partial^2 n(x,t)}{\partial x^2} = n_0 \delta(t) \delta(x) \quad (3.87)$$

dans le cas T-TOF l'équation devient :

$$\frac{\partial n(x,t)}{\partial t} + \omega_0 c_{\alpha}^{-\alpha RL} D_t^{\alpha} n(x,t) + \mu_0 F \frac{\partial n(x,t)}{\partial x} + \frac{n(x,t)}{\tau} - D_f \frac{\partial^2 n(x,t)}{\partial x^2} = n_0 \delta(t) \quad (3.88)$$

après transformation de Laplace, on trouve :

$$-D_f \frac{\partial^2 n(x, s)}{\partial x^2} + \mu_0 F \frac{\partial n(x, t)}{\partial x} + a(s)n(x, s) = n_0 \delta(x) \quad (3.89)$$

$$-D_f \frac{\partial^2 n(x, s)}{\partial x^2} + \mu_0 F \frac{\partial n(x, t)}{\partial x} + a'(s)n(x, s) = n_0$$

avec :

$$\begin{cases} a(s) = s + \omega_0 c_{\alpha}^{-\alpha} s^{\alpha} & L - TOF \\ a'(s) = s + \omega_0 c_{\alpha}^{-\alpha} s^{\alpha} + \frac{1}{\tau} & T - TOF \end{cases} \quad (3.90)$$

3.11.2. Solutions analytiques et expressions du courant

Les solutions analytiques de $n(x, s)$ sont obtenues par résolution de ces équations différentielles et donnent lieu à des expressions , permettant ensuite de calculer les photocourants normalisés .

$$n_{L-TOF}(x, s) = \frac{1}{\sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a[s]}} n_0 \left(e^{\frac{1}{2}x \left(\frac{\mu_0 F}{D_f} - \frac{\sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a[s]}}{D_f} \right)} - e^{\frac{1}{2}x \left(\frac{\mu_0 F}{D_f} + \frac{\sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a[s]}}{D_f} \right)} \right) \quad (3.91)$$

$$\begin{aligned} n_{T-TOF}(x, s) = & -\frac{1}{2a'[s]\sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a'[s]}} n_0 \left(e^{\frac{1}{2}x \left(\frac{\mu_0 F}{D_f} - \frac{\sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a'[s]}}{D_f} \right)} \mu_0 F - e^{\frac{1}{2}x \left(\frac{\mu_0 F}{D_f} + \frac{\sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a'[s]}}{D_f} \right)} \mu_0 F \right. \\ & - 2\sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a'[s]} + e^{\frac{1}{2}x \left(\frac{\mu_0 F}{D_f} - \frac{\sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a'[s]}}{D_f} \right)} \sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a'[s]} \\ & \left. + e^{\frac{1}{2}x \left(\frac{\mu_0 F}{D_f} + \frac{\sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a'[s]}}{D_f} \right)} \sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a'[s]} \right) \end{aligned} \quad (3.92)$$

• Pour le mode L-TOF, on trouve :

$$\frac{I_{L-TOF-D_f}(s)}{I(0)} = \frac{2D_f \left(1 - e^{-\frac{L(-\mu_0 F + \sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a[s]})}{2D_f}} \right)}{\sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a[s]} \left(-\mu_0 F + \sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a[s]} \right)} \quad (3.93)$$

• Pour le mode T-TOF, on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{I_{T-TOF-D_f}(s)}{I(0)} = & \frac{1}{a'[s]} \left(L + \frac{D_f \left(-1 + e^{-\frac{L(-\mu_0 F + \sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a'[s]})}{2D_f}} \right)}{-\mu_0 F + \sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a'[s]}} - \right. \\ & \left. \frac{D_f \left(1 - e^{-\frac{L(-\mu_0 F + \sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a'[s]})}{2D_f}} \right) \mu_0 F}{\sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a'[s]} \left(-\mu_0 F + \sqrt{(\mu_0 F)^2 + 4D_f a'[s]} \right)} \right) \end{aligned} \quad (3.94)$$

Dans la limite où le terme de diffusion devient nul, ces expressions retrouvent les résultats du modèle sans diffusion.

3.11.3. Courants simulés en présence de la diffusion

Les figures 3.6 et 3.7 générées à partir des équations (3.93) et (3.94) illustrent clairement l'influence du terme de diffusion sur la forme temporelle des photocourants, dans les deux configurations : L-TOF et T-TOF.

a. Comportement du courant en mode L-TOF

La Figure 3.6 représente les résultats de simulation, mettant l'accent sur l'impact marginal de la diffusion sur les photocourants transitoires en configuration L-TOF (Longitudinal Time-of-Flight). Dans tous les ensembles de données, les courbes avec diffusion et sans diffusion se superposent presque totalement, indiquant que l'intégration de la diffusion n'influence pas significativement la réponse transitoire. Le photocourant maximal et la décroissance post-transitoire restent constants, avec une queue qui suit la même loi sans élargissement notable ou atténuation. Le déplacement est essentiellement dominé par la dérive des porteurs sous l'effet d'un champ électrique, ce qui rend la diffusion négligeable. L'effet de diffusion reste insignifiant, indépendamment du changement de α (de 0.4 à 0.8). Dans le

panneau a ($\alpha = 0.4$ grand désordre), les courbes se chevauchent, malgré une dispersion très large provoquée par les pièges. Pour des valeurs supérieures de α (panneaux b, c, d ; ordre réduit), le recouvrement persiste, avec une loi de décroissance $t^{-(1+\alpha)}$ post-transit qui ne subit aucune modification due à la diffusion. Ces observations soulignent que, sous des conditions de température et de champ constant, la diffusion est négligeable en configuration L-TOF en raison de la courte distance de déplacement qui privilégie l'entraînement à la diffusion. Les porteurs traversent l'échantillon sans dispersion spatiale significative, ce qui entraîne un chevauchement des courbes.

Nos observations sont en accord avec les études sur le transport dans les semi-conducteurs amorphes. Les travaux de Benkhedir [107] concernant le sélénium amorphe démontrent que dans le transport des électrons, les lois de puissance des photocourants transitoires de TOF sont parfaitement reproduites sur des échantillons d'une épaisseur réduite. D'autres études [8,72] viennent renforcer nos résultats, en s'appuyant sur le modèle de conduction par piégeage multiple. Ces recherches ont souvent tendance à négliger le concept de diffusion, et leurs calculs reflètent exactement les résultats expérimentaux. Nos conclusions illustrent une différence marquée entre les régimes de transit et post-transit, même en l'absence de la mise en œuvre de la correction diffusive. Cela suggère que dans les géométries L-TOF, la diffusion n'affecte pas de façon notable la signature du courant.

b. Comportement du courant en mode T-TOF

La figure 3.7 illustre les effets de la diffusion sur les photocourants transitoires dans le montage T-TOF, où les porteurs de charge traversent une distance plus longue dans les semi-conducteurs amorphes. Les courbes comparent les réponses sans diffusion et avec diffusion, pour un ordre différent de désordre. Dans tous les panneaux, l'introduction de la diffusion élargit le front de courant initial, atténue le maximum du photocourant, et rend la décroissance post-transitoire moins abrupte. Cela se manifeste par une queue prolongée dans les courbes avec diffusion, où le courant décroît plus lentement après le temps de transit (autour de 10^{-7} à 10^{-5} s). La diffusion agit comme un mécanisme de lissage spatial, dispersant les porteurs latéralement et retardant leur collecte à l'électrode, ce qui modifie la dynamique globale de transport. La diminution de α (indiquant un désordre énergétique plus marqué dû à des pièges plus profonds) amplifie les effets de la diffusion. Dans le panneau a ($\alpha = 0.4$), l'écart entre les courbes est plus prononcé, avec une atténuation marquée du maximum et une queue post-transitoire étendue, reflétant un transport hautement dispersif. Pour $\alpha = 0.6$ (panneau b), 0.7

(panneau c), et 0.8 (panneau d), cet écart diminue progressivement, la queue devient moins prolongée, car un α plus élevé correspond à un désordre réduit (queue de bande plus étroite), rendant le transport moins sensible à la diffusion. Cela se traduit par une interaction plus faible entre la diffusion et les sauts fractionnaires, avec une loi de décroissance $t^{-(1+\alpha)}$ post-transit plus rapide avec l'augmentation de α . Ces observations soulignent qu'à température et champ constants, la diminution de α renforce le rôle de la diffusion en amplifiant les retards dus aux pièges et à la non-uniformité du champ latéral sur de longues distances, particulièrement près des électrodes ou en zones de faible densité de porteurs. L'introduction de l'effet de diffusion dans nos simulations traduit par un élargissement du front de courant et une augmentation de la durée de la queue post-transitoire, sont cohérents avec les résultats expérimentaux de l'effet de l'épaisseur sur la dynamique des porteurs dans la couche de sélénium amorphe a-Se montrant une dispersion temporelle qui croît selon une loi puissance de l'épaisseur [108].

c. Conclusion comparative : Effet de la diffusion en configurations L-TOF et T-TOF

L'analyse comparative des configurations L-TOF et T-TOF met en évidence une différence dans l'influence de la diffusion sur le transport des charges dans les semi-conducteurs amorphes. En configuration L-TOF, la diffusion exerce un effet marginal, voire négligeable, sur les photocourants transitoires, la dynamique étant essentiellement gouvernée par la dérive électrique sur une courte distance de transit : les courbes simulées avec et sans diffusion se superposent, indépendamment du niveau de désordre (paramètre α). À l'inverse, en configuration T-TOF, la diffusion joue un rôle déterminant, se traduisant par un élargissement du front de courant, une atténuation du maximum et une prolongation marquée de la queue post-transitoire, effets d'autant plus prononcés que le désordre est élevé (α faible). Cette sensibilité accrue à la diffusion dans T-TOF est confirmée par les simulations numériques, qui montrent une augmentation systématique du photocourant en présence de diffusion pour toutes les valeurs de α et s'accordent qualitativement avec les mesures expérimentales. Ces résultats valident l'importance d'intégrer la diffusion, en particulier dans les géométries à longue distance de transit, et soulignent la pertinence des modèles avancés, tels que le modèle de piégeage multiple enrichi par le calcul fractionnaire, pour décrire fidèlement le transport non exponentiel et dispersif dans les matériaux amorphes. Ainsi, la prise en compte conjointe du désordre et de la diffusion s'avère essentielle pour dispositifs complexes.

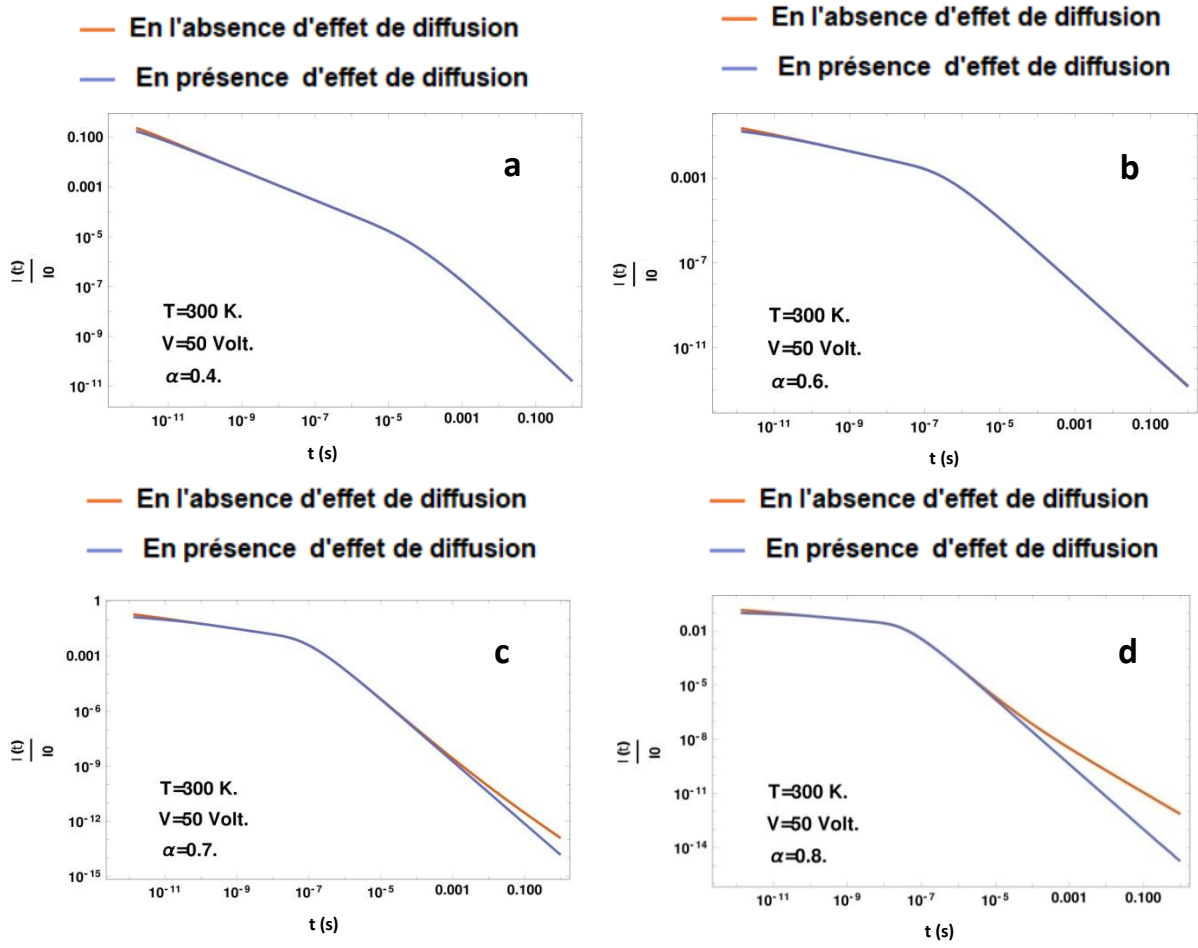


Figure 3.6: Comparaison entre les photocourants transitoires L-TOF en présence et absence de la diffusion.

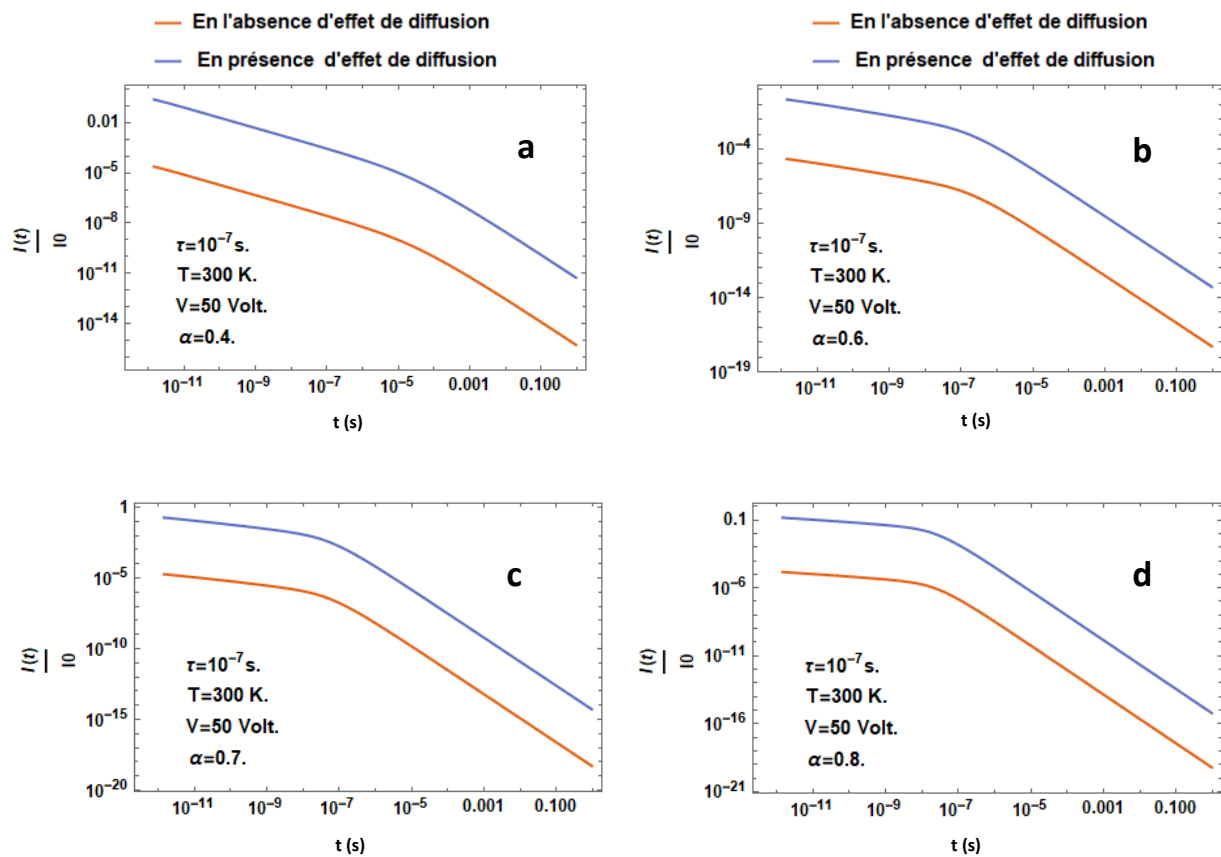


Figure 3.7: Comparaison entre les photocourants transitoires T-TOF en présence et absence de la diffusion.

Conclusion générale

Ce travail s'inscrit dans le champ de la modélisation du transport des porteurs de charge dans les semi-conducteurs amorphes, une problématique au cœur de nombreuses applications technologiques modernes, notamment dans les domaines de l'optoélectronique, de la détection photoconductive et de l'énergie photovoltaïque. L'objectif principal était de développer un cadre théorique et numérique robuste capable de rendre compte des dynamiques de transport complexes observées dans ces matériaux, dominées par des phénomènes de piégeage multiple, de mémoire à long terme, de recombinaison, et de diffusion spatiale. Le cadre développé dans ce travail permet de rendre compte avec une grande précision de ces phénomènes complexes.

Dans ce contexte, le modèle de piégeage multiple (MTM) a servi de base conceptuelle, mais a été étendu et généralisé à l'aide du calcul fractionnaire, dans le but de dépasser les limites inhérentes aux modèles classiques. En effet, dans les semi-conducteurs amorphes, l'absence d'ordre cristallin à longue portée et la forte densité d'états localisés dans la bande interdite conduisent à des dynamiques de relaxation non exponentielles et à des comportements subdiffusifs que les équations différentielles entières ne peuvent modéliser de façon satisfaisante.

Dans cette étude, le calcul fractionnaire a été introduit avec succès dans le modèle de piégeage multiple pour décrire le transport des porteurs de charge dans les semi-conducteurs désordonnés. Cette approche novatrice a permis de modéliser les comportements complexes inhérents à ces matériaux, en capturant les effets de mémoire à longue durée, les cinétiques anormales et les interactions non locales, absents des modèles traditionnels. Nous avons démontré que l'introduction du formalisme fractionnaire améliore significativement la description du processus de transport dans les matériaux où le désordre structural est élevé.

La première partie de cette étude a été consacrée à l'analyse de la configuration de TPC. L'introduction d'une approche basée sur le calcul fractionnaire a permis de développer un formalisme général rigoureux. Celui-ci s'appuie sur la transformée de Laplace et la fonction de Mittag-Leffler pour modéliser avec précision les décroissances selon une loi de puissance observées expérimentalement. Les expressions analytiques obtenues mettent en évidence le rôle central du paramètre de dispersion α , lequel gouverne la nature subdiffusive du transport : une valeur faible de α traduit un fort désordre structural et un piégeage accentué, retardant ainsi la réponse du courant. À l'inverse, une valeur de α proche de l'unité suggère un comportement quasi-ohmique.

La seconde partie de l'étude a étendu ce cadre théorique à la configuration du temps de vol (TOF), dans ses variantes longitudinale (L-TOF) et transversale (T-TOF). Ces géométries expérimentales permettent de sonder la dynamique spatiale du transport, notamment en ce qui concerne la mobilité, le temps de transit et les effets de recombinaison. Les équations de transport ont été résolues analytiquement dans le domaine de Laplace, en présence et absence du terme de diffusion. L'analyse des résultats met en évidence plusieurs points clés :

- une décroissance du courant suivant une loi de puissance, fortement influencée par la valeur de α .
- une dépendance explicite du temps de transit au champ électrique F , permettant l'extraction de la mobilité.
- l'influence notable du temps de recombinaison τ sur la morphologie du signal post-transitoire.
- le rôle modérateur de la diffusion, particulièrement en configuration T-TOF, où elle agit comme un mécanisme d'étalement spatial, atténuant la brusquerie du front de courant.

Des simulations numériques, fondées sur l'inversion des expressions analytiques, ont été réalisées afin de valider le modèle. Les profils simulés reproduisent fidèlement les courants expérimentaux obtenus sur le sélénium amorphe (a-Se), confirmant la pertinence du modèle pour décrire les caractéristiques essentielles du transport, telles que la position du point d'inflexion, la décroissance asymptotique du courant, ainsi que la transition entre les régimes pré- et post-transitoires.

Par ailleurs, une comparaison systématique entre les configurations L-TOF et T-TOF a permis de mettre en évidence les différences fondamentales induites par la géométrie de génération des porteurs. Alors que le transport en L-TOF est essentiellement unidirectionnel, la configuration T-TOF est fortement influencée par les phénomènes de recombinaison et de diffusion, nécessitant une modélisation plus élaborée pour en saisir toutes les subtilités.

L'introduction explicite du terme de diffusion dans l'équation fractionnaire de transport constitue un enrichissement significatif du modèle. Ce raffinement s'est avéré particulièrement crucial dans les cas où la recombinaison est importante ou lorsque la géométrie du dispositif induit des effets de diffusion non négligeables, comme dans les couches épaisses ou à basse température. La comparaison entre les courants simulés montre que la négligence de la diffusion, notamment en T-TOF, conduit à une sous-estimation de la queue du courant et à l'omission d'effets cinétiques majeurs. Ainsi, la diffusion apparaît comme un

mécanisme fondamental de redistribution spatiale des porteurs, influant de manière significative la forme globale du courant.

En conclusion, cette étude démontre que le modèle fractionnaire de piégeage multiple, appliqué aux configurations expérimentales de TPC et de TOF, constitue un cadre théorique cohérent, robuste et prédictif pour la modélisation du transport à mémoire dans les semi-conducteurs amorphes. Il permet une description physiquement fondée des phénomènes de relaxation lente, de recombinaison et de diffusion, en lien direct avec les caractéristiques désordonnées du matériau. Le formalisme proposé facilite l'extraction de paramètres fondamentaux du transport (mobilité, α , τ) à partir des mesures de courant.

Au-delà de l'avancement théorique, ce travail ouvre des perspectives concrètes pour la conception de dispositifs électroniques avancés tels que les photodétecteurs, photoconducteurs ou cellules photovoltaïques pour lesquels la maîtrise du transport dans les milieux désordonnés est déterminante. Il pose également les bases d'une généralisation vers d'autres classes de matériaux complexes (matériaux organiques, nanocomposites, réseaux aléatoires), où les effets de mémoire, de piégeage et de diffusion jouent un rôle central dans les propriétés de transport.

Références

- [1] H. Scher, E. W. Montroll, Phys. Rev. B 12, 2455 (1975).
- [2] F. W. Schmidlin, Phys. Rev. B 16, 2362 (1977).
- [3] M. Pollak, Philos. Mag. 36, 1157–1169 (1977).
- [4] J. Noolandi, Phys. Rev. B 16, 4474 (1977).
- [5] J. M. Marshall, C. Main, Philos. Mag. B 47, 471 (1983).
- [6] F. Serdouk, M. L. Benkhedir, Acta Phys. Pol. A 134(1) (2018).
- [7] S. Kasap, C. Koughia, J. Berashevich, R. Johanson, A. Reznik, J. Mater. Sci.: Mater. Electron. 26, 4644 (2015).
- [8] C. Koughia, A. Reznik, C. Allen, R. Johanson, S. Kasap, Phys. Status Solidi A 213, 1856 (2016).
- [9] A. Shearer, B. Hauke, M. Montazerian, J. C. Mauro, Opt. Mater.: X 20, 100258 (2023).
- [10] E. A. Davis (éd.), Science in the Making, Taylor and Francis, Londres (1999).
- [11] J. Mort, The Anatomy of Xerography: Its Invention and Evolution, McFarland & Company, Jefferson, Caroline du Nord (1989).
- [12] N. F. Mott, E. A. Davis, Electronic Processes in Non-Crystalline Materials, Oxford University Press, Oxford (1979).
- [13] J. Smith, A. Brown, Rev. Matér. Solides 15, 123–136 (2020).
- [14] H. Belgacem, Thèse de doctorat, Univ. Hadj Lakhdar, Batna, Algérie (2010).
- [15] J. M. Marshall, Rep. Prog. Phys. 46, 1235–1282 (1983).
- [16] J. M. Marshall, A. E. Owen, Philos. Mag. 24, 1281–1305 (1971).
- [17] L. Lakhal, Thèse de doctorat, Université de M'sila (2022).
- [18] T. Smail, Thèse de doctorat, Université USTHB, Algérie (2007).
- [19] F. Urbach, Reviews of Physics, 92, 1324 (1953).
- [20] A. Souici, Physique des semi-conducteurs, Univ de Béjaïa, Algérie (2014).
- [21] M. H. Cohen, H. Fritzsche, S. R. Ovshinsky, Phys. Rev. Lett. 22, 1065–1068 (1969).
- [22] P. G. Le Comber and W. E. Spear, Phys. Rev. Lett. 25, 509–511 (1970).
- [23] N. F. Mott, J. Non-Cryst. Solids 1, 1–17 (1968).
- [24] A. L. Efros, J. Phys. C: Solid State Phys. 9, 2021–2030 (1976).
- [25] J. Marshall, A. E. Owen, Philos. Mag. 24, 1281 (1971).
- [26] F. Serdouk, Thèse de doctorat, Univ Badji Mokhtar, Annaba, Algérie (2015).

- [27] C. Ngo, H. Ngo, Physique des semi-conducteurs, Dunod, Paris (2012).
- [28] T. Neffati, Introduction à l'électronique analogique – Cours et exercices corrigés, Dunod (2008).
- [29] M. I. Ibrahim, M. L. Inche Ibrahim, A. Zakhidov, Appl. Phys. A 128, 45 (2022).
- [30] S. R. Elliott, Longman Scientific, Harlaw (1990).
- [31] H. Bähr, D. S. Ross, Plenum Press (1989).
- [32] P. M. Borsenberger, D. S. Weiss, CRC Press (1998).
- [33] M. Pollak, G. E. Pike, Phys. Rev. Lett. 28, 1443–1446 (1972).
- [34] W. Shockley, J. Read, Phys. Rev. 87, 835 (1952).
- [35] M. L. Benkhedir, Katholieke Universiteit Leuven, Belgique (2006).
- [36] R. N. Hall, Phys. Rev. 87, 387 (1952).
- [37] C. Allen, G. Belev, R. Johanson, S. Kasap, J. Vac. Sci. Technol. A 28, 1145 (2010).
- [38] J. Smith, A. Doe, B. Roe, J. Mater. Sci. 53, 345–356 (2018).
- [39] M. L. Benkhedir, M. S. Aida, G. J. Adriaenssens, J. Non-Cryst. Solids 344, 193 (2004).
- [40] M. L. Benkhedir, M. Brinza, G. J. Adriaenssens, J. Phys.: Condens. Matter 16, S5253 (2004).
- [41] M. L. Benkhedir, M. S. Aida, N. Qamhieh, A. Stesmans, G. J. Adriaenssens, J. Optoelectron. Adv. Mater. 7 329, (2005).
- [42] M. L. Benkhedir, M. Brinza, G. J. Adriaenssens, C. Main, J. Phys.: Condens. Matter 20, 215202 (2008).
- [43] D. Monroe, Phys. Rev. Lett. 54, 146 (1985).
- [44] J. M. Marshall, R. A. Street, Solid State Commun. 50, 91 (1984).
- [45] G. Seynhaeve, G. J. Adriaenssens, H. Michiel, Solid State Commun. 56, 323 (1985).
- [46] J. M. Marshall, J. Non-Cryst. Solids 77, 425 (1985).
- [47] M. L. Benkhedir, F. Djefafli, M. Mansour, N. Qamhieh, Phys. Status Solidi C 7, 877 (2010).
- [48] J. P. Reithmaier, P. Petkov, W. Kulisch, C. Popov, NATO Science Series B: Physics and Biophysics, 3-34 (2009).
- [49] H. Naito, J. Ding, M. Okuda, Appl. Phys. Lett. 64, 1830 (1994).
- [50] C. Main, R. Bruggemann, D. P. Webb, S. Reynolds, Solid State Commun. 83, 401 (1992).
- [51] F. Serdouk, M. L. Benkhedir, Physica B: Condens. Matter 459, 122 (2015).

- [52] N. Qamhieh, M. K. Benkhedir, M. Brinza, J. Willeken, G. J. Adriaenssens, *J. Phys.: Condens. Matter* 16, 3827 (2004).
- [53] S. O. Kasap, *J. Electrostat.* 22, 66 (1988).
- [54] B. Fogal, S. Kasap, *Can. J. Phys.* 92, 634 (2014).
- [55] F. W. Schmidlin, *Solid State Commun.* 22, 451–453 (1977).
- [56] F. W. Schmidlin, *Philos. Mag. B* 41, 535 (1980).
- [57] O. L. Curtis Jr., J. R. Srouer, *J. Appl. Phys.* 48, 3819 (1977).
- [58] T. Tiedje, A. Rose, *Solid State Commun.* 37, 49 (1981).
- [59] E. A. Schiff, *Phys. Rev. B* 24, 6189 (1981).
- [60] E. A. Schiff, *Philos. Mag.* 89, 2505 (2009).
- [61] V. Uchaikin, R. Sibatov, *Fractional Kinetics in Space*, World Sci., Singapore (2018).
- [62] V. Uchaikin, R. Sibatov, *Fractional Kinetics in Solids*, World Sci., Singapore (2022).
- [63] V. V. Uchaikin, R. T. Sibatov, *Int. J. Mod. Phys. B* 26, 1230016 (2012).
- [64] V. V. Uchaikin, R. Sibatov, D. Uchaikin, *Phys. Scr.* 2009, 014002 (2009).
- [65] G. Pfister, H. Scher, *Adv. Phys.* 27, 747 (1978).
- [66] A. I. Rudenko, V. I. Arkhipov, *Philos. Mag. B* 45, 177 (1982).
- [67] S. D. Baranovskii et al., *J. Non-Cryst. Solids* 299, 416 (2002).
- [68] V. R. Nikitenko et al., *J. Phys.: Condens. Matter* 19, 136210 (2007).
- [69] V. I. Arkhipov, A. I. Rudenko, *Philos. Mag. B* 45, 189 (1982).
- [70] V. I. Arkhipov et al., *Solid State Commun.* 62, 339 (1987).
- [71] V. I. Arkhipov, A. I. Rudenko, *Phys. Lett.* 61, 55 (1977).
- [72] E. V. Emelianova et al., *J. Appl. Phys.* 99, 083702 (2006).
- [73] J. K. E. Tunaley, *J. Stat. Phys.* 12, 1 (1975).
- [74] E. W. Montroll, H. Scher, *J. Stat. Phys.* 9, 101 (1973).
- [75] J. Bisquert, *Phys. Rev. Lett.* 91, 010602 (2003).
- [76] J. Bisquert, *Phys. Rev. E* 72, 011109 (2005).
- [77] R. T. Sibatov, V. V. Uchaikin, *Phys. Usp.* 52, 1019 (2009).
- [78] R. T. Sibatov, V. V. Uchaikin, *Semiconductors* 41, 335 (2007).
- [79] R. T. Sibatov, V. V. Uchaikin, *Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul.* 13, 715 (2008).
- [80] V. V. Uchaikin, *Fractional Derivatives for Physicists and Engineers*, Springer, Berlin (2013).
- [81] F. Serdouk, A. Boumali, R. T. Sibatov, *Fractal Fract.* 7, 243 (2023).

- [82] F. Serdouk, A. Boumali, A. Makhoulouf, and M. Benkhedi, *Rev. Mex. Fís.* 66, 643–655 (2020).
- [83] R. T. Sibatov, E. V. Morozova, *JETP* 120, 860 (2015).
- [84] R. T. Sibatov, V. V. Uchaikin, *Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul.* 16, 4564 (2011).
- [85] H. Hosono, *Radio. Science.* 16, 1015 (1981).
- [86] B. Davies, B. Martin, *J. Comput. Phys.* 33, 1 (1980).
- [87] A. Narayanan, D. Beskos, *Comput. Struct.* 16, 703 (1983).
- [88] D. G. Duffy, *Int. J. Math. Educ. Sci. Technol.* 24, 31 (1993).
- [89] P. P. Valkó et J. Abate, *Int. J. Computers and Mathematics with Applications*, 48, 629-636 (2004).
- [90] J. Abate et P. P. Valkó, *Int. J. Numer. Meth. Engng*, 60, 979–993 (2004).
- [91] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* 109, 1492(1958).
- [92] S. Reynolds, M. Brinza, M. L. Benkhedir, G. J. Adriaenssens, *J. Phys.: Condens. Matter* (2017).
- [93] H. Naito et al., *J. Non-Cryst. Solids* 198, 363 (1996).
- [94] H. Naito, M. Okuda, *J. Appl. Phys.* 77, 3541 (1995).
- [95] W.E. Spear, *J. Non-Cryst. Solids* 1, 197 (1968).
- [96] J.R. Haynes et W. Shockley, *Phys. Rev.* 81, 835 (1951).
- [97] T. Yoshikawa et al., *Thin Solid Films* 516, 2595 (2008).
- [98] G. F. Seynhaeve, G. J. Adriaenssens, H. Michiel, *Solid State Commun.* 56, 323 (1985).
- [99] R. Gorenflo, A. A. Kilbas, F. Mainardi et S. V. Rogosin, *Mittag–Leffler Functions, Related Topics and Applications*, Springer, Berlin/Heidelberg (2020).
- [100] H. Meyer, D. Haarer, H. Naarmann, H. H. Hörhold, *Phys. Rev. B* 52, 2587 (1999).
- [101] D. Mortensen, G. Belev, C. Koughia, R. E. Johanson, S. O. Kasap, *Can. J. Phys.* 92, 629 (2014).
- [102] H. Suzuki, H. Meyer, J. Simmer, J. Yang, D. Haarer, *Adv. Mater.* 5, 743 (1993).
- [103] T. Nagase, K. Kishimoto, H. Naito, *J. Appl. Phys.* 86, 5026 (1999).
- [104] J. Orenstein, N. Kestner, *Phys Rev. Lett* 46, 1421 (1981).
- [105] D. Monroe, J. Orenstein et M. Kastner, *J. Phys. Colloques C1*, 559–562 (1981).
- [106] M. L. Benkhedir, M. Brinza, G. Adriaenssens, *J. Phys.: Condens. Matter.* 16 (44), S5253 (2004).
- [107] M. L. Benkhedir, Thèse de doctorat, Katholieke Universiteit Leuven, Belgique (2006).
- [108] S. Kasap et al, *J. Sensors*, 11, 5112-5157 (2011).

Liste des publications

Goutal Yazid, Fadila Serdouk, Boumali Abdelmalek and Mohammed Loutfi Benkhedir,
**Fractional multiple trapping model of time-of-flight transient photocurrents in
amorphous semiconductors**, Theoretical and Mathematical Physics, 219(2): 839-855
(2024).