

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

BADJI MOKHTAR -ANNABA  
UNIVERSITY

UNIVERSITE BADJI MOKHTAR  
ANNABA



جامعة باجي مختار  
- عنابة -

Faculté des Sciences

Année : 2015

Département de Physique

**THESE**

Présentée en vue de l'obtention du diplôme de **Doctorat en Sciences**

*Etude des propriétés électroniques des semi-conducteurs*

*amorphes par les photo-courants transitoires*

**Option**

**Physique des matériaux**

**Par**

**Serdouk Fadila**

Devant le jury

<b>PRESIDENT :</b>	ABDELAZIZ DOGHMANE	Prof	Université d'Annaba
<b>DIRECTEUR DE THESE :</b>	MOUHAMED LOUTFI BENKHEDIR	Prof	Université de Tébessa
<b>CO-DIRECTEUR DE THESE:</b>	MOUHAMED TAHAR BOUAZZA	Prof	Université d'Annaba
<b>EXAMINATEUR :</b>	MOKHTAR GHERS	Prof	Université d'Annaba
<b>EXAMINATEUR :</b>	MOUHAMED SALAH AÏDA	Prof	Université de Constantine 1
<b>EXAMINATEUR :</b>	ABDELKADER BELFEDAL	M C A	Université de Mascara

---

*A ma mère,*

*A mon mari Abdelmalek*

*A mes enfants : Selsabil et Taha Abdelkayoum*

---

---

## *Remerciements*

*Ce travail a été réalisé au sein du laboratoire de **Physique Théorique et Appliquée** de l'Université de Tébessa. Je tiens à remercier Monsieur **Bouabli Abdelmalek**, Directeur du LPAT, pour m'avoir accueilli dans le laboratoire.*

*Tout d'abord, je remercie vivement Dieu le tout puissant pour m'avoir donné la volonté de réussir et de terminer mon travail.*

*J'adresse mes remerciements tous particuliers à Monsieur **Benkhedir Mohamed Loutfi**, Professeur à l'Université de Tébessa de m'avoir confié le sujet de recherche très attrayant et avoir dirigé ce travail par tous ses virages. Merci pour ces conseils qui m'ont permis d'acquérir une grande expérience, pour les mots d'encouragement et de soutien, mais aussi pour avoir eu confiance en moi aux moments difficiles. Ses compétences élèvent considérablement la valeur de ce travail.*

*Je remercie vivement Monsieur **Bouazza Mohamed Tahar**, Professeur à l'Université d'Annaba de la confiance qu'il m'a accordé, pour sa participation au jury en tant que co-directeur de thèse.*

*Je témoigne ma plus haute gratitude à Monsieur **Doghmane Abdelaziz**, Professeur à l'Université d'Annaba pour m'avoir fait l'honneur d'assurer la présidence du jury.*

*Je tiens à exprimer mes remerciements respectueux envers Monsieur **Aïda Mohamed Saleh**, Professeur à l'Université de Constantine 1, d'avoir accepté de participer à ce jury de thèse et de juger ce travail.*

---

---

Je tiens également à remercier Monsieur **Ghems Mokhtar**, Professeur à l'Université d'Annaba de l'intérêt qu'il a témoigné pour mon travail, ainsi que d'avoir bien voulu de participer au jury de thèse.

Je suis très honorée par la présence de Monsieur **Belfedal Abdellkader**, Maître de Conférences à l'Université de Mascara dans le jury de ma thèse. Je voudrais lui assurer toute ma gratitude.

Je tiens à remercier tous mes amis. Je veux mentionner spécialement Samia et Méniara avec lesquelles j'ai passé mes débuts dans la physique. J'ai eu un serrement au cœur chaque fois que l'une deux quittait le groupe pour rejoindre le monde du travail.

Au cours de ces quelques années, j'ai eu le plaisir de travailler avec ma collègue F. Djefafli. Tous les échanges d'idées que nous avons eues m'ont permis de mieux appréhender notre axe de recherche dans un climat chaleureux et stimulant, qui a contribué à l'aboutissement de ce travail.

Et si nous sommes dans l'entourage personnel, je tiens à remercier de tout mon cœur ma famille, particulièrement ma **Mère**. 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. Particulièrement, je veux remercier mon mari **Boumali Abdelmalek**, Professeur à l'Université de Tébessa pour son aide constant, son soutien indéfectible, son encouragement bienveillant et pour m'avoir toujours poussé à aller de l'avant. Sans son extraordinaire patience, je n'aurais jamais réussi ce projet.

Enfin, j'adresse toute ma reconnaissance aux personnes qui, de près ou de loin m'ont aidé à l'accomplissement de ce travail.

---

---

## المخلص

ترتبط الخصائص الإلكترونية للمواد غير المتبلورة الى حد كبير بشكل كثافة الحالات داخل المجال الطاقوي الممنوع. بالنسبة لأنصاف النواقل غير المتبلورة ذات المقاومة العالية، تعتبر التقنية التجريبية للناقلية الضوئية الإنتقالية التقنية المفضلة، للكشف عن كثافة الحالات المتموضعة.

يهدف هذا العمل إلى المحاكاة الرقمية للناقلية الضوئية الإنتقالية من أجل حساب كثافة الحالات داخل الشريط الممنوع لأنصاف النواقل غير المتبلورة في إطار نموذج الصيد بالفخ (الإقتناص المتعدد)، أو التنبؤ بتيارات ضوئية إنتقالية بافتراض شكل معين لكثافة الحالات المتموضعة باستخدام تقنية لابلاس Laplace ثم استخدام برنامج المحاكاة في دراسات حالية حول Les chalcogénures.

تمت محاكاة النظام الإنتقالي بالحل العددي لمعادلات الإستمرارية و معادلات الفخ بأخذ بعين الإعتبار شروط الناقلية الضوئية العابرة و بالتالي تمكنا من تحقيق الهدف المنشود عن طريق إنجاز برنامج محاكاة بإستخدام Le logiciel Mathcad.

كنتطبيق سمح برنامج المحاكاة بتحديد شكل كثافة الحالات داخل الشريط الممنوع بالنسبة للسيلينيوم غير المتبلور النقي و المطعم بالأرسونيك.

**الكلمات المفتاحية:** الناقلية الضوئية الإنتقالية، كثافة الحالات المتموضعة، الصيد بالفخ، السيلينيوم غير المتبلور.

---

## Résumé

Les propriétés électroniques des matériaux amorphes sont considérablement affectées par la forme de la densité des états localisés dans la bande interdite. Pour le cas des matériaux semi-conducteurs amorphes à résistance élevée, la technique expérimentale de la photoconductivité transitoire (TPC) est une technique de choix pour explorer cette densité. Le but de ce travail est d'élaborer un code numérique permettant de calculer la densité d'états à partir du spectre de la photoconductivité transitoire dans le cadre du modèle de conduction par piégeage multiple, ou de prévoir les courants (TPC) en admettant une densité d'états, et ceci en utilisant la technique de Laplace puis l'utilisation de ce code dans des études en cours sur les chalcogénures.

Le régime transitoire est simulé par la résolution numérique des équations de continuité et les équations de piégeage multiple, en considérant les conditions de la technique de la photoconductivité transitoire (TPC). Ainsi, l'objectif de ce travail, est en grande partie validé par l'élaboration d'un code en utilisant le logiciel MATHCAD. La forme de la densité d'états est bien déterminée pour les cas suivants: le sélénium (a-Se) pur, et le sélénium dopé avec l'arsenic.

**Mots-clés:** Photoconductivité transitoire, Densité des états localisés, Piégeage multiple, Sélénium amorphe a-Se.

---

## Abstract

The electronic properties of the amorphous materials are greatly affected by the shape of the density of localized states in the band gap. For the case of amorphous semiconductor material highly resistant, the experimental technique of transient photoconductivity (TPC) is a method of choice to explore this density. The aim of this work is to develop a numerical code to calculate the density of states from the spectrum of the transient photoconductivity under the conduction model by multiple trapping, or anticipate common (TPC) assuming a density of states and this by using the technique of Laplace then use this code in current studies on chalcogenides.

The transient is simulated by the numerical solution of continuity equations and the equations of multiple trapping by considering the conditions of the technique of transient photoconductivity (TPC). Thus, the objective of this work is largely validated by the development of a code using the MATHCAD software. The shape of the density of states is determined for the following cases: selenium (a-Se) pure and doped with arsenic.

**Keywords:** Transient Photoconductivity, Density of localized states, Multiple trapping, Amorphous selenium a-Se.

# Liste des abréviations

---

a-Se	<i>Sélénium amorphe</i>
CFO	<i>Modèle de densité d'états proposé par Cohen, Fritzsche et Ovshinski</i>
$g(E)$	<i>Densité des états localisés</i>
$E_C$	<i>Bande de conduction</i>
$E_V$	<i>Bande de valence</i>
$E_F$	<i>Niveau de Fermi</i>
TOF	<i>Temps de vol (Time-of-flight)</i>
TPC	<i>Photoconductivité transitoire (Transient photoconductivity)</i>
F	<i>Champ électrique</i>
q	<i>Charge élémentaire</i>
T	<i>Température absolue</i>
E	<i>Energie</i>
$K_B$	<i>Constante de Boltzmann</i>
$\mu_0$	<i>Mobilité microscopique</i>
$\tau$	<i>Durée de vie</i>
I	<i>Courant</i>
$\alpha$	<i>Paramètre de dispersion</i>
$\omega_i$	<i>Probabilité de capture</i>
$\gamma_i$	<i>Probabilité de réémission</i>

$\bar{v}$	<i>La vitesse moyenne d'un porteur mobile</i>
$\sigma$	<i>Section efficace de capture</i>
$\nu$	<i>Fréquence de tentative d'échappement</i>
$v_{th}$	<i>Vitesse thermique</i>
$g_0$	<i>L'amplitude de la distribution exponentielle</i>
$T_0$	<i>Température caractéristique de la distribution exponentielle</i>
$g_G$	<i>L'amplitude de la distribution gaussienne</i>
$E_w$	<i>Largeur de la distribution gaussienne</i>
$E_G$	<i>La position énergétique du pic</i>
LT	<i>La transformée de Laplace de la photoconductivité transitoire</i>
HLT	<i>La transformée de Laplace de la photoconductivité transitoire à haute résolution</i>
$\delta$	<i>La fonction de Dirac</i>
$\rho(\bar{x},t)$	<i>Concentration totale des charges</i>
$g_v(\bar{x},t)$	<i>Le taux de génération</i>
$f(\bar{x},t)$	<i>Le flux des charges mobiles</i>
D	<i>Coefficient de diffusion d'Einstein</i>
$P(t)$	<i>Concentration des trous libres</i>
$P_i(t)$	<i>Concentration des trous piégés</i>
$n_0$	<i>Densité des porteurs libres injectés</i>
$\hat{P}(s)$	<i>La transformée de Laplace</i>

# Table des figures

Figures	Titre	Page
	<b>Chapitre 1</b>	
<b>Figure 1.1</b>	<i>Représentation bidimensionnelle de la structure atomique d'un (a) solide cristallin et (b) solide amorphe: les atomes marqués en «O» et "U" représentent respectivement les atomes sur et sous coordonnés par rapport au nombre habituel de liaisons entre les atomes adjacents.</i>	<b>7</b>
<b>Figure 1.2</b>	<i>(a) La densité d'états dans un semi-conducteur cristallin,(b), (c), (d) les modèles de densité d'états dans les amorphes proposés respectivement par Mott, CFO, Marshall et Owen. Les zones hachurées représentent des états localisés. Noter que l'axe des abscisses dans les quatre Figures est logarithmique.</i>	<b>11</b>
<b>Figure 1.3</b>	<i>LA photoconductivité transitoire standard (TPC) [15].</i>	<b>13</b>
<b>Figure 1.4</b>	<i>Les éléments essentiels d'un circuit du temps de vol (TOF) [15].</i>	<b>15</b>
<b>Figure 1.5</b>	<i>Le transport des charges dans la technique du temps de vol (TOF).</i>	<b>16</b>
<b>Figure 1.6</b>	<i>Le courant transitoire dans un photoconducteur amorphe [28].</i>	<b>17</b>
<b>Figure 1.7</b>	<i>Schématisation du mécanisme de conduction par piégeage multiple [30].</i>	<b>18</b>
<b>Figure 1.8</b>	<i>Schématisation des états de transport et les pièges dans un semi-conducteur amorphe [8].</i>	<b>19</b>
<b>Figure 1.9</b>	<i>Le flux du courant et les processus de piégeage et de libération dans un semi-conducteur avec un seul niveau de piégeage.</i>	<b>20</b>
<b>Figure 1.10</b>	<i>La densité d'états dans le sélénium amorphe proposée par Abkowitz [39].</i>	<b>26</b>
<b>Figure 1.11</b>	<i>Schéma tentative du diagramme de bandes dans (a-Se ) développé par le groupe de l'université de Saskatchewan.</i>	<b>27</b>
	<b>Chapitre 2</b>	
<b>Figure 2.1</b>	<i>Organigramme de la simulation de l'inverse de Laplace.</i>	<b>42</b>
<b>Figure 2.2</b>	<i>Le photocourant transitoire (TPC) simulé pour une distribution exponentielle des états localisés à différentes valeurs de <math>T_0</math> et pour <math>\tau = 10^{-6} s</math>.</i>	<b>43</b>
<b>Figure 2.3</b>	<i>La densité des états localisés calculée par la méthode (LT) à partir du photocourant transitoire (TPC) de la Figure (2.2).</i>	<b>44</b>
<b>Figure 2.4</b>	<i>Le photocourant transitoire (TPC) simulé pour une distribution exponentielle des états localisés avec une température caractéristique <math>T_0=500K</math>, superposée d'une distribution gaussienne avec différents valeurs de <math>g_{Get}</math> pour <math>\tau = 10^{-8} s</math>.</i>	<b>45</b>
<b>Figure 2.5</b>	<i>La densité des états localisés calculée par la méthode (LT) à partir du photocourant (TPC) de la Figure (2.4).</i>	<b>46</b>
<b>Figure 2.6</b>	<i>Le photocourant transitoire (TPC) simulé pour une distribution exponentielle des états localisés avec une température caractéristique <math>T_0=500K</math>, superposée d'une distribution gaussienne avec différents valeurs de <math>E_w</math> et pour <math>\tau = 10^{-8} s</math>.</i>	<b>47</b>
<b>Figure 2.7</b>	<i>La densité des états localisés calculée par la méthode (LT) à partir du</i>	<b>48</b>

	<i>photocourant (TPC) de la Figure (2.6).</i>	
<b>Figure 2.8</b>	<i>La densité des états localisés calculée par la méthode (LT) à partir des données complètes et tronquées du photocourant (TPC) de la Figure (2.2).</i>	<b>49</b>
<b>Figure 2.9</b>	<i>La densité des états localisés calculée par la méthode (LT) à partir des données complètes et tronquées du photocourant (TPC) de la Figure (2.4).</i>	<b>50</b>
<b>Figure 2.10</b>	<i>Le photocourant transitoire (TPC) simulé pour une distribution exponentielle des états localisés avec une température caractéristique <math>T_0=500K</math> à différentes valeurs <math>\tau</math>.</i>	<b>52</b>
<b>Figure 2.11</b>	<i>La densité des états localisés calculée par la méthode (LT) à partir du photocourant (TPC) de la Figure (2.10).</i>	<b>52</b>
<b>Figure 2.12</b>	<i>Le photocourant transitoire (TPC) simulé pour une distribution exponentielle des états localisés avec une température caractéristique <math>T_0=500K</math>, superposée d'une distribution gaussienne à différentes valeurs <math>\tau</math>.</i>	<b>53</b>
<b>Figure 2.13</b>	<i>La densité des états localisés calculée par la méthode (LT) à partir du photocourant (TPC) de la Figure (2.12).</i>	<b>53</b>
<b>Figure 2.14</b>	<i>La densité des états localisés calculée par la méthode (HLT) à partir du photocourant (TPC) de la Figure (2.2).</i>	<b>54</b>
<b>Figure 2.15</b>	<i>La densité des états localisés calculée par la méthode (HLT) à partir du photocourant (TPC) de la Figure (2.4).</i>	<b>55</b>
<b>Figure 2.16</b>	<i>La densité des états localisés calculée par la méthode (HLT) à partir du photocourant (TPC) de la Figure (2.6).</i>	<b>55</b>
<b>Figure 2.17</b>	<i>La densité des états localisés calculée par la méthode (HLT) à partir des données complètes et tronquées du photocourant (TPC) de la Figure (2.4).</i>	<b>56</b>
<b>Figure 2.18</b>	<i>Comparaison entre le courant simulé dans notre travail et celui obtenu par la méthode dite (FILT) : cas d'une distribution exponentielle.</i>	<b>58</b>
<b>Figure 2.19</b>	<i>Comparaison entre le courant simulé dans notre travail et celui obtenu par la méthode dite (FILT) : cas d'une distribution exponentielle plus gaussienne.</i>	<b>58</b>
<b>Chapitre 3</b>		
<b>Figure 3.1</b>	<i>Le photocourant transitoire expérimental (TPC) dans le sélénium amorphe pur à différentes températures [53].</i>	<b>62</b>
<b>Figure 3.2</b>	<i>Reconstruction de la densité d'états dans (<math>\alpha</math>-Se) à partir de la simulation de (TPC) de la Figure (3.1). Les différents symboles correspondent à la densité d'états à une température donnée.</i>	<b>63</b>
<b>Figure 3.3</b>	<i>La densité d'états dans (<math>\alpha</math>-Se) calculée à partir des données expérimentales du photocourant transitoire de Benkhedir et al [53]. Pour plus de clarté, les courbes individuelles ont été décalées verticalement. La ligne en continue est un fond</i>	<b>63</b>

	<p>exponentiel avec une pente de <math>\frac{1}{K_B T_0}</math> dont <math>T_0 = 350K</math>. Cette ligne consiste à guider l'œil.</p>	
<b>Figure 3.4</b>	Le photocourant transitoire expérimental (TPC) dans le sélénium amorphe dopé avec 0.2 at % d'arsenic à différente température [88].	<b>66</b>
<b>Figure 3.5</b>	Le photocourant transitoire expérimental (TPC) dans le sélénium amorphe dopé avec 0.5at% d'arsenic à différente température [88].	<b>66</b>
<b>Figure 3.6</b>	Reconstruction de la densité d'états dans a-Se : 0.2 at% As à partir de la simulation de (TPC) de la Figure (3.4). Les différents symboles correspondent à la densité des états à une température donnée.	<b>67</b>
<b>Figure 3.7</b>	La densité d'états dans a-Se: 0.2 at % As calculée à partir des données expérimentales du photocourant transitoire de Benkhedir et al [88]. Pour plus de clarté, les courbes individuelles ont été décalées verticalement.	<b>67</b>
<b>Figure 3.8</b>	Reconstruction de la densité d'états dans a-Se: 0.5 at% As à partir de la simulation de (TPC) de la Figure (3.5). Les différents symboles correspondent à la densité d'états à une température donnée.	<b>68</b>
<b>Figure 3.9</b>	La densité d'états dans a-Se: 0.5 at % As calculée à partir des données expérimentales du photocourant transitoire de Benkhedir et al [88]. Pour plus de clarté, les courbes individuelles ont été décalées verticalement.	<b>68</b>
<b>Figure 3.10</b>	La densité d'états théorique dans a-Se dopé avec 0.2 at% et 0.5at% As.	<b>70</b>
<b>Figure 3.11</b>	La durée de vie des trous en fonction de l'inverse de la température dans le sélénium amorphe stabilisé.	<b>73</b>
<b>Figure 3.12</b>	L'évolution du courant théorique et expérimental pour un temps de démarrage de $10^{-7}s$ .	<b>74</b>
<b>Figure 3.13</b>	L'évolution du courant théorique et expérimental pour un temps de démarrage de $10^{-8}s$ et $10^{-12}s$ .	<b>75</b>
<b>Figure 3.14</b>	Comparaison entre le photocourant transitoire simulé et expérimental dans le sélénium amorphe dopé avec 0.2 at% d'arsenic à $T=253K$ .	<b>76</b>
<b>Figure 3.15</b>	Comparaison entre le photocourant transitoire simulé et expérimental dans le sélénium amorphe dopé avec 0.2 at% d'arsenic à $T=263K$ .	<b>76</b>
<b>Figure 3.16</b>	Comparaison entre le photocourant transitoire simulé et expérimental dans le sélénium amorphe dopé avec 0.2 at% d'arsenic à $T=273K$ .	<b>77</b>
<b>Figure 3.17</b>	Comparaison entre le photocourant transitoire simulé et expérimental dans le sélénium amorphe dopé avec 0.2 at% d'arsenic à $T=283K$ .	<b>77</b>
<b>Figure 3.18</b>	Comparaison entre le photocourant transitoire simulé et expérimental dans le sélénium amorphe dopé avec 0.2 at% d'arsenic à $T=303K$ .	<b>78</b>
<b>Figure 3.19</b>	Comparaison entre le photocourant transitoire simulé et expérimental dans le sélénium amorphe dopé avec 0.5 at% d'arsenic à $T=253K$ .	<b>78</b>
<b>Figure 3.20</b>	Comparaison entre le photocourant transitoire simulé et expérimental dans le sélénium amorphe dopé avec 0.5 at% d'arsenic à $T=263K$ .	<b>79</b>

<b>Figure 3.21</b>	<i>Comparaison entre le photocourant transitoire simulé et expérimental dans le sélénium amorphe dopé avec 0.5at% d'arsenic à T=273K.</i>	<b>79</b>
<b>Figure 3.22</b>	<i>Comparaison entre le photocourant transitoire simulé et expérimental dans le sélénium amorphe dopé avec 0.5 at% d'arsenic à T=283K.</i>	<b>80</b>
<b>Figure 3.23</b>	<i>Comparaison entre le photocourant transitoire simulé et expérimental dans le sélénium amorphe dopé avec 0.5 at% d'arsenic à T=303K.</i>	<b>80</b>
<b>Figure 3.24</b>	<i>La densité d'état dans a-Se : à gauche selon Naito [94], à droite selon Koughia [93].</i>	<b>82</b>
<b>Figure 3.25</b>	<i>La densité d'états dans a-As<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> [95].</i>	<b>85</b>

# Liste des tableaux

---

<b>Tableaux</b>	<b>Titre</b>	<b>Page</b>
Tableau 3.1	<i>Les différents paramètres ajustés de notre modèle de densité d'états obtenus par la méthode des moindres carrés.</i>	<b>69</b>
Tableau 3.2	<i>La durée de vie simulée dans le sélénium amorphe stabilisé par la méthode des moindres carrés.</i>	<b>72</b>

# Table des matières

---

ملخص	i
Résumé	ii
Abstract	iii
Liste des abréviations	iv
Table des figures	vi
Liste des tableaux	x
Introduction générale	1
<b>Chapitre 1 : Propriétés des matériaux amorphes</b>	<b>5</b>
1-1 La structure atomique des solides amorphes	5
1-1-1 Définition d'un matériau cristallin	5
1-1-2 Définition d'un matériau amorphe	6
1-2 La structure de bandes dans les semi-conducteurs amorphes	7
1-2-1 Les modèles de bandes	7
1-2-2 Bref historique	9
1-3 Calcul de la densité d'états dans les semi-conducteurs amorphes	12
1-4 Méthodes expérimentales	12
1-4-1 La photoconductivité transitoire standard (TPC)	12
1-4-2 La photoconductivité du temps de vol (TOF)	14
1-5 Les mécanismes de transport des charges dans les amorphes	15
1-6 Cadre et intérêt de l'étude	20
1-6-1 Problématique scientifique	20
1-6-2 Situation historique du matériau	22
1-7 Conclusion	27
<b>Chapitre 2 : Simulation de la densité des états localisés dans les semi-conducteurs amorphes à partir du modèle de piégeage multiple</b>	<b>28</b>
2-1 Le modèle de piégeage multiple	29

2-1-1	Le cadre théorique	29
2-2	Revue de la littérature sur le calcul de la densité d'états dans la bande interdite des semi-conducteurs amorphes	31
2-3	Exposition de la méthode de la transformée de Laplace	33
2-3-1	Principe de la méthode	33
2-3-2	La méthode de la transformée de Laplace à haute résolution (HLT)	37
2-4	Validation de la méthode	39
2-4-1	Problèmes rencontrés	39
2-4-2	Modèles de densité d'états dans les semi-conducteurs amorphes	39
2-5	Résultats numériques et discussion	43
2-5-1	L'influence de l'ordre de la température caractéristique	43
2-5-2	L'influence de l'ordre de l'amplitude de la distribution gaussienne	45
2-5-3	L'influence de l'ordre de la largeur de la distribution gaussienne	46
2-5-4	L'influence des temps de prélèvement sur les distributions des états localisés calculées	48
2-5-5	L'influence de la durée de vie de recombinaison sur les distributions des états localisés calculées	50
2-6	Amélioration de la résolution en énergie par l'application de la méthode (HLT)	54
2-7	Comparaison avec d'autres méthodes	57
2-8	Conclusion	59
<b>Chapitre 3 : Application de la méthode de la transformée de Laplace dans la simulation de la structure de la queue de bande de valence dans le sélénium amorphe</b>		<b>60</b>
3-1	Simulation numérique de la densité d'états dans le sélénium amorphe pur	61
3-2	Simulation numérique de la densité d'états dans le sélénium amorphe dopé par l'arsenic	64
3-2-1	Procédure expérimentale	65

3-3	Modélisation de la densité des états dans le sélénium amorphe stabilisé	69
3-4	Simulation de la photoconductivité transitoire en configuration coplanaire dans le sélénium amorphe dopé avec l'arsenic	71
3-4-1	Estimation numérique de La durée de vie des trous	71
3-4-2	Comparaison des valeurs calculées et mesurées de la photoconductivité transitoire dans les échantillons étudiés	73
3-5	Discussion des résultats	81
3-6	Conclusion	87
	<b>Conclusion générale</b>	<b>88</b>
	<b>Bibliographie</b>	<b>91</b>

# Introduction générale

---

Le domaine des solides amorphes a attiré beaucoup d'intérêts et de recherches durant ces dernières décennies, tant sur le plan des concepts physiques que dans le domaine pratique. De larges possibilités d'application ont vu le jour, et plus particulièrement pour les semi-conducteurs amorphes où la notion de grandes surfaces associées à un faible coût de fabrication devient importante.

Les semi-conducteurs amorphes sont une classe des matériaux amorphes qui offrent de nombreuses possibilités d'applications. Pendant plusieurs années, les principales applications se sont situées dans le domaine de la xérogaphie et la photovoltaïque [1]. Ces dernières années, un intérêt croissant s'est développé dans le domaine des détecteurs digitaux des rayons X [2-3]. La mobilité et la durée de vie des porteurs de charge sont parmi les plus importantes caractéristiques électriques du photoconducteur. Toutefois, ces matériaux sont connus pour avoir une densité des états localisés qui peut mener à un transport dispersif [4].

Le problème de transport des charges en présence d'un spectre des états localisés a été largement discuté dans la littérature [5]. La densité et la position énergétique de ces états localisés sont d'un intérêt considérable, parce qu'ils ont un impact profond sur les propriétés de transport dans ces matériaux. Il est important de connaître et de comprendre la variation des propriétés électroniques de ces matériaux en terme de densité d'états afin de pouvoir les modéliser sous des conditions réelles d'utilisation. Dans ce cadre, une activité de recherche expérimentale très importante a été réalisée dans une tentative de généraliser la forme de cette fonction. Une des méthodes les plus couramment utilisées pour étudier le processus de transport des charges est la photoconductivité transitoire. Les paramètres importants tels que la mobilité et la durée de vie des porteurs de charges sont obtenus à partir de ces expériences.

Dès le début des années 1970, il a été connu que le transport des porteurs de charge dans les semi-conducteurs amorphes est caractérisé par un degré anormal de dispersion. Ceci se manifeste sous différentes formes, mais le plus souvent est associé avec la réponse de la photoconductivité transitoire après une excitation des porteurs de charge par un flash lumineux [6]. Initialement, l'attention a été focalisée sur les origines de base du phénomène, et

des efforts considérables ont été déployés pour comprendre et modéliser les mécanismes microscopiques, où un stimulant considérable a été fourni par le travail de Scher et Montroll [7]. Dans une variété de publications ultérieures, il était bien établi que le comportement était associé à l'interaction des porteurs de charge avec des états localisés possédant une large gamme de temps de libération. En particulier, pour Schmidlin [8] le critère principal de ce transport dispersif anormal est la présence d'un nombre important d'états avec des temps de libération comparables à la durée écoulée depuis la génération initiale des porteurs de charge. Un peu plus tard, il a été établi que le transport par piégeage multiple, impliquant des états localisés répartis sur une gamme d'énergie, est capable de reproduire cette dispersion anormale.

Après cette phase exploratoire, l'intérêt s'est tourné vers la possibilité que le phénomène de dispersion anormale, pourrait fournir un moyen pour la détermination des informations détaillées concernant les états localisés dans les semi-conducteurs amorphes. Pour le mécanisme de transport par piégeage multiple, sur lequel une attention a été concentrée, la décroissance du photocourant reflète la distribution énergétique des états localisés avec laquelle les porteurs de charge initialement libres interagissent. Compte tenu d'une technique d'interprétation fiable, il devrait être possible de déterminer non seulement la distribution énergétique, mais aussi plus en détail à l'égard les sections efficaces de capture, la concentration des pièges, etc. Malheureusement, la décroissance du photocourant transitoire est une fonction assez complexe de la distribution des états localisés, et bien que diverses techniques spectroscopiques ont été mis au point, ils ont tendance soit pour tenir compte de cette complexité ou d'impliquer des hypothèses et des approximations discutables [9].

D'autre part, l'étude de la photoconductivité transitoire dans les semi-conducteurs amorphes a évolué à partir des tentatives pour comprendre le transport dispersif anormal des porteurs de charge fréquemment observé dans ces matériaux [10]. L'utilisation des photocourants transitoires comme une source d'information sur la distribution de ces états électroniques localisés dans la bande interdite, qui déterminent les propriétés de transport anormales était un but de recherche pendant un certain temps. La caractérisation des propriétés de transport électriques des amorphes en utilisant des mesures du photocourant transitoire dans une géométrie coplanaire (TPC) a reçu beaucoup d'attention ces dernières années, où les résultats ont été expliqués sur un modèle de piégeage multiple, dans lequel les porteurs thermalisent dans une distribution d'états localisés [11].

L'approche simplifiée de l'énergie de thermalisation, décrite par Orenstein et Kastner [12] et Tiedje et Rose [13], permet d'obtenir une densité d'états approximative à partir du régime de non-extraction. Mais aussi des méthodes plus élaborées et plus précises, peuvent être utilisés parmi les techniques proposées, nous avons choisi de présenter la technique de la transformée de Laplace de la photoconductivité transitoire, sur laquelle se fonde le développement de notre simulation numérique de la densité des états localisés dans la bande interdite des semi-conducteurs amorphes. Nous montrons les deux avantages suivants par rapport aux autres méthodes. En premier lieu, la méthode peut être appliquée à des matériaux présentant un transport non dispersif ou dispersif. Deuxièmement, l'analyse de la méthode est valable dans les deux régimes avant et après la recombinaison de la photoconductivité transitoire, ce qui nous permet d'obtenir une large gamme de la distribution des états localisés.

A cette attention, nous envisageons de traiter via ce travail le calcul de la densité d'états dans le gap des semi-conducteurs amorphes à partir des simulations numériques de la photoconductivité transitoire, en incluant la photoconduction par le mécanisme de piégeage multiple. Nous traiterons particulièrement le calcul de la densité d'états dans le sélénium amorphe pur et dopé par l'arsenic. Ce travail est composé de trois chapitres, suite à une introduction, ce manuscrit s'organise en trois autres parties :

Le premier fournit le contexte théorique de la structure atomique et la structure de bandes indispensable pour une bonne compréhension des matériaux amorphes. Une étude bibliographique et historique des mécanismes de conduction dans les amorphes. Dans ce chapitre, on présente aussi un survol rapide sur le contexte expérimental portant sur les effets de la photoconductivité transitoire dans les semi-conducteurs amorphes, on se limitera aux méthodes les plus populaires dans la littérature contemporaine.

Le deuxième chapitre se divise en deux parties. La première fait l'objet du modèle de la technique de la photoconductivité transitoire qui est développé pour la détermination de la distribution de la densité des états dans les amorphes. Les principes théoriques de la technique de la photoconductivité transitoire standard (TPC) sont présentés, et une expression reliant la densité d'états aux quantités mesurables est dérivée. La deuxième partie présente la validité des approximations et l'applicabilité de l'expression finale à partir des simulations numériques du processus, et discute les résultats de la simulation numérique développés pour le calcul de la densité d'états dans les amorphes.

Dans le troisième chapitre, la simulation de la photoconductivité transitoire par la technique de Laplace développée pour étudier le transport des charges dans les semi-conducteurs amorphes, est appliquée pour le calcul de la densité des états dans la moitié inférieure du gap de mobilité du sélénium amorphe pur et dopé par l'arsenic. Finalement, des conclusions relatives à l'ensemble du travail réalisé et des pistes prometteuses pour les suites à y donner seront proposées.

# Chapitre 1

## Propriétés des matériaux amorphes

---

Afin d'avoir une certaine compréhension des propriétés électroniques et optiques des semi-conducteurs amorphes, une connaissance théorique de la structure de bandes d'énergie est nécessaire. Ceci peut être effectué en appliquant la mécanique quantique à un système amorphe. Toutefois, en raison de l'absence de la périodicité, ou plus précisément la perte de l'ordre à longue portée dans un matériau amorphe, les méthodes de la mécanique quantique qui prédisent de manière efficaces le comportement des semi-conducteurs cristallins deviennent mathématiquement trop complexes à appliquer dans ce système. En conséquence, le comportement d'un semi-conducteur amorphe ne peut pas être dérivé de la même manière que dans un matériau cristallin, mais est déterminé par l'étude de la structure de bandes d'énergie recouverte à partir d'observations obtenues à travers des expériences rigoureuses.

### **1-1 La structure atomique des solides amorphes**

#### *1-1-1 Définition d'un matériau cristallin*

Un solide se compose d'un réseau tridimensionnel d'atomes reliés ensemble par des liaisons. Ces dernières sont formées quand deux atomes ou plusieurs partagent leurs électrons de valence pour compléter la couche externe de chaque atome adjacent. On peut dire que les fonctions d'onde de ces électrons ne sont plus localisées dans un atome simple, mais sont maintenant étendues dans tout le solide.

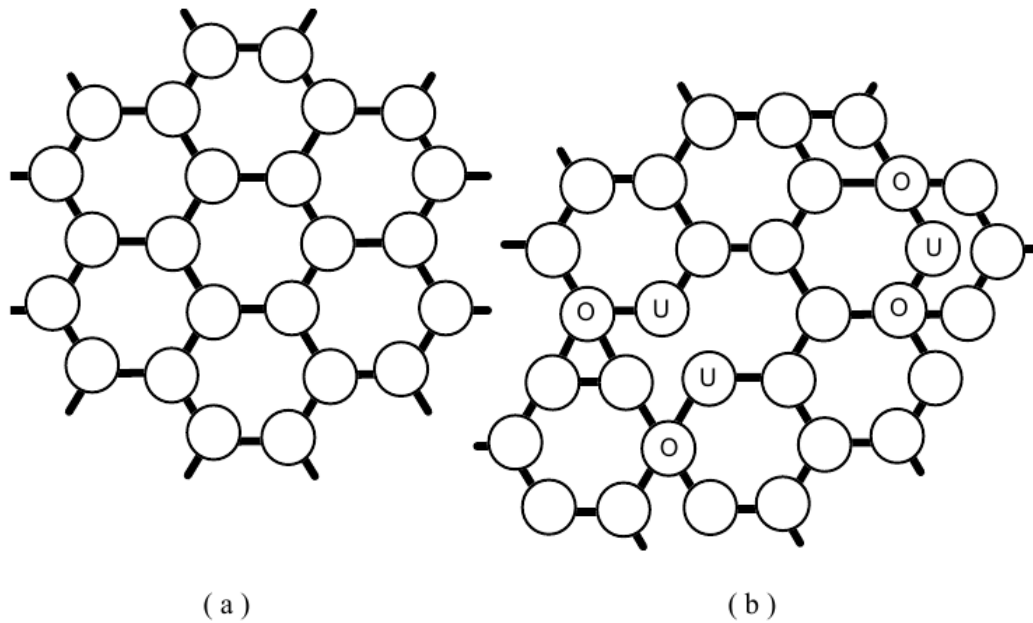
Les solides dans leur structure atomique sont classés dans deux groupes; *cristallin* et *amorphe*. Un cristal idéal est constitué par la répétition régulière, dans tout l'espace, d'atomes ou de groupes d'atomes. En d'autre terme les matériaux cristallins sont des solides, où les atomes sont arrangés dans un ordre périodique parfait dans tout le solide.

### **1-1-2 Définition d'un matériau amorphe**

Les matériaux amorphes, d'une autre part sont ceux où les atomes constitutifs perdent une telle périodicité, ce qui signifie simplement qu'il y a un ordre atomique à courte portée dans le réseau. La structure du réseau dans ces matériaux représente quelques déviations de l'arrangement périodique parfait qui sert à détruire la périodicité globale du solide.

La Figure.1.1 montre par une illustration bidimensionnelle, la différence structurale entre le matériau cristallin et le matériau amorphe. La structure cristalline schématisée par la Figure.1.1(a), où on peut voir que le nombre de coordination de chaque atome est le même, les longueurs et les angles des liaisons entre les atomes sont identiques dans tout le réseau. On peut dire qu'il y a un ordre à longue portée, tandis que dans les amorphes la coordination du plus proche voisin est maintenue, mais l'ordre à longue portée est perdu à cause de la distorsion au niveau des longueurs et des angles des liaisons. Cette distorsion fait que les atomes se disposent d'une manière où certaines liaisons chimiques ne peuvent plus être satisfaites. Il y'aura donc des liaisons brisées ou des liaisons pendantes dans la structure atomique. Ce qui détruit la répétabilité spatiale de la cellule unitaire.

Dans le cas cristallin, un défaut est simplement un atome qui est hors de sa position d'équilibre. Dans le cas amorphe, ceci ne peut pas être appliqué en raison de la nature aléatoire de la longueur et de l'angle de la liaison. Un défaut dans le matériau amorphe est donc n'importe quel atome avec un différent nombre de coordination. On peut voir sur la Figure.1.1(b) que chaque atome possède normalement trois liaisons, mais il y a des atomes sur coordonnés contenant quatre liaisons marqués en O, et des atomes sous coordonnés avec deux liaisons par rapport au nombre de liaisons entre les atomes adjacents repérés par U.



**Figure 1.1:** Représentation bidimensionnelle de la structure atomique d'un (a) solide cristallin et (b) solide amorphe: les atomes marqués en «O» et "U" représentent respectivement les atomes sur et sous coordonnés par rapport au nombre habituel de liaisons entre les atomes adjacents.

## 1-2 La structure de bandes dans les semi-conducteurs amorphes

### 1-2-1 Les modèles de bandes

Afin d'établir les concepts de base permettant de comprendre les propriétés électroniques et optiques des matériaux amorphes, il est opportun de revenir sur quelques aspects généraux de la structure électronique de la matière.

Considérons un atome isolé, sa structure électronique est régie par le principe de Pauli postulant que les électrons ne peuvent occuper que certains niveaux d'énergie. Les états électroniques sont prédits dans le cadre d'une théorie quantique considérant les interactions électrostatiques et magnétiques entre les électrons et le noyau atomique d'une part, entre les électrons eux-mêmes, d'autre part. L'énergie totale d'un atome est ainsi déterminée par la distribution des électrons sur différentes couches et orbitales et la configuration fondamentale, d'énergie minimale, correspond à un arrangement pour lequel les électrons les plus liés au noyau occupent les couches électroniques de cœur, laissant partiellement remplie une couche dite de valence, occupée par des électrons relativement moins liés. Lorsque des atomes interagissent pour former des molécules, les électrons de valence de tous les atomes se

répartissent sur de nouvelles orbitales dites moléculaires. Les orbitales «liantes» et «anti-liantes» correspondent à des énergies moléculaires respectivement minimales et maximales.

Dans un système avec un seul atome, l'énergie de l'électron est quantifiée dans des niveaux ou états discrets. Quand plusieurs atomes sont réunis ensemble pour former un solide, les niveaux d'énergie occupés par les électrons des couches forment des bandes et sont de la forme  $E(k)$  qui donnent des bandes dans l'espace réciproque  $k$ ; les différents états énergétiques d'électrons produisent des bandes presque continues des états d'énergie permis. Dans les solides cristallins, la périodicité du réseau atomique mène aux simplifications mathématiques dans la résolution de l'équation de Schrödinger. L'analyse de l'arrangement des liaisons entre les atomes du matériau cristallin basée sur la mécanique quantique a permis de dériver un cadre théorique connu en physique sous le nom de la théorie des bandes.

Les modèles de bandes sont utilisés généralement pour expliquer les propriétés électroniques et optiques des semi-conducteurs. Dans le cadre de cette théorie, ces états de bande forment la densité d'états,  $g(E)$ , qui est souvent utilisée pour expliquer les propriétés d'un matériau. Elle définit le nombre d'états par unité d'énergie par volume unitaire. La Figure.1.2(a) montre la densité d'états dans les semi-conducteurs cristallins, où on peut voir deux bandes d'énergie permises, une bande de valence avec un niveau supérieur  $E_V$ , et une bande de conduction avec un niveau inférieur  $E_C$ , séparées par un espace connu sous le nom de la bande interdite, ou le gap mot anglais couramment utilisé pour désigner cet intervalle, dans lequel les niveaux d'énergie correspondent à des états inaccessibles aux électrons.  $E_F$  est le niveau de Fermi.

La structure périodique des matériaux cristallins a mené aux simplifications mathématiques; comme le théorème de Bloch. Les fonctions d'onde de Bloch s'étendent partout dans les bandes permises du réseau infini décrivant les états étendus. Un développement quantitatif de la structure électronique des matériaux amorphes est beaucoup plus difficile en raison de l'absence de n'importe quel ordre topologique à longue portée. En fait, la structure désordonnée des semi-conducteurs amorphes a mené beaucoup à croire que le diagramme de bandes des amorphes, était énormément différent du diagramme de bandes des matériaux cristallins.

### 1-2-2 *Bref historique*

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

Historiquement, l'étude des amorphes a été longue et laborieuse et ce n'est qu'à partir de 1950, quand Kolomites et ces collaborateurs [14] ont rapporté le comportement semi-conducteur dans divers verres de chalcogénures, et déclenché un grand intérêt pour les semi-conducteurs amorphes [15]. Cette découverte a conduit immédiatement à penser que la densité d'états des semi-conducteurs amorphes est similaire à son homologue cristallin et non complètement différente, comme on le pensait initialement. Alors, l'ordre à courte portée dans la structure atomique est suffisant pour que la théorie de bandes puisse être adoptée. Ceci peut être illustré sur la Figure.1.2 qui montre les trois modèles de la densité d'états les plus populaires. La différence importante entre les semi-conducteurs cristallins et amorphes est l'existence des états localisés dans le gap. Les électrons dans les états localisés ne sont pas libres de se déplacer partout dans le matériau. Certains de ces états localisés sont créés par les défauts, les majorités d'entre eux sont créés par la perte de l'ordre à longue distance qui est unique aux solides amorphes.

En l'absence de l'ordre à longue portée dans les semi-conducteurs amorphes, la structure de bandes est globalement conservée [16]. Le premier modèle a été proposé par N. F. Mott [17]. Mott [17] a démontré que les bords pointus des bandes dans le modèle cristallin sont dus à l'ordre à longue distance dans le matériau. Puisque les semi-conducteurs amorphes ont seulement l'ordre à courte portée, au lieu des bords pointus de bandes dans les matériaux cristallins, les matériaux amorphes auraient des bandes avec des queues d'états localisés qui entrerait dans la bande interdite. Ceci est illustré sur la Figure.1.2(b). Les queues commencent aux bords de la bande de valence et de conduction et traînent dans la bande interdite.

Mott [17] a également soutenu que le passage de la queue d'états localisés aux états étendus des bandes, correspond à une forte augmentation de la mobilité. Les électrons dans la queue d'états localisés se déplacent avec une mobilité contrôlée par effet tunnel activé thermiquement entre les états, tandis que les électrons dans les états étendus se déplacent avec une mobilité déterminée par la masse effective de l'électron dans le solide cristallin. La

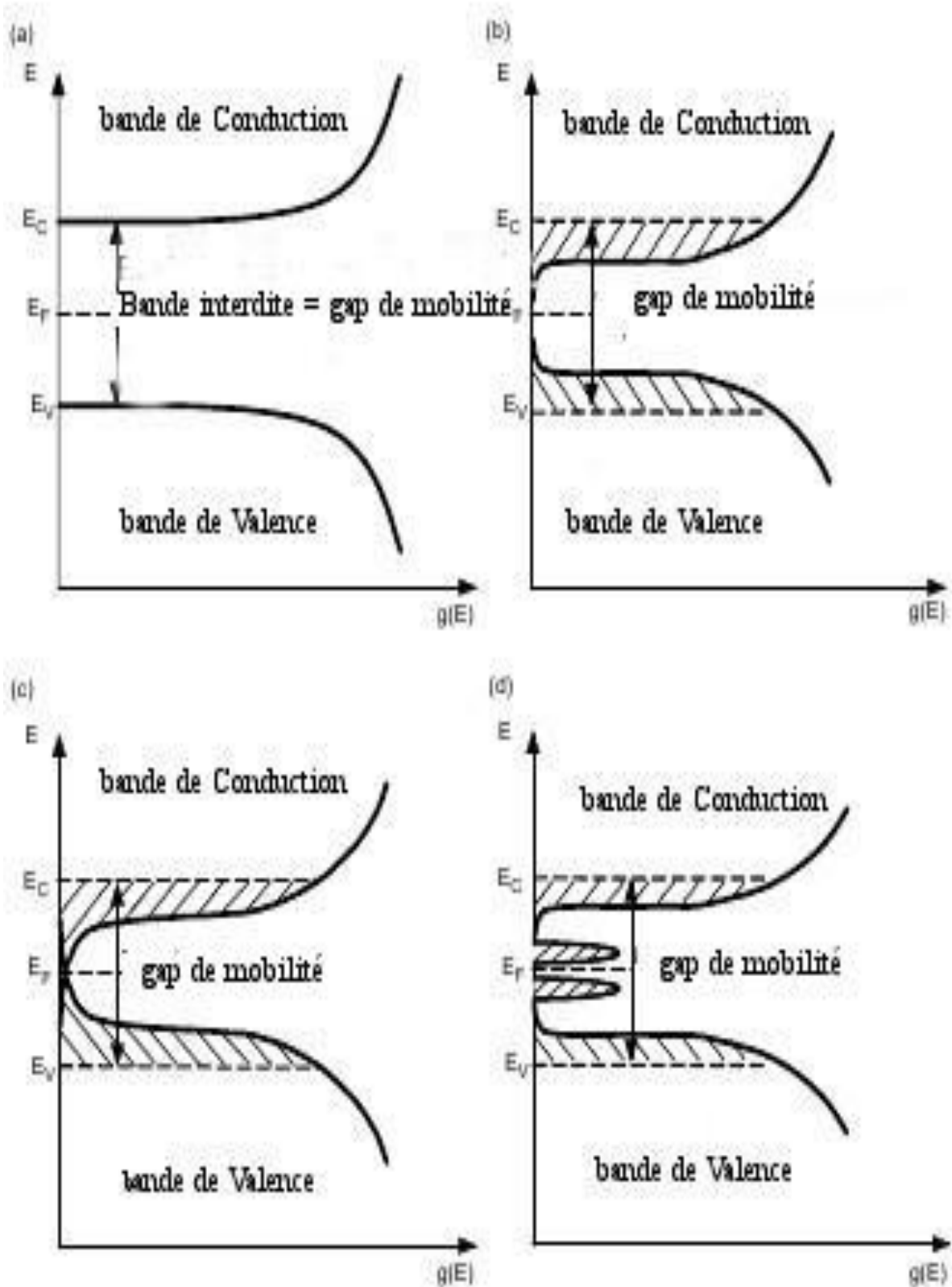
transition dans la mobilité conduit à la notion d'un gap de mobilité dans les semi-conducteurs amorphes, assez semblable à la bande interdite pour les semi-conducteurs cristallins.

Le modèle suivant a été mis par Cohen, Fritzsche, et Ovshinsky [18], qui ont élargi le modèle original de Mott [17]. Leur modèle, connu sous le nom de CFO, est représenté sur la Figure.1.2(c). Ils ont fait valoir que les semi-conducteurs amorphes étaient plus désordonnés que Mott [14] a proposé. Ainsi, de ce fait, les états localisés des queues s'étendent plus profond dans le gap de mobilité et se chevauchent autour du niveau de Fermi.

Le modèle de CFO [18] a également considéré que, les atomes dans un matériau amorphe étaient moins retenue que ceux de l'état cristallin, et qu'ils devraient normalement être en mesure de répondre à leurs exigences de valence, c'est-à-dire chaque atome serait en mesure d'avoir le bon nombre de liaisons. Ce qui empêcherait des structures pointus de la densité des états localisés dans le gap de mobilité.

La structure des semi-conducteurs amorphes contient également des impuretés; des atomes avec des coordinations qui diffèrent de la structure de la liaison normale du réseau. Cela provoque des défauts ponctuels bien définis tels que les liaisons pendantes, extrémités de la chaîne, vacances, impuretés de substitution. Alors, il y aura des d'états localisés additionnelles dans le gap de mobilité que le modèle de CFO [18] ne tient pas compte. Un autre modèle, établi par Marshal et Owen [19], propose que ces défauts de structure causent une grande densité d'états au milieu du gap autour du niveau de Fermi.

Le désordre qui caractérise les semi-conducteurs amorphes entraîne l'apparition des états énergétiques localisés avec une distribution le long du gap de mobilité. Au niveau des liaisons, représenté par des déviations dans les longueurs et les angles, le désordre localise les électrons et les trous et cause une forte dispersion de ces derniers. Ceci élargit la distribution électronique par la création des états dans le gap de mobilité sous forme des queues de bandes. De même, les défauts de la structure tels que les liaisons pendantes font apparaître des états énergétiques additionnels dans le gap de mobilité. Ce modèle est représenté sur la Figure.1.2(d).



**Figure 1.2:** (a) La densité d'états dans un semi-conducteur cristallin, (b), (c), (d) les modèles de densité d'états dans les amorphes proposés respectivement par Mott, CFO, Marshall et Owen. Les zones hachurées représentent les états localisés. Noter que l'axe des abscisses dans les quatre Figures est logarithmique.

### 1-3 Calcul de la densité d'états dans les semi-conducteurs amorphes

L'une des forces majeures de la recherche sur les semi-conducteurs amorphes est que ces matériaux peuvent être fabriqués économiquement dans des dispositifs de grande surfaces telles que les écrans, les scanners, les cellules solaires. La compréhension de la conduction électronique dans ces matériaux est donc importante pour la bonne utilisation de ces matériaux dans les applications commerciales.

La présence des états localisés dans ces matériaux joue un rôle dominant dans les processus de conduction, et une connaissance approfondie de leurs caractéristiques est par conséquent souhaitable. En raison de la complexité mathématique du traitement des structures non périodiques, les mesures expérimentales sont nécessaires pour la caractérisation de ces matériaux. Les résultats de ces expériences peuvent être utilisés dans l'étude de la nature du transport dans ces matériaux.

Il est bien établi dans la littérature que les mesures de la photoconductivité transitoire ont réussi à identifier la nature du transport de charge dans les semi-conducteurs amorphes. Dans les expériences de la photoconductivité transitoire, un semi-conducteur est excité avec une lumière pulsé, une réponse du photocourant transitoire  $I(t)$  sera mesurée. Quand les paires électrons-trous sont générées, ils produisent une conductivité qui est proportionnelle au produit de leur densité et mobilité [20].

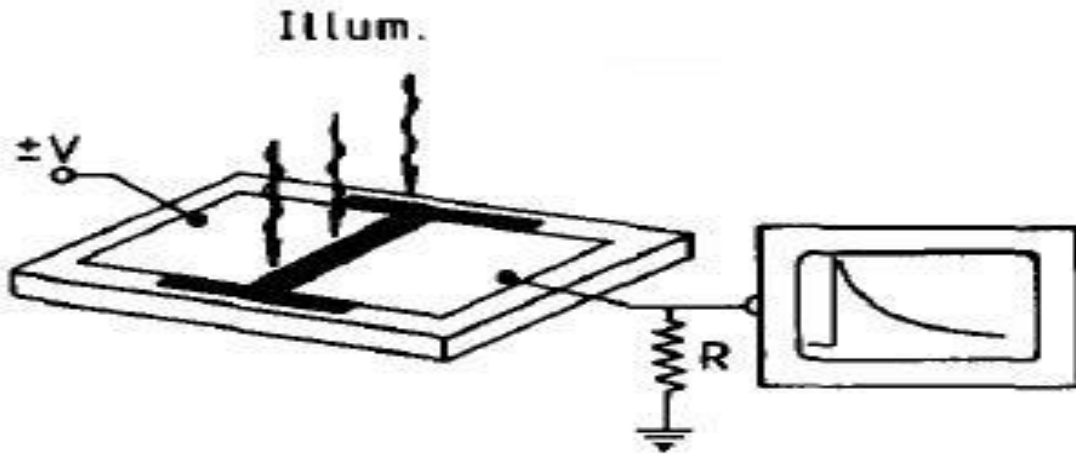
### 1-4 Méthodes expérimentales

Il existe deux types de configuration de l'échantillon dans les mesures de la photoconductivité transitoire, la configuration coplanaire, et l'expérience est référée pour nous la photoconductivité transitoire standard (TPC). L'alternative consiste à utiliser une configuration en sandwich, on parle dans ce cas de l'expérience du temps de vol (TOF), cette dernière est une excellente méthode pour étudier le déplacement des porteurs de charge dans les semi-conducteurs résistifs [21].

#### 1-4-1 La photoconductivité transitoire standard (TPC)

Dans l'expérience de la photoconductivité transitoire standard (TPC) schématisée sur la Figure.1.3, les porteurs libres sont excités à  $t=0$  par une impulsion lumineuse courte dans la bande de transport. Sous l'effet d'un champ électrique, les porteurs de charge se déplacent dans le matériau jusqu'à leurs disparition, mais avant que cela se produit, ils ont été

immobilisés plusieurs fois par les différents pièges qui sont présent dans la bande interdite du matériau. Etant donné qu'au début de l'expérience les distributions de charges sont en équilibre thermique, les sites de piégeages des électrons situés au-dessus du niveau de Fermi et les sites de piégeages des trous en dessous de  $E_F$  sont à la fois vides, de sorte que ces nouveaux porteurs de charge créés ne sont plus exclus de ces sites de piégeages [22].



**Figure 1.3:** La photoconductivité transitoire standard (TPC) [15].

L'émission à partir d'un piège est un processus activé thermiquement en fonction de la profondeur du piège, les pièges profonds immobilisent les porteurs de charge pendant un long temps ce qui conduit à des valeurs faibles du courant transitoire. Comme les états peu profonds libèrent plus rapidement les porteurs de charge, et le piégeage de ces derniers dans les états plus profonds conduira à l'augmentation de l'occupation de ces pièges et une réduction supplémentaire au niveau du courant [23]. La perte des charges par recombinaison est assurée par une configuration coplanaire souvent utilisée, et des expressions reliant le courant transitoire et la distribution des états localisés peuvent être dérivées, mais ils sont difficiles à inverser dans le cas général. Tant que la recombinaison peut être négligée, une estimation du premier ordre de la densité d'états  $g(E)$  peut être utilisée comme le montre la relation suivante [24]:

$$g(E) \propto [I(t)t]^{-1}. \quad (1.1)$$

### 1-4-2 La photoconductivité transitoire du temps de vol (TOF)

L'expérience du temps de vol (TOF) conçu à l'origine pour déterminer la mobilité de déplacement des porteurs libres dans les matériaux à haute mobilité, a démontré un grand succès de son adaptation pour les matériaux à faible mobilité, tels que les semi-conducteurs amorphes [25]. Elle est souvent employée dans la mesure de la mobilité de déplacement, mais elle représente aussi une technique alternative de la photoconductivité transitoire standard (TPC), qui permet d'étudier la distribution des états localisés. Dans la technique de la photoconductivité transitoire standard (TPC) les porteurs majoritaires domineront le photocourant, en opposition l'expérience du temps de vol (TOF) permet de mesurer indépendamment le courant des porteurs de charge minoritaires et majoritaires, qui conduit à examiner la répartition énergétique des états localisés du côté de la bande de valence et de conduction séparément.

Pour les mesures du temps de vol (TOF), l'échantillon est dans une configuration sandwich entre deux électrodes qui bloquent l'injection des porteurs de charge dans le matériau. L'un des électrodes est semi transparent pour assurer la photoexcitation des porteurs libres juste au-delà du contact éclairé. En fonction de la polarisation du champ électrique appliqué, soit les électrons ou les trous vont se déplacer à travers l'échantillon, et on collectera un courant d'un seul type de porteurs de charge. Les éléments essentiels d'un circuit de (TOF) apparaissent sur la Figure.1.4 [26].

Dans un matériau avec une large distribution des états localisés dans la bande interdite généralement le cas des semi-conducteurs amorphes, le déplacement de l'ensemble des porteurs de charge s'étend sur toute la longueur de l'échantillon, et un temps de transit représentatif peut être discerné comme un changement de la pente dans une représentation double logarithmique du courant en fonction du temps. Ce courant aura les caractéristiques de la photoconductivité transitoire standard (TPC) décrite dans la section précédente, et des informations sur la distribution des états dans la bande interdite peuvent être extraites de la même manière. Une analyse du courant permet d'obtenir une image de la densité d'états à partir de la relation [27]:

$$g(E) \propto [I(t)t] \quad (1.2)$$

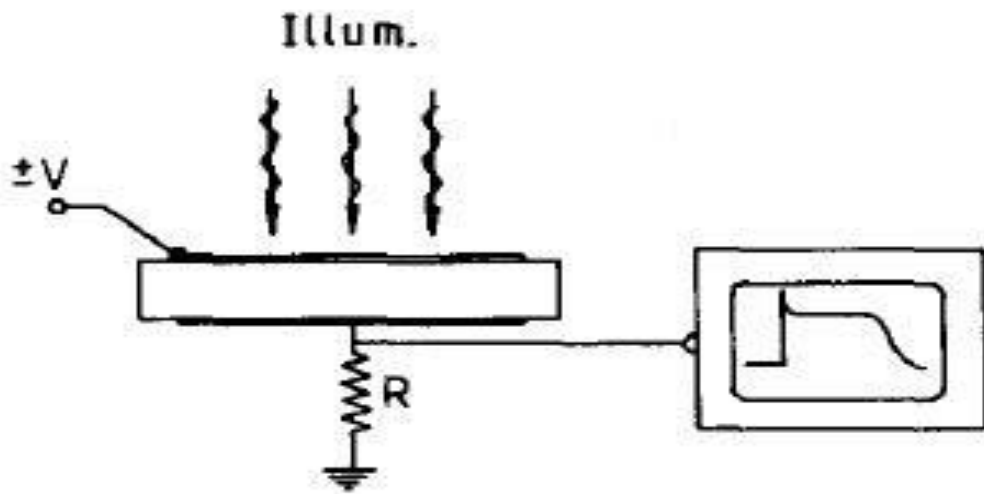


Figure 1.4: Les éléments essentiels d'un circuit du temps de vol (TOF) [15].

## 1-5 Les mécanismes de transport des charges dans les amorphes

Le déplacement des charges à travers un matériau amorphe joue un rôle essentiel dans un grand nombre d'appareillage électronique ou d'imagerie, et une compréhension approfondie de la dynamique des charges peut fournir des informations sur les propriétés et les paramètres de ces matériaux tels que la mobilité, la structure de bande. Ce problème est une question intéressante sur le plan technologique. Des travaux expérimentaux et théoriques ont été développés dans l'attente de la mise au point d'un cadre descriptif de ces matériaux.

Traditionnellement, le transport des charges dans les semi-conducteurs amorphes comme le montre la Figure.1.5 a été étudié par la technique du temps de vol pour obtenir leurs mobilités d'entraînement. Un programme exhaustif en utilisant cette technique a été réalisé par Pfister [21] qui a étudié  $a\text{-As}_2\text{Se}_3$ , le sélénium amorphe ( $a\text{-Se}$ ), et d'autres matériaux en détail. Les courants transitoires observés  $I(t)$  s'avèrent décroissante d'une façon monotone. Cette observation est commune dans les semi-conducteurs amorphes, la décroissance du photocourant n'a rien à voir avec la collection des porteurs de charge au niveau des électrodes. Le photocourant mesuré par cette technique est donné par la formule suivante :

$$I(t) = n(t)q\mu_0 F \quad (1.3)$$

où  $n(t)$  est le nombre des porteurs de charge mobiles à chaque instant  $t$ ,  $\mu_0$  est la mobilité dans les états de conduction et  $F$  le champ électrique appliqué. Sharfe [28] a montré que la représentation de  $\log_{10} I(t)$  en fonction de  $\log_{10}(t)$ , comme le montre la Figure.1.6, les données appartiennent à deux droites de pente négative avec une intersection au point  $\tau_m$ . Le comportement du courant mesuré est décrit par la relation ci-dessous:

$$I(t) \begin{cases} t^{-(1-\alpha)} & t \leq \tau_m \\ t^{-(1+\alpha)} & t \geq \tau_m \end{cases} \quad (1.4)$$

dont  $\alpha$  est le paramètre de dispersion. Il est conventionnel de remplacer  $n(t)\mu_0$  par  $n(0)\mu_D(t)$  et se référer à une mobilité dépendante du temps, dont le mouvement des porteurs de charge est dispersif.

Des attentions considérables ont été soulignées pour comprendre les relations actuelles. La réussite de cette méthode dans l'étude des matériaux à faible conductivité a stimulé l'étude théorique du problème. L'accent a été mis sur la description d'une théorie derrière ces expériences [20]. En 1975, une avancée majeure dans l'étude des problèmes du transport dispersif des charges dans les solides amorphes, était atteinte avec la publication du premier modèle détaillé capable de prédire les lois du photocouant, présentes dans la technique du temps de vol (TOF).

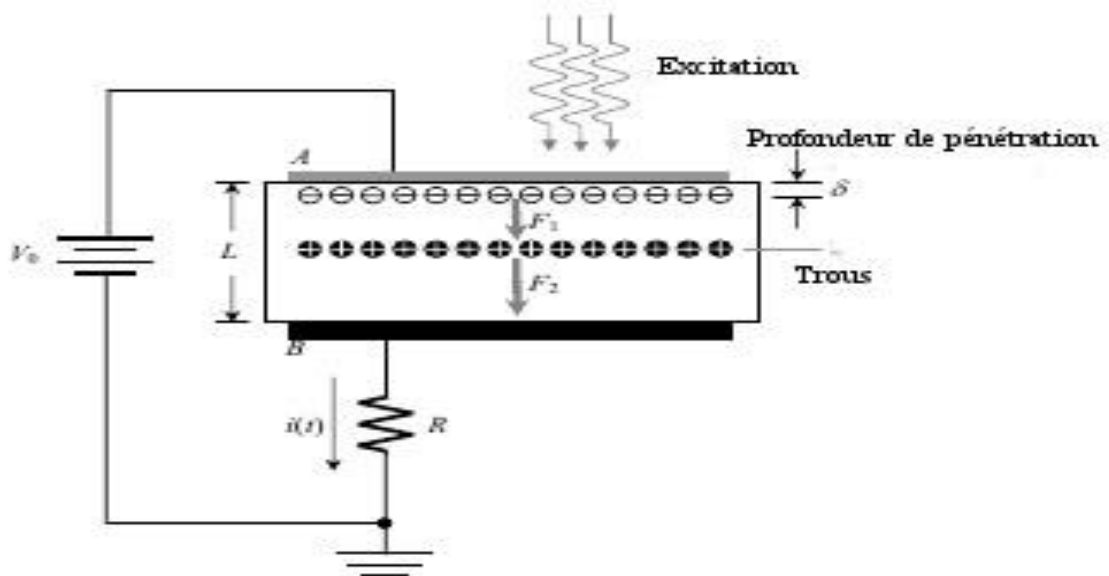
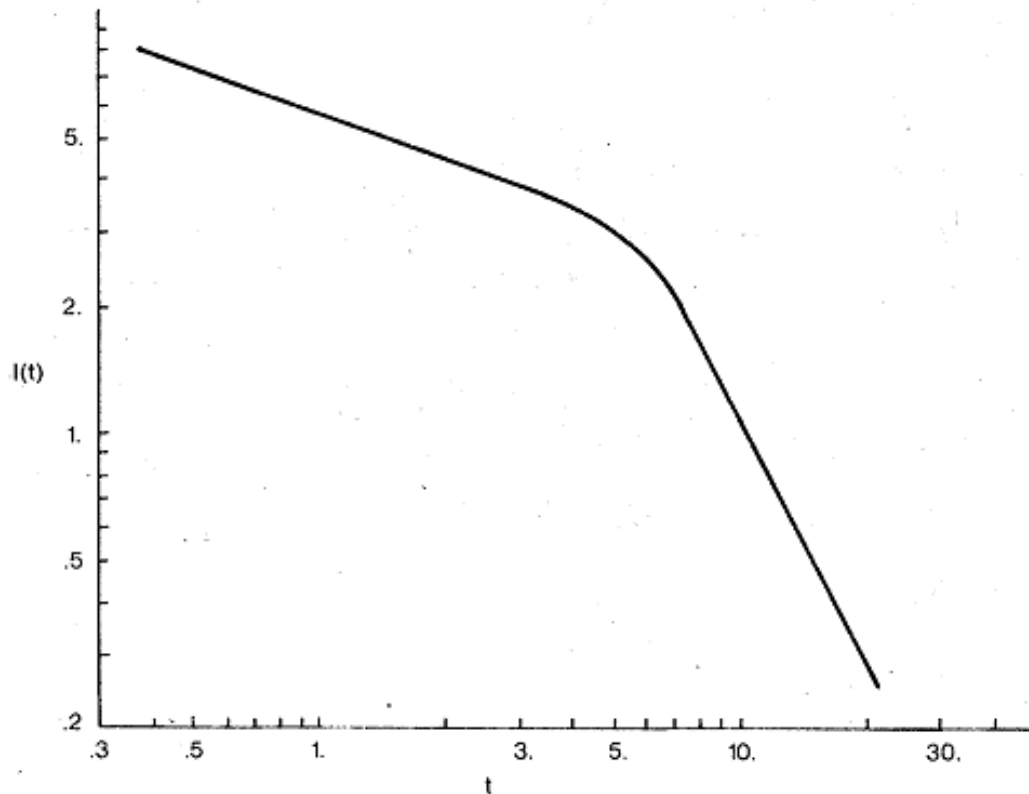


Figure 1.5 : Le transport des charges dans la technique du temps de vol TOF.



**Figure 1.6:** Le courant transitoire dans un photoconducteur amorphe [28].

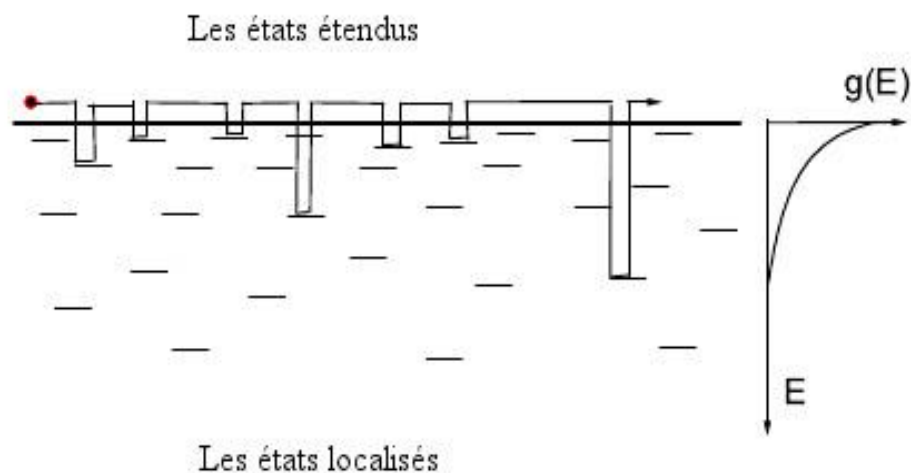
Scher et Montroll [7] ont développé un modèle de transport basé sur le saut entre les états localisés. L'analyse des caractéristiques du transport prévus par ce processus s'est avéré être un problème théorique complexe, et à ce jour, aucune solution exacte a été achevée. Tous les traitements existant impliquent l'introduction d'hypothèses simplificatrices, et la validité de ces dernières a été une source constante de controverse [15].

Autour des années 1977, comme il a été décrit par Marshall [15], il est devenu clair que de nombreuses particularités du transport de charge dans les amorphes peuvent être décrites dans un cadre totalement différent du point de vue physique: la théorie de transport par le mécanisme de piégeage multiple. Tout cela a été nécessaire pour réaliser certains aspects des observations expérimentales, était de supposer que les états localisés dans le gap de mobilité du semi-conducteur amorphe sont répartis sur une gamme suffisante d'énergie. En 1977, Noolandi a étudié analytiquement le problème du transport par le mécanisme de piégeage multiple [29]. L'équation principale, dérivé dans ce travail est identique dans sa forme à une équation correspondante obtenu par Scher et Montroll [7]. Ceci suggère l'équivalence entre le formalisme de piégeage multiple [29] et l'approche de saut mise par Scher et Montroll [7].

Une étape historique, a montré que le modèle de piégeage multiple pourrait être utilisé pour analyser le photocourant dispersif. Certains résultats de l'analyse théorique des phénomènes transitoires du photocourant dans le sélénium amorphe ont été reportés plus tard. Un des résultats les plus intéressants découlant de cette analyse, est l'équivalence entre la théorie de Scher et Montroll [7] et la théorie du piégeage multiple [29], vérifiée ultérieurement par les travaux de Noolandi [29] et Schmidlin [8].

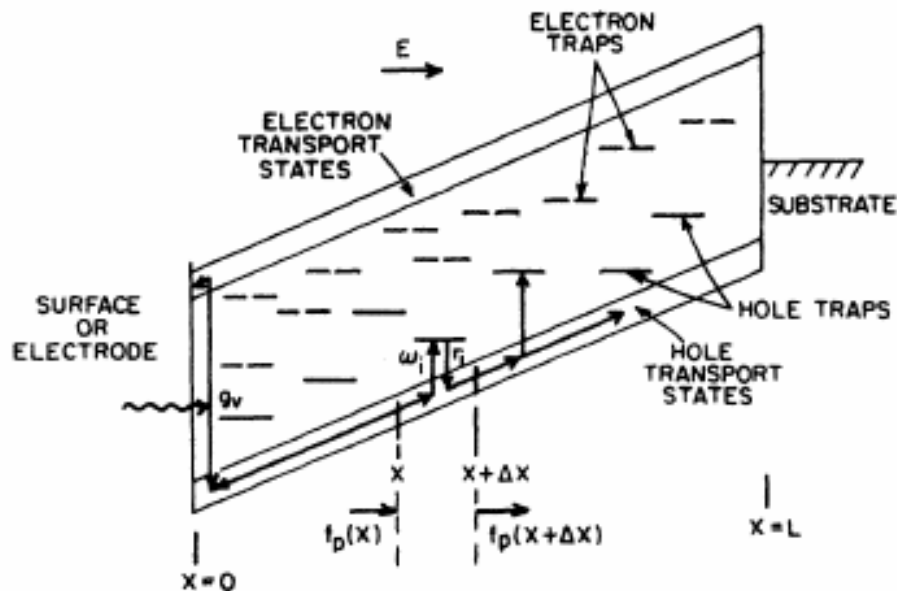
Comme il a été discuté par Noolandi [29], le transport dispersif peut provenir de plusieurs mécanismes dont l'un est contrôlé par la capture dans les pièges répartis dans la bande interdite, ce mécanisme nommé piégeage multiple a été développé pour expliquer le transport dispersif observé au cours des expériences du temps de vol. Le modèle de transport contrôlé par le piégeage, dont lequel les événements de capture et de libération sont traités explicitement a prouvé sa force de prédire la dispersion analysée par la théorie de Scher et Montroll [7]. Le modèle est défini par un ensemble d'équations différentielles, dans laquelle chaque type de piège est caractérisé par une probabilité de capture  $\omega_i$  et une probabilité de réémission  $\gamma_i$ .

Le mécanisme de transport par piégeage multiple peut être illustré sur la Figure.1.7. Elle montre le parcours de l'électron dans les états étendus. L'électron est capturé et libéré plusieurs fois par les états pièges du gap avant qu'il ne se recombine. Le transport des charges s'effectue dans la bande des états étendus sous la présence d'un champ électrique [30].



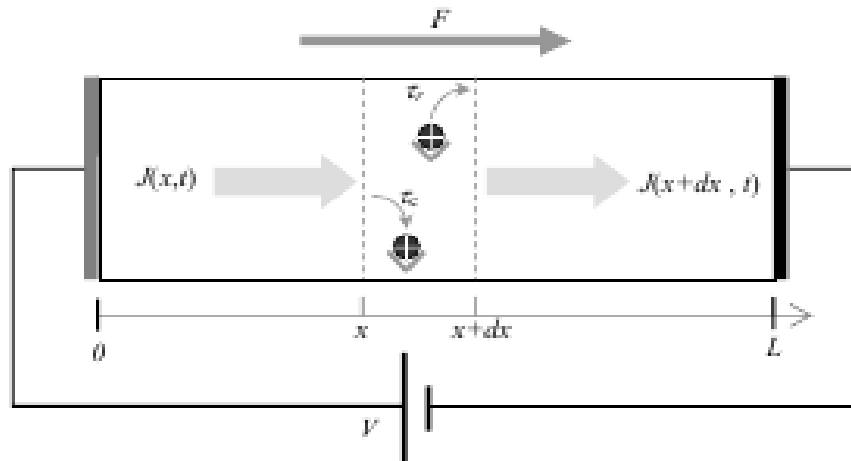
**Figure 1.7:** Schématisation du mécanisme de conduction par piégeage multiple [30].

Le terme piège est utilisé pour chaque état localisé qui immobilise un porteur de charge pour un temps déterminé. L'expression de l'état de transport est utilisée pour tout état fondamental qui détermine la mobilité microscopique du porteur de charge. Autrement dit, les pièges sont des états suffisamment isolés les uns des autres dans l'espace de sorte que les transitions entre eux sont négligeable. D'autre part, les états de transport, sont suffisamment reliés spatialement pour maintenir le concept d'une vitesse de déplacement continue ( $\mu_0 F$ , où  $F$  est le champ local). La mobilité est déterminée par les transitions entre les états de transport uniquement, alors que les probabilités ( $\omega_i, \gamma_i$ ) sont déterminées à partir des transitions entre les états de transport et les pièges [8]. Les idées précédentes sont illustrées sur la Figure.1.8.



**Figure 1.8:** Schématisation des états de transport et les pièges dans un semi-conducteur amorphe [8].

Les états localisés agissent comme des centres de piégeages qui éliminent les porteurs de charge des états de conduction, soit temporairement par les pièges peu profonds ou en permanence par les pièges profonds. L'effet de ces pièges résulte dans l'apparition des faibles mobilités des porteurs de charge. La Figure.1.9 montre le chemin possible d'un trou généré à la surface éclairé à  $X=0$ . Après la génération, le trou se déplace vers le substrat à  $X=L$  sous l'influence d'une force électrostatique  $q F$ , où  $q$  est la charge fondamentale. En un point  $x$ , le trou peut être capturé et libéré d'un piège approprié.



**Figure 1.9:** Le flux du courant et les processus de piégeage et de libération dans un semi-conducteur avec un seul niveau de piégeage.

## 1-6 Cadre et intérêt de l'étude

### 1-6-1 Problématique scientifique

La photoconductivité transitoire est une des propriétés les plus étudiées des semi-conducteurs amorphes. L'absorption de la lumière augmente la concentration des porteurs libres, dont la durée de vie est finalement limitée par la recombinaison. À l'exception des semi-conducteurs monocristallins purs, une densité considérable des états localisés dans la bande interdite est connue pour exister. Ces états de défauts sont généralement des centres de recombinaison les plus efficaces, qui déterminent les propriétés de transport et la photoconductivité. Par conséquent, de nombreux articles dans la littérature ont étudié la photoconductivité transitoire et sa dépendance de la densité des défauts, avec l'objectifs de dériver les paramètres de ces derniers.

Trouver une méthode pour extraire la densité des états localisés dans la bande interdite des semi-conducteurs amorphes à partir des photocourants transitoires a été un objectif de recherche pendant un certain temps [31-32]. La distribution continue des états localisés résulte de l'interaction simultanée des porteurs libres avec une série d'états localisés, avec des dynamiques assez compliquées de piégeages et de recombinaisons. Pour étudier cette dynamique un certain nombre de méthodes peuvent être utilisées. La Photoconductivité du temps de vol (TOF) et la photoconductivité transitoire standard (TPC) mesurent le transport de charges dans ces matériaux [13]. Le modèle de piégeage multiple donne une explication

raisonnable de nombreuses données expérimentales, en fournissant un lien entre la mesure et la dynamique de piégeage.

À partir du modèle de piégeage multiple, les informations sur la densité d'états sont codées dans les photocourants transitoires liés aux porteurs libres ou localisés [33]; toutefois, l'extraction de cette information a été une tâche formidable à notre avis. Des tentatives de relier la pente de la dépendance en loi de puissance du photocourant en fonction du temps, fréquemment observée dans les expériences de la photoconductivité transitoire à une distribution spécifique ont échoué. En effet, il a été montré que des pentes similaires pourraient être obtenues pour différentes formes de distribution, avec des simulations des équations du modèle de piégeage multiple [34].

Un peu plus tard, des méthodes plus pratiques ont été introduites, la méthode analytique de la transformée de Fourier et de Laplace de la photoconductivité transitoire (TPC). L'application de ces méthodes recouvre généralement la densité des états localisés, qui peut être de forme arbitraire, sans hypothèses préalables concernant sa forme [35-36]. Le but de ce travail est d'analyser de façon critique notre aptitude à extraire la distribution de la densité d'états, à partir des simulations numériques de la photoconductivité transitoire standard.

Ce travail examine, en deux parties, le développement d'une technique pour extraire la distribution énergétique des états localisés dans les semi-conducteurs amorphes à partir de leur photoréponse transitoire, dans un contexte de piégeage multiple. Dans la première partie, il s'agit du développement d'une méthode spectroscopique d'inversion de la photoconductivité transitoire (TPC) dans la gamme fréquentiel, en vue d'extraire la densité d'états. La technique dérivée du modèle de piégeage multiple, est basée sur le calcul préliminaire de la fonction de la densité d'états à partir de la résolution du système de continuité par la transformée de Laplace des données  $I(t)$ . Dans la deuxième partie, le modèle de simulation développé dans cette étude, examine la possibilité de générer un photocourant transitoire pour la détermination de la densité des états localisés dans les semi-conducteurs amorphes. L'application de cette spectroscopie transitoire à des données expérimentales de (TPC) qui feront l'objet du troisième chapitre, où notre choix est tombé sur le sélénium amorphe pur a-Se (la forme non-cristalline du sélénium) et dopé par l'arsenic. Le choix de ce matériau est justifié dans les paragraphes ultérieurs.

### 1-6-2 Situation historique du matériau

Bien que le sélénium amorphe (a-Se) depuis quatre décennies ait été utilisé comme un premier système dans la discussion du modèle U négatif des défauts de coordinations chargées dans les verres de chalcogénures [37], relativement peu de travaux ont été entrepris dans cette période pour caractériser sa densité d'états électronique expérimentalement.

La distribution de la densité d'états dans le gap de mobilité du sélénium amorphe reste un sujet de controverse. Il est généralement convenu que cette distribution dans la moitié supérieure du gap près du bord de la bande de conduction  $E_C$  n'est pas monotone, mais elle contient des pics à certains niveaux d'énergie. La position exacte de ces pics demeure objet de nombreux débats. D'une autre part, la distribution de la densité d'états dans la moitié inférieure du gap de mobilité près du bord de la bande de valence  $E_V$ , s'est avéré être encore plus controversé.

Le sélénium amorphe (a-Se) était un matériau de choix pendant les premières années de la xérographie, un modèle standard de la densité d'états a été utilisé. Il est composé comme le montre la Figure.1.10 des pièges profonds d'électrons et de trous autour du milieu du gap, et des pièges peu profonds pour les électrons et les trous près des bords de bandes [38-39]. La distribution de la densité d'états dans le gap de (a-Se) ne s'est pas améliorée de manière significative depuis la fin des années 1980 et reste encore un sujet de controverse, bien qu'un nombre important de travaux aient été publiés dans ce domaine.

Un intérêt croissant s'est développé sur l'utilisation du sélénium amorphe dans la conversion directe d'imagerie à rayons X [40]. Cet intérêt a renouvelé l'attention sur les propriétés électroniques du matériau, le piégeage des porteurs de charge dans les états de défauts dans la bande interdite est la préoccupation principale. Pour localiser les positions énergétiques de ces défauts dans le gap, les différents aspects de mesure du photocourant transitoire par la technique du temps de vol (TOF) ont été utilisés dans le passé par Abkowitz [39] et par Song et al [41], mais les résultats trouvés sont en désaccord. Abkowitz [39] a trouvé une densité de l'ordre de  $10^{14} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$  autour du milieu du gap, des mesures de photoconductivité ont conduit à une densité égale à  $10^{15} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$  et  $10^{18} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$  respectivement pour les défauts chargés. Compte tenu des observations précédentes, une série d'expériences du temps de vol (TOF) ont été établis pour essayer de résoudre certaines ambiguïtés.

À partir de 1999, un groupe de chercheurs dirigés par G. J. Adriaenssens ont publié un nombre considérable d'articles sur ce sujet. Ces chercheurs ont utilisé la technique d'analyse du temps de vol (TOF) pour calculer la distribution de la densité d'états dans le gap du sélénium amorphe (a-Se). Sur la base de cette méthode, Song et ces collaborateurs [41] ont redécouvert l'ensemble des pièges profonds. Cette technique révèle les positions suivantes pour les nouveaux pics: 0.4-0.5 eV au-dessus du bord de la bande de valence et 0.55-0.65 eV en dessous du bord de la bande de conduction. Alors, les chercheurs dans le laboratoire d'Adriaenssens ont décidé de surmonter ce dernier obstacle à cause de l'existence des pics dans le modèle d'Abkowitz [39].

La distribution de la densité d'états dans le gap du sélénium amorphe (a-Se) a été raffinée dans plusieurs autres papiers. Par conséquent, plusieurs séries de mesure de la photoconductivité stationnaire et transitoire ont été effectuées par Benkhedir et al sur des films de (a-Se) pour résoudre le problème [42-45]. Les résultats témoignent de la présence d'un centre accepteur situé environ 0.4 eV au-dessus du bord de la bande de valence  $E_V$ , et celui des donneurs à 0.5 eV en dessous de l'extrémité de la bande de conduction,  $E_C$ . Cette identification trouve un appui supplémentaire dans des travaux rapportés sur des mesures de spectroscopie de déflexion photothermique (PDS) et du photocourant modulé (CPM) et Par conséquent, (a-Se) est, sans aucun doute, un système U négatif [46].

La présence des pièges profonds dans le sélénium amorphe a été traditionnellement déduite à partir des expériences xérographiques [39], mais un comportement anormal observé sur la conductivité dans l'obscurité dans a-Se a été également attribué à des pièges profonds près du niveau de Fermi [47]. Des Photocourants en régime stationnaire mesurés sur le sélénium amorphe (a-Se) en fonction de l'intensité d'illumination pour des températures entre 210 K et 297 K, proposent d'avantage la confirmation de la présence d'un piège profond des électrons près du niveau d'équilibre de Fermi [48].

Un peu plus tard, Koughia et al [49] ont analysés les courants transitoires des électrons à partir de la technique du temps de vol (TOF), et ont déduits trois niveaux de défauts distincts (différents): un pic majeur situé à 0.3 eV en dessous de  $E_C$ , un plus faible autour de 0.5 eV, et une autre densité profonde au-delà de 0.65 eV comme le montre la Figure.1.11. Alors que l'énergie de 0.5 eV correspond aux résultats obtenus à partir d'analyse précédente, les niveaux 0.3 eV et profonds sont également soutenus par de nouvelles observations expérimentales. Des attentions dans des expériences antérieures du temps de vol (TOF) ont

porté principalement sur la région post-transit, une étude attentive des courants d'électrons pré-transit a révélé des preuves incomparable pour un piège distincte situé à  $\sim E_C - 0.28$  eV [44]. Néanmoins, des mesures du photocourant transitoire montrent un soutien supplémentaire pour le niveau situé à 0.25 eV au-dessus de  $E_V$  [50].

Une étude ultérieure a été entreprise par Benkhedir et al [45] pour confirmer ces résultats en examinant les photocourants transitoires standard dans des cellules gap du sélénium amorphe a-Se à des températures plus basses, mais ils n'ont pas réussi à trouver le changement de pente qui pourrait indiquer la présence d'un niveau de défaut à  $\sim 0.25$  eV. Cependant, leurs expériences offrent preuve d'un niveau discret localisé environ 0.4 eV au-dessus de  $E_V$  en parfait accord avec l'étude originale de Song et al.[41], et une queue de bande de valence exponentielle, avec une largeur  $E_0 < 30$  meV, est résolue.

Sous l'influence des idées présentées par Koughia et al [49], le même groupe de recherche a tenté de modéliser la distribution de la densité d'états dans le gap du sélénium amorphe près de la bande de conduction, comme une somme d'une distribution exponentielle et trois distributions gaussiennes. Cela implique que les trois ensembles de pièges d'électrons (niveaux défaut) existent dans la bande interdite de a-Se. Les positions de ces pièges se sont révélés d'être de 0.3 eV, 0.48 et 0.65 eV au-dessous du bord de la bande de conduction. La largeur caractéristique de la queue de bande trouvée dans le même travail est égale à 20 meV [51].

Plus récemment, des mesures du photocourant transitoire par la technique du temps de vol et la photoconductivité transitoire standard sur les couches évaporées de a-Se, ont été effectuées par Benkhedir et al pour analyser la densité d'états dans la bande interdite. Cela signifie une décroissance dans le courant de prés-transit dans la trace du (TOF) ou une bosse dans le courant post-transit indique un niveau de défauts dans la bande interdite. Pour identifier la position énergétique du défaut, les décroissances du courant sont transformées en diagramme  $[I(t) \times t]^{-1}$  ou  $[I(t) \times t]$  [52].

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

de la trace indique un niveau de défaut. Cette analyse a montré la présence de deux niveaux de défauts situés à 0.2 eV et 0.4 eV au-dessus du bord de la bande de valence [53].

Dans une publication ultérieure, Marshall [54] a montré avec des calculs de simulation que l'application des procédures décrites ci-dessus pour interpréter les traces du temps de vol (TOF) et de la photoconductivité transitoire (TPC), peuvent détecter la présence des niveaux de défauts. Cependant, la procédure de prés-transit donne une fausse position énergétique du défaut indépendamment de la hauteur de l'intensité du pic au-dessus de la densité du fond. En revanche, la procédure de post-transit identifie correctement cette énergie. Il a aussi montré que des méthodes quantitatives comme la transformée de Fourier identifie avec précision la structure de la densité d'états.

Il est intéressant de mentionner que les valeurs des positions énergétiques des défauts présentés dans les deux derniers paragraphes, peuvent être considérées comme une estimation d'image de la densité d'états dans le gap du sélénium amorphe. Il est également important de signaler que la position énergétique des niveaux de défauts profonds est confirmée en utilisant la méthode de prés-transit [41], et que la position énergétique des niveaux de défauts peu profonds est confirmée par la méthode de la transformée de Fourier [53].

L'utilisation de la méthode de la transformée de Fourier a permis de connaître, plus précisément, la distribution énergétique de la densité d'états dans le gap du (a-Se) du côté de la bande de valence. Cette méthode a été proposée par Main et al [35], et a été largement utilisé dans différentes situations. Nous pouvons, également, utiliser la méthode de la transformée de Laplace pour le même objectif. La différence la plus importante entre les deux techniques est dans leur convergence. Contrairement à la méthode de la transformée de Laplace, la convergence de la transformée de Fourier doit être assurée par l'utilisation de certaines techniques, une procédure de fenêtrage, par exemple, et peut dépendre de la forme des distributions des états localisés [36].

L'intérêt porté à l'utilisation de la méthode de la transformée de Laplace pour l'extraction de la densité des états localisés dans les matériaux amorphes, à partir des données du photocourant transitoire (TPC) a donné lieu à un grand nombre de publications [55-59]. Comme il est indiqué par Naito et al [36,55-58], la méthode de la transformée de Laplace offre deux avantages:

- l'analyse de la méthode est valable à la fois dans le régime avant et après la recombinaison du photocourant transitoire.

- et applicable à des semi-conducteurs amorphes présentant un transport dispersif ou non dispersif.

Bien que le sélénium amorphe stabilisé (a-Se: As) est maintenant un photoconducteur à rayon X bien établi, il y a de nombreux aspects scientifiques du matériau qui n'ont pas été résolus tel que la diminution de la durée de vie, expliquée dans la littérature par l'introduction d'un nouveau piège des trous. Notre contribution est une analyse critique de nombreux aspects scientifiques des travaux qui n'ont pas été résolus, nous examinons les différentes propriétés discutés plus haut on identifiions et discutons ces études expérimentales par des études théoriques. Dans le présent travail, et dans le cadre du modèle de piégeage multiple, nous utilisons l'analyse du photocourant transitoire standard (TPC) basée sur la méthode de la transformée de Laplace pour calculer la distribution de la densité d'états dans le sélénium pur et dopé par l'arsenic. À l'aide des résultats obtenus, nous examinons l'évolution de la distribution de la densité d'états dans la moitié inférieure du gap de sélénium amorphe due au dopage avec l'arsenic.

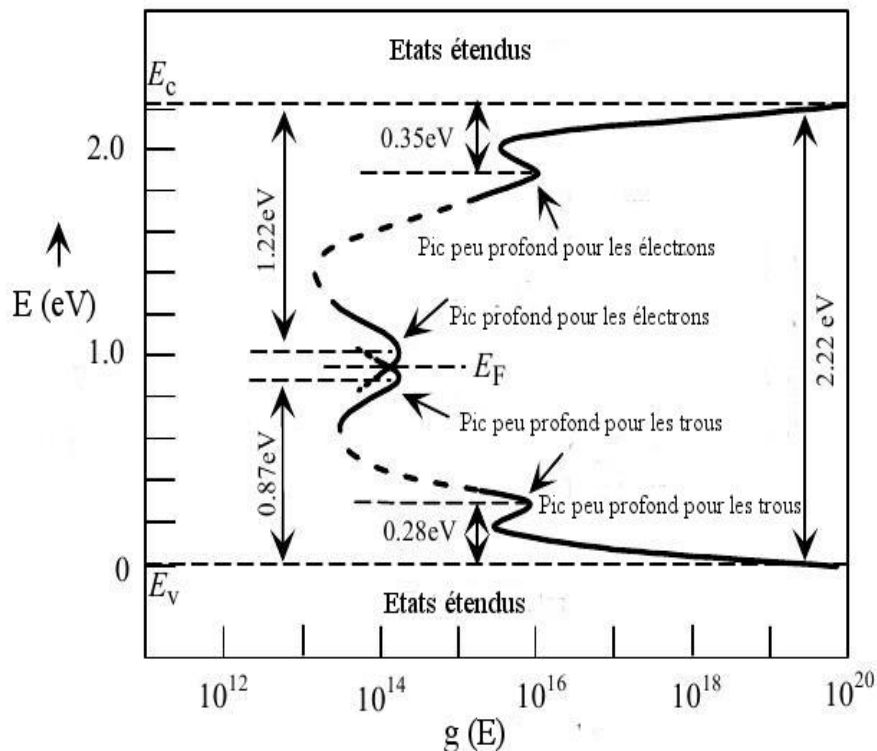


Figure 1.10: La densité d'états dans le sélénium amorphe proposée par Abkowitz [39].

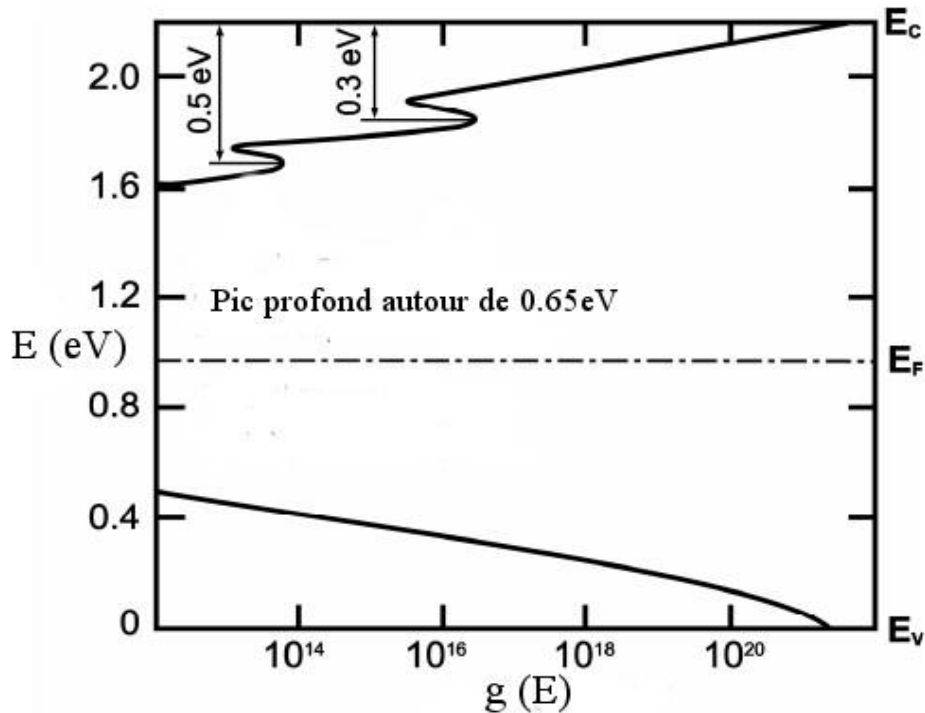


Figure 1.11: Schéma tentative du diagramme de bandes dans (*a*-Se) développé par le groupe de l'université de Saskatchewan.

## 1-7 Conclusion

Dans ce chapitre, la structure atomique et la structure de bandes des matériaux amorphes est décrite. L'arrangement atomique dans les semi-conducteurs amorphes n'est pas complètement aléatoire mais il est d'ordre à courte portée. Les variations dans la structure du réseau périodique ont tendance à dissoudre les bords pointus des bandes dans les diagrammes de la densité d'états, et ils sont remplacés par des états de queue s'étendant dans le gap de mobilité. Différents modèles de bande proposés pour les matériaux amorphes au fil du temps par différents chercheurs, ont été également discutés brièvement.

La formulation théorique des propriétés électroniques utilisant les mêmes concepts mathématiques des solides cristallins est extrêmement difficile, ou impossible pour les semi-conducteurs amorphes à cause de la perte de la périodicité. Nous avons présenté les deux techniques expérimentales de la photoconductivité transitoire, développées pour la détermination de la densité des états localisés dans les semi-conducteurs amorphes.

# Chapitre 2

## Simulation de la densité des états localisés dans les semi-conducteurs amorphes à partir du modèle de piégeage multiple

---

La photoconductivité joue un rôle très important dans l'étude des semi-conducteurs amorphes. Elle n'implique non seulement les processus de génération, recombinaison et piégeage des porteurs de charge libres, mais aussi les différents mécanismes de transport soit la conduction par le processus de piégeage multiple à travers les états étendus ou le processus de saut à travers les états localisés des queues de bandes.

Les mécanismes de transport des porteurs de charge libres dépendent sensiblement de la température et de la densité des états localisés. Aux températures suffisamment hautes, les porteurs de charge se déplacent dans les bandes des états étendus. Quand elle est suffisamment basse, le transport est contrôlé par le saut des porteurs entre les états localisés. Le processus de piégeage multiple est le mécanisme dominant dans le transport des charges dans les semi-conducteurs amorphes à des températures supérieures à 150 K [60].

La photoconductivité qui dépend de plusieurs processus (génération, recombinaison, piégeage multiple) est un bon outil de caractérisation des propriétés électroniques et de la détermination de la forme de la densité des états dans le gap, paramètre directement lié à la qualité du matériau [61]. Ce chapitre introduit les concepts qui étayent le travail présenté dans le cadre de cette thèse. Nous commençons par la présentation du modèle physique utilisé pour

extraire la densité des états localisés dans les semi-conducteurs amorphes. Ensuite, nous étudions, par simulation numérique, la photo-réponse transitoire des amorphes à travers une configuration coplanaire, étudiées par la technique de caractérisation de la photoconductivité transitoire (TPC). La densité des états dans le gap proposée dans la simulation est calculée selon le modèle de piégeage multiple.

## 2-1 Le modèle de piégeage multiple

### 2-1-1 Le cadre théorique

Cette section se consacrera à la revue du modèle le plus populaire dans l'étude du transport dans les semi-conducteurs amorphes, pour permettre à un lecteur peu familier avec la théorie des amorphes d'acquérir des concepts de base, qui lui seront utiles dans le prochain chapitre.

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

$$\frac{\partial \rho(\vec{x}, t)}{\partial t} = g_v(\vec{x}, t) - \vec{\nabla} \cdot f(\vec{x}, t), \quad (2.1)$$

$$\rho(\vec{x}, t) = n(\vec{x}, t) + \sum_i n_i(\vec{x}, t), \quad (2.2)$$

où  $\vec{x} \equiv (x, y, z)$  est la position dans l'espace,  $t$  est le temps,  $g_v(\vec{x}, t)$  représente le taux de génération,  $f(\vec{x}, t)$  est le flux des charges mobiles et  $\rho(\vec{x}, t)$  est la concentration totale des charges, définie par l'équation (2.2),  $n(\vec{x}, t)$  est la concentration des porteurs libres et  $n_i(\vec{x}, t)$  la concentration des porteurs localisés.

La sommation dans l'équation (2.2) s'étend sur l'ensemble des différents types de pièges dans le matériau. Nous nous limiterons dans cette étude à un film semi-conducteur d'épaisseur  $dx$  comme le montre la Figure.1.8. Cette dernière illustre le trajet possible d'un trou qui a été généré près de la surface éclairée à  $x = 0$ . La probabilité de génération par

unité de volume par unité de temps est désignée par  $g_v(\vec{x}, t)$ . Suite à la génération, les trous se déplacent vers le substrat à  $x = L$ . À un point  $x$ , le trou peut être capturé et libéré d'un piège approprié. Chaque type de piège est caractérisé par un temps de vie  $\tau_i$  et un temps d'émission  $\tau_{r,i}$ , 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:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = g_v(x, t) + \sum_{i=1}^k p_i \gamma_i - p \sum_{i=1}^k \omega_i - \frac{\partial f_p}{\partial x}, \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial p_i}{\partial t} = p \omega_i - p_i \gamma_i, \quad (2.4)$$

le flux des trous est exprimé par la relation suivante:

$$f_p = p \mu_0 F - D \frac{\partial p}{\partial x}, \quad (2.5)$$

dont  $\mu_0$  est la mobilité microscopique,  $F$  est le champ électrique et  $D$  le coefficient de diffusion des trous. Il faut noter que l'équation (2.4) implique un système d'équations, pour chaque piège distinct  $k$ . Les équations (2.3) et (2.5) sont explicitement écrites pour une dimension, mais leur extension à trois dimensions est évidente. Des équations similaires peuvent être écrites pour les électrons, et leur solution sera réalisée de la même manière que la solution donnée pour les trous. Pour le cas particulier d'un porteur de charge se déplaçant à travers les états de valence ou de conduction, les paramètres de piégeage peuvent être écrits comme suit:

$$\omega_i = N_i \sigma_i \bar{v}, \quad (2.6)$$

$$\gamma_i = \nu_i e^{-E_i/k_B T}, \quad (2.7)$$

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

## **2-2 Revue de la littérature sur le calcul de la densité d'états dans la bande interdite des semi-conducteurs amorphes**

Comme il a été décrit dans le premier chapitre, la mesure de la mobilité des porteurs de charge est une étape importante pour la compréhension du mécanisme de la conduction dans les semi-conducteurs amorphes. Des techniques diverses ont été rapporté pour évaluer la mobilité des porteurs de charge, parmi eux, la technique du temps de vol (TOF) est la plus populaire.

Les propriétés uniques que représentent les semi-conducteurs amorphes déterminées à travers ces expériences sont dues à la présence des états localisés dans la bande interdite. Dans un semi-conducteur cristallin sans défaut, la distribution des états électroniques (où énergétiques) se termine brusquement au bord des bandes, en revanche dans les semi-conducteurs amorphes, une queue des états réside dans la bande interdite, cette queue est la conséquence du désordre dans ces matériaux. La présence de ces états dans la bande interdite et qui agissent entant que pièges profonds, et peu profonds et qui peuvent capturer les porteurs de charge lors du déplacement dans l'échantillon, cause un changement significatif dans les propriétés de transport [62].

Plusieurs modèles de bandes ont été proposés pour expliquer les propriétés électroniques des semi-conducteurs amorphes. Ces modèles diffèrent dans leurs prédictions sur la forme de la densité des états localisés dans la bande interdite entre les états des bandes étendues. Ces différents modèles ont été traités dans la section (1-2-1) du premier chapitre. La controverse entre ces modèles est due à l'absence d'une spectroscopie fiable de la mesure de la densité des états localisés.

La détermination expérimentale de la queue de bande demeure depuis de nombreuses années un axe central de la recherche. Une variété de techniques expérimentales ont été employées pour donner une image de cette distribution. La technique du temps de vol (TOF) [63-64] et la photoconductivité transitoire (TPC) [12,65] sont considérées comme des méthodes très adéquates pour la caractérisation de cette densité. Des expressions reliant le photocourant transitoire et la distribution des états localisés peuvent être dérivées, mais ils sont difficiles à inverser dans le cas général [24].

Dans cette circonstance, une série de projets de recherche ont été développés, dont le but principal est d'élaborer un dispositif expérimental capable de mesurer la densité d'états.

Les travaux proposés ont prouvé pour la première fois une mesure spectroscopique de cette densité. Les techniques spectroscopiques rapportées pour la détermination de la distribution des états localisés [66], et les méthodes les plus utilisées sont le photocourant modulé [67] et la technique du photocourant transitoire [68-70].

L'injection des courants transitoires est une méthode efficace dans l'étude des propriétés et des paramètres des matériaux amorphes tels que la mobilité, la structure de bande. Cette méthode a été largement fructueuse dans l'étude des semi-conducteurs à faible mobilité, ce qui a stimulé l'étude théorique du problème. Etant donné que la technique de la photoconductivité transitoire a été régulièrement appliquée à la mesure des distributions des états localisés dans les semi-conducteurs amorphes, plusieurs méthodes tels que la technique d'Orenstein-Kastner [12] et la technique de Simmons-Tam [71] ont été employés. Cependant, ces méthodes ne sont valables que pour le prés ou le post régime de recombinaison de la photoconductivité transitoire et les distributions des états localisés ne peuvent être déterminés avec précision, sauf pour une dépression continue au bord du gap de mobilité. Une méthode spectroscopique plus fiable et utile basé sur l'analyse de la photoconductivité transitoire est par conséquent, souhaitable.

Comme il a été expliqué dans les techniques de la photoconductivité transitoire, l'analyse du courant à partir de ces deniers demeure difficile à cause de la limitation du domaine temporel de ces expériences. Un moyen élégant de contourner ces difficultés, est de transformer la décroissance du courant dans le domaine fréquentiel en utilisant la transformée de Fourier [35]. Cette procédure peut être utilisée pour extraire des informations sur la densité et la distribution énergétique des états localisés dans la bande interdite. Non seulement la transformée de Fourier, mais il existe d'autres méthodes qui ont été appliquées dans la conversion des signaux mesurés à partir des expériences de la photoconductivité transitoire tel que la transformée de Laplace [36]. Cette méthode a été proposée par Naito et ses collaborateurs pour déterminer la distribution énergétique des états localisés dans les semi-conducteurs amorphes. Cette technique est valable sur une large gamme de temps de l'expérience de la photoconductivité transitoire impliquant une durée de vie de recombinaison. Alors, il est important de comprendre l'effet de ces pièges dans le cadre du mécanisme de piégeage multiple utilisant la méthode de la transformée de Laplace de la photoconductivité transitoire, mise par Naito et al [36].

## 2-3 Exposition de la méthode de la transformée de Laplace

### 2-3-1 Principe de la méthode

La caractéristique la plus importante déterminée dans des semi-conducteurs amorphes est la distribution énergétique de la densité des états localisés  $g(E)$ , car elle quantifie les états de défauts qui affectent largement leur réponse photoélectrique et dégradent les performances de leurs dispositifs optoélectroniques connexes. La technique de la photoconductivité transitoire (TPC), est une méthode appropriée pour révéler la distribution  $g(E)$  dans les semi-conducteurs désordonnés. Dans cette expérience, la décroissance du photocourant transitoire suite à une impulsion lumineuse très courte présente des caractéristiques qui sont des images de la distribution  $g(E)$ . Une corrélation quantitative entre cette décroissance et la distribution  $g(E)$ , basée sur l'analyse du transport dans le cadre du modèle de piégeage multiple, a conduit à une méthode de spectroscopie détaillée afin de déterminer  $g(E)$  de la photoconductivité transitoire (TPC) [72].

Les équations de continuité qui définissent le problème de piégeage multiple, sont formulées d'abord dans le contexte familier d'un porteur de charge se déplaçant à travers les états étendus, en présence des états localisés dans le gap agissant comme des pièges exposés dans les travaux de Schmidlin [8]. Le système de  $k$  équations différentielles du premier ordre couplées peut être résolu avec certaines hypothèses simplificatrices.

La photoconductivité transitoire est déterminée par la dépendance temporelle du courant photoélectrique suivant une excitation des porteurs de charge, au moyen d'une impulsion lumineuse courte dans des échantillons avec une configuration coplanaire [36]. Pour la présente analyse, les équations (2.3) et (2.4) peuvent être résolus avec les hypothèses suivantes :

- (i) le transport des porteurs photo générés est dû au mécanisme de transport par piégeage multiple.
- (ii) la photoconduction est unipolaire, les porteurs de charge mobiles sont des trous ou des électrons.
- (iii) les sections efficaces de capture pour tous les états localisés sont égales.
- (iv) les états localisés ne sont pas saturés.

- (v) l'illumination par un flash lumineux court dans la présence d'un champ électrique constant, dans ce cas le taux de photogénération est étroitement approché par une fonction  $\delta$ .

L'hypothèse (ii) est rentable car la plupart des semi-conducteurs amorphes présentent une conduction unipolaire, et l'hypothèse (iv) est valable dans le cas où on mesure le photocourant transitoire sous la condition d'un signal court. Dans cette condition, les cinétiques de recombinaison des porteurs de charge devrait être mono moléculaire [36].

En supposant un seul type de porteur de charge (trous), dont le transport est dominé par le mécanisme de piégeage multiple, la simulation numérique de la densité d'états dans un semi-conducteurs désordonné consiste à résoudre le système d'équations du taux de variation de la densité des trous libres et piégés  $p(t)$  et  $p_i(t)$  respectivement. Prenons en compte les hypothèses précédentes, les équations de base du modèle de piégeage multiples sont alors [36]:

$$\frac{dp(t)}{dt} = -\sum_i \frac{dp_i(t)}{dt} - \frac{p(t)}{\tau} + n_0\delta(t), \quad (2.8)$$

$$\frac{dp_i(t)}{dt} = \omega_i p(t) - \gamma_i p_i(t), \quad (2.9)$$

où  $p(t)$  est la densité des trous libres à chaque instant  $t$ ,  $p_i(t)$  est la densité des trous piégés à la  $i$ ème états localisés à chaque instant  $t$ ,  $\tau$  est durée de vie de recombinaison,  $n_0$  est la densité des porteurs libres injectés. Des équations similaires peuvent être dérivées dans le cas des électrons.

Pour utiliser cet ensemble d'équations différentielles dans l'analyse des données expérimentales, les différents paramètres de l'échantillon peuvent être discrétisés comme suit: la densité d'états  $g(E)$  est décrite comme une distribution discrète de  $k$  pièges situés à des intervalles réguliers  $\Delta E$ , tel que  $E_i = i\Delta E$  est le  $i$ -ème niveau d'énergie situé au-dessous du bord de la bande de conduction  $E_C$  où au-dessus du bord de la bande de valence  $E_V$ ; dans les deux cas, l'origine de l'échelle de l'énergie est repéré au niveau du bord des bandes, et sa direction est positif vers le gap. Les paramètres d'interruption sont supposés indépendants de la position, correspondant à une distribution homogène de pièges. Dans ce cas la constante du

taux de capture est  $\omega_i = \sigma v_{th} g(E_i) \Delta E$ , et la constante du taux d'émission est  $\gamma_i = \nu \exp\left(\frac{E_i}{k_B T}\right)$  dont  $\sigma$  est la section efficace de capture,  $v_{th}$  la vitesse thermique et enfin  $\nu$  est la fréquence de tentative d'échappement [10]. Ces équations peuvent être résolues par des transformées de Laplace.

La transformée de Laplace de  $p(t)$  est définie comme suit :

$$\hat{p}(s) = \int_0^{\infty} p(t) e^{-st} dt, \quad (2.10)$$

la solution des équations (2.8) et (2.9) pour  $\hat{p}(s)$  est :

$$\hat{p}(s) = \frac{n_0}{a(s)}, \quad (2.11)$$

où

$$a(s) = s + \frac{1}{\tau} + \sum_i \frac{s \omega_i}{s + \gamma_i} = s + \frac{1}{\tau} + s \int_0^{E_F} \frac{\sigma v_{th} g(E)}{s + \nu \exp\left(-\frac{E}{K_B T}\right)} dE, \quad (2.12)$$

et  $E_F$  est le niveau d'équilibre thermique de Fermi. La différenciation de l'équation (2.12) par rapport à  $\ln s$ , abouti à :

$$\frac{da(s)}{d \ln s} = s \left[ 1 + \int_0^{E_F} \sigma v_{th} g(E) h(s, E) dE \right], \quad (2.13)$$

avec

$$h(s, E) = \nu \exp\left(-\frac{E}{K_B T}\right) \left( s + \nu \exp\left(\frac{-E}{K_B T}\right) \right)^{-2}.$$

Cette relation est une équation intégrale de Fredholm du premier type, et une attention particulière doit être tenu dans l'inversion numérique de la distribution énergétique des états localisés, parce que l'inversion numérique des équations intégrales de Fredholm est connu

comme un problème mal posé. Ce terme veut dire que la solution peut ne pas exister, elle peut être non unique et elle peut ne dépendre de façon continue des données d'entrée.

Dans un effort pour résoudre ce problème, Naito et al [36] ont élaboré une approche qui permet de calculer la distribution des états localisés, en l'absence d'une solution exacte de l'équation précédente. La fonction  $h(s, E)$  de l'équation (2.13) peut être approchée par une fonction delta, tels que :

$$h(s, E) = \frac{K_B T}{s} \delta(E - E_0), \quad (2.14)$$

où

$$E_0 = K_B T \ln(V/s), \quad (2.15)$$

en substituant l'équation (2.14) dans l'équation (2.13), nous aurons:

$$\frac{da(s)}{d \ln(s)} = s + \sigma v_{th} K_B T g(E_0). \quad (2.16)$$

Dans l'expérience de la photoconductivité transitoire (TPC), le photocourant est donnée par la formule  $I(t) = q\mu_0 F p(t)$ , avec  $q$  est la charge électronique,  $\mu_0$  est la mobilité microscopique,  $F$  est le champ électrique appliqué. La transformée de Laplace de ce courant est:

$$\hat{I}(s) = q\mu_0 F \hat{p}(s), \quad (2.17)$$

des équations (2.11), (2.16) et (2.17), la distribution des états localisés peut être donnée par :

$$g(E_0) = \frac{1}{\sigma v_{th} K_B T} \left[ \frac{d}{d \ln s} \left( \frac{qn_0 \mu_0 F}{\hat{I}(s)} \right) - s \right] = \frac{1}{\sigma v_{th} K_B T} \left[ \frac{d}{d \ln s} \left( \frac{I(0)}{\hat{I}(s)} \right) - s \right], \quad (2.18)$$

dont  $I(0)$  est estimé par l'extrapolation de  $I(t)$  à  $t = 0$ ,

$$\hat{I}(s) = \frac{I(0)}{a(s)} = \frac{I(0)}{s + \frac{1}{\tau} + s \int_0^{E_F} \frac{\sigma v_{th} g(E)}{s + v e^{-E/K_B T}} dE}. \quad (2.19)$$

Il est possible de mesurer le photocourant transitoire à différents points de l'échantillon,  $t_j$ , sur une large gamme de temps dans la configuration coplanaire. La transformée de Laplace de  $I(t)$  peut être réalisée par intégration numérique sur les  $N$  points de l'échantillon tel que :

$$\hat{I}(s) = \sum_{j=2}^{N-1} I(t_j) e^{-t_j s} \Delta t_j, \quad \Delta t_j = \frac{(t_{j+1} - t_{j-1})}{2}, \quad (2.20)$$

et alors la distribution des états localisés peut être obtenue des équations (2.15) et (2.18). Comme il ressort de l'équation (2.18), la distribution obtenue n'est pas affectée par  $\tau$  et de ce fait cette méthode est valable dans les régimes avant et après la recombinaison de la photoconductivité transitoire.

Il est assez surprenant que l'équation (2.18) n'a jamais été rapportée dans les études antérieures. Cela provient du fait que les analyses précédentes se sont concentrées sur l'explication de la dispersion anormale des courants transitoires observée principalement avec des expériences du temps de vol, en supposant une distribution exponentielle des états localisés, et les rapports sur la détermination de la distribution des états localisés de la photoconductivité transitoire ont été limités.

La méthode de la transformée de Laplace de la photoconductivité transitoire peut être appliquée aux matériaux avec un transport non dispersif ou dispersif, et l'analyse de la méthode est valable dans les deux régimes de recombinaison de la photoconductivité transitoire. Cependant, cette méthode présente un problème sur sa résolution en énergie dû à l'approximation de l'équation (2.14) qui résulte un effet d'élargissement de l'ordre de  $k_B T$  [58]. Dans la section ultérieure, nous présentons une amélioration de la résolution en énergie de la méthode de la transformée de Laplace de la photoconductivité transitoire (LT TPC).

### 2-3-2 La méthode de la transformée de Laplace à haute résolution (HLT)

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

Pour améliorer la résolution en énergie de la méthode de la transformée de Laplace de la photoconductivité transitoire (LT TPC), Naito et al ont proposé la méthode de la

transformée de Laplace à haute résolution (HLT) [58]. Dans la méthode de la transformée de Laplace de la photoconductivité transitoire à haute résolution (HLT), on calcule la dérivée seconde de l'équation (2.12) par rapport à  $s$ ,

$$\frac{d^2 a(s)}{ds^2} = -\int_0^{E_F} \sigma v_{th} g(E) h'(s, E) dE, \quad (2.21)$$

$$h'(s, E) = \frac{2v \exp(-E/K_B T)}{\left[ s + v \exp(-E/K_B T) \right]^3}, \quad (2.22)$$

cette fonction peut aussi être approchée par une fonction delta

$$h'(s, E) = \frac{K_B T}{s^2} \delta(E - E'_0), \quad E'_0(s) = K_B T \ln(2v/s). \quad (2.23)$$

en substituant l'équation (2.23) dans l'équation (2.21), on aboutit à:

$$\frac{d^2 a(s)}{ds^2} = -\frac{\sigma v_{th} K_B T}{s^2} g(E'_0). \quad (2.24)$$

Utilisons la transformée de Laplace de  $J(t) = tI(t)$  et  $H(t) = t^2 I(t)$ , définit comme suit :

$$\hat{J}(s) = \int_0^{\infty} tI(t)e^{-st} dt = -q\mu_0 F \frac{d\hat{P}(s)}{ds}, \quad (2.25)$$

$$\hat{K}(s) = \int_0^{\infty} t^2 I(t)e^{-st} dt = q\mu_0 F \frac{d^2 \hat{P}(s)}{ds^2}, \quad (2.26)$$

des équations (2.11) et (2.24), on obtient l'expression de la distribution des états localisés,

$$g(E'_0) = \frac{I(0)}{\sigma v_{th} K_B T} \frac{\hat{I}(s)\hat{K}(s) - 2[\hat{J}(s)]^2}{[\hat{I}(s)]^3} s^2. \quad (2.27)$$

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

## 2-4 Validation de la méthode

### 2-4-1 Problèmes rencontrés

Nous avons vu que la relation proposée pour le calcul de la densité d'états dans le gap des semi-conducteurs amorphes, sur la base de la méthode de la transformée de Laplace de la photoconductivité transitoire (LT TPC) dans le cadre du mécanisme de transport par piégeage multiple, est une approximation de l'équation (2.13). Cette relation générale est une équation intégrale de Fredholm du premier type, et une attention particulière doit être tenu dans l'inversion numérique de l'équation intégrale pour obtenir la distribution énergétique des états localisés parce que, l'inversion numérique des équations intégrales de Fredholm est connu comme un problème mal posé « ill-posed problem » [73].

Pour éviter la complexité numérique, nous allons démontrer l'applicabilité de la méthode de la transformée de Laplace pour l'analyse des photocourants mesurés par la photoconductivité standard. Nous vérifions la validité des approximations et l'applicabilité de l'expression finale de la densité d'états à partir des calculs numériques. L'enquête nécessite le calcul du photocourant transitoire idéal,  $I(t)$ , en fonction de  $t$  pour des distributions sélectionnées, puis le calcul de la densité d'états via la transformée de Laplace des données traitées. La densité d'états reconstituée ainsi est ensuite comparée avec l'originale. Il est à noter que ce n'est pas évident de retourner à la distribution d'origine, comme il paraît à première vue, car le problème est mal posé.

### 2-4-2 Modèles de la densité d'états dans les semi-conducteurs amorphes

#### Procédure du calcul numérique

La première application de la méthode de la transformée de Laplace de la photoconductivité transitoire, analogue à la démonstration de la section (2-3-1) et dont le résultat principal est l'équation (2.18), fut réalisée par des simulations numériques. Nous examinons cette méthode pour le calcul de la densité des états localisés dans les semi-conducteurs amorphes, en utilisant des photocourants transitoires générés par notre algorithme pour les deux distributions représentatives des états localisés dans les semi-conducteurs amorphes

(i) une distribution exponentielle décrite par l'équation suivante:

$$g(E) = g_0 \exp\left(-\frac{E}{K_B T_0}\right), \quad (2.28)$$

souvent rapportée dans a-As<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> [68],

(ii) une distribution exponentielle superposée d'une distribution gaussienne, qui a été souvent rapportée dans a-Si: H [74]

$$g(E) = g_0 \exp\left(-\frac{E}{K_B T_0}\right) + g_G \exp\left\{\left(\frac{E - E_G}{E_W}\right)^2\right\}, \quad (2.29)$$

où  $g_0$  est la densité de la queue de bande exponentielle aux bords des bandes,  $T_0$  est la température caractéristique,  $g_G$ ,  $E_G$  et  $E_W$  sont respectivement la densité, la position énergétique et la largeur de la distribution gaussienne. Dans le calcul, la distribution continue des états localisés est représentée par un ensemble de  $k$  niveaux discrets étroitement espacés d'une largeur d'énergie  $\Delta E$ , et qui sont caractérisés par une probabilité de capture  $\omega_i$  et une probabilité de réémission  $\gamma_i$  ( $1 \leq i \leq k$ ).

#### Algorithme de simulation

La transformée de Laplace nous fournit un outil utile dans de nombreux domaines de la science et de la technologie. Elle comprend la transformation :

$$Lf(t) = F(s) = \int_0^{\infty} f(t) \exp(-st) dt, \quad (2.30)$$

et la transformation inverse :

$$L^{-1} F(s) = f(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} F(s) \exp(st) ds. \quad (2.31)$$

Dans la pratique, la transformation peut être effectuée facilement, et dans de nombreux cas, elle peut être effectuée en utilisant la relation (2.30). D'autre part, la transformation inverse est souvent très difficile. Le problème de la propagation des ondes dans un milieu dispersif est un de ces problèmes. Les techniques d'inversion sont classées en plusieurs méthodes:

- la méthode utilisant des règles simples et les tables de transformations,
- la méthode utilisant le théorème d'intégrale de Bromwich et de Cauchy,
- la méthode numérique.

Pour les cas où la deuxième méthode fonctionne bien, presque tous les résultats sont répertoriés [75]. Ainsi, il n'existe aucune différence entre la première et la deuxième méthode, de sorte que pour les problèmes où ces dernières ne fonctionnent pas bien doivent être traités par la méthode numérique.

Afin de résoudre ces problèmes, nous avons développé une méthode numérique avec les avantages suivants:

- programmation est facile,
- la taille de la mémoire nécessaire est petite,
- l'estimation et le contrôle des erreurs sont faciles.

Les photocourants transitoires générés pour ces distributions types de densité d'états  $g(E)$  exposées par les équations précédentes, ont été obtenus en suivant les étapes décrites ci-dessous. Comme nous l'avons connu, l'inverse de Laplace d'une fonction est donné par la formule suivante:

$$I(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} I(s) e^{st} dt, \quad (2.32)$$

avec  $I(s)$  est défini par l'équation (2.19). Lorsque nous utilisons le changement de variables  $z = st$  soit alors  $dz = s dt$ , l'intégrale devient :

$$I(t) = \frac{1}{2\pi i t} \int_{c'-i\infty}^{c'+i\infty} I\left(\frac{z}{t}\right) e^z dz, \quad (2.33)$$

selon l'équation (2.33), le courant calculé peut être effectué comme suit:

- (i) tout d'abord, on exprime le développement de la fonction en approximation de Padé: L'approximation de Padé d'une fonction est assez semblable à une série de Taylor, sauf que le développement est un rapport de deux polynômes.
- (ii) deuxièmement, nous appliquons le théorème des résidus pour obtenir la fonction souhaitable, c'est à dire, le courant calculé.

Ainsi, selon les raisons susmentionnées, tout d'abord, nous examinons la validité de notre méthode basée sur la transformée de Laplace inverse en utilisant l'approximation de Padé. Puis, nous l'appliquons dans notre problème en considération. Les quantités physiques

appropriées pour les semi-conducteurs amorphes utilisés dans le calcul sont:  $g_0 = 10^{21} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$ ,  $T_0 = 250 - 700 \text{ K}$ ,  $g_G = 2 \times 10^{18} - 5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$ ,  $E_G = 0,4 \text{ eV}$   
 $E_W = 0,06 \text{ eV}$ ,  $\sigma v_{th} = 10^{-7} \text{ cm}^3/\text{s}$ ,  $\nu = 10^{12} \text{ s}^{-1}$ . Dans tous les calculs, la température de simulation est  $T = 300 \text{ K}$ .

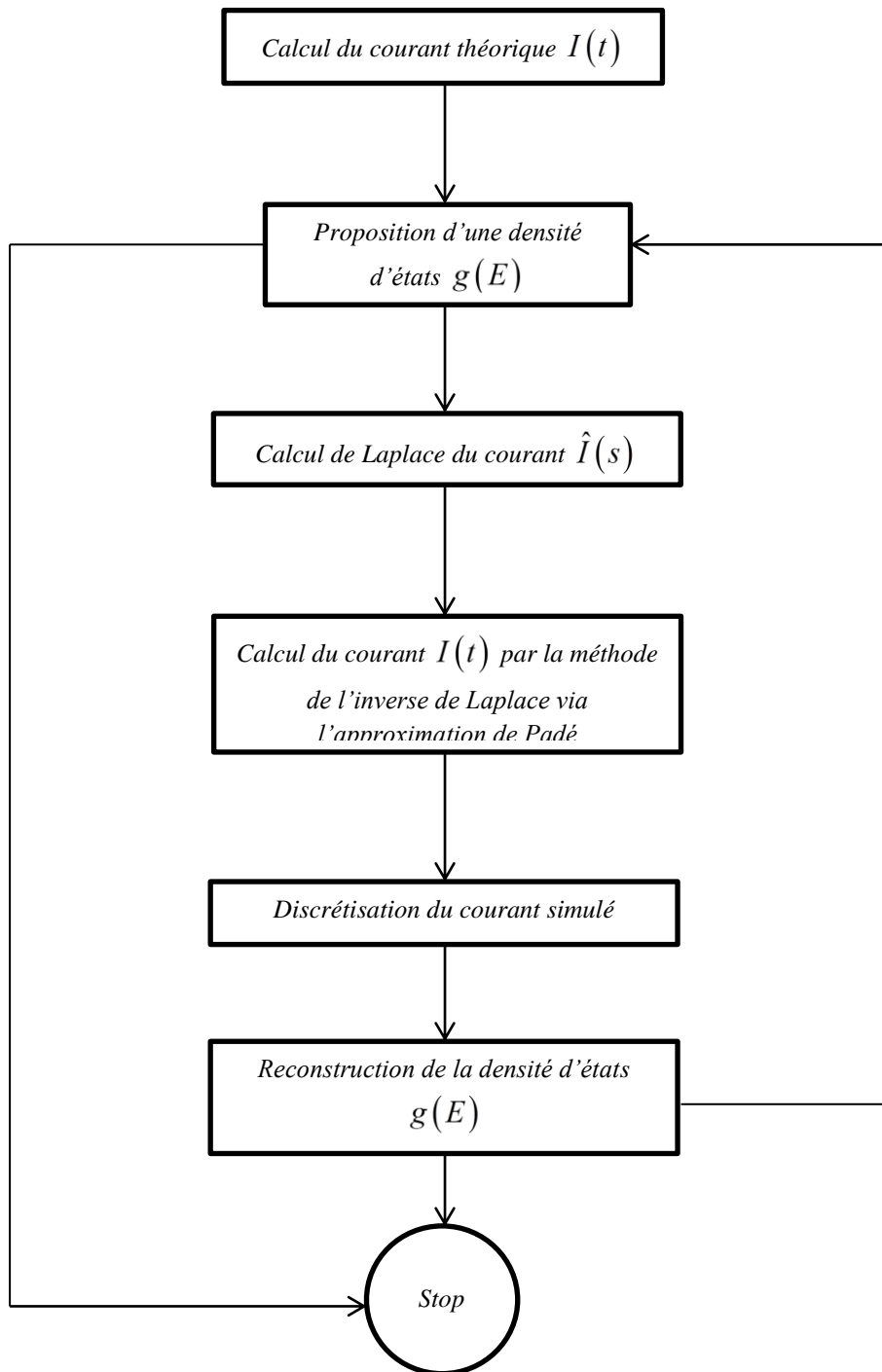
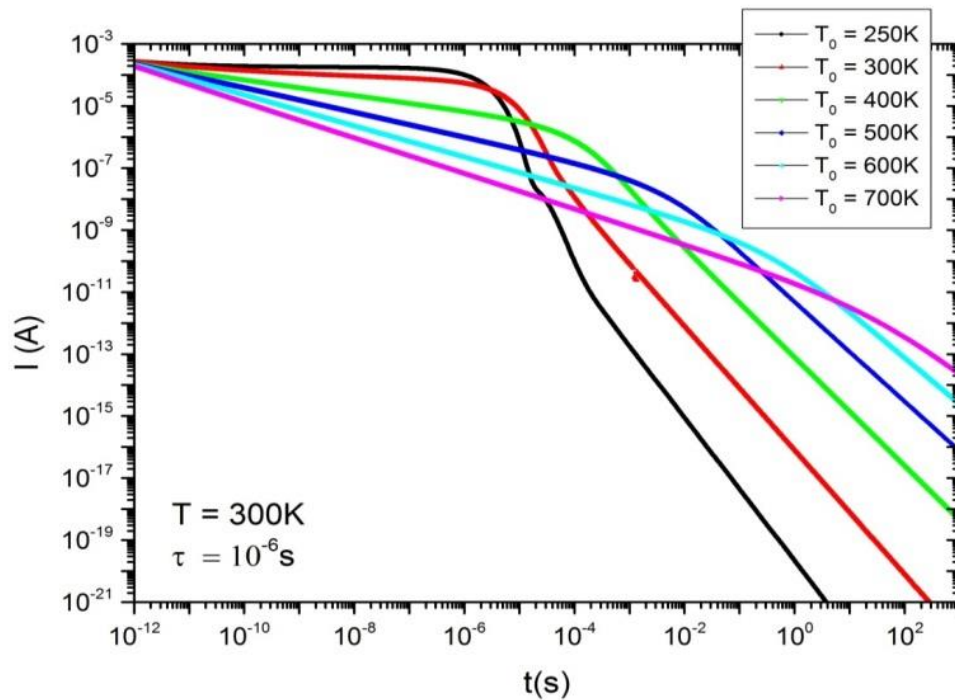


Figure 2.1 : Organigramme de la simulation de l'inverse de Laplace

## 2-5 Résultats numériques et discussion

### 2-5-1 L'influence de l'ordre de la température caractéristique

La Figure.2.2 montre les photocourants transitoires (TPC) générés dans le cas d'une distribution exponentielle de la densité des états localisés pour différentes valeurs de  $T_0$  et pour  $\tau = 10^{-6} s$ .



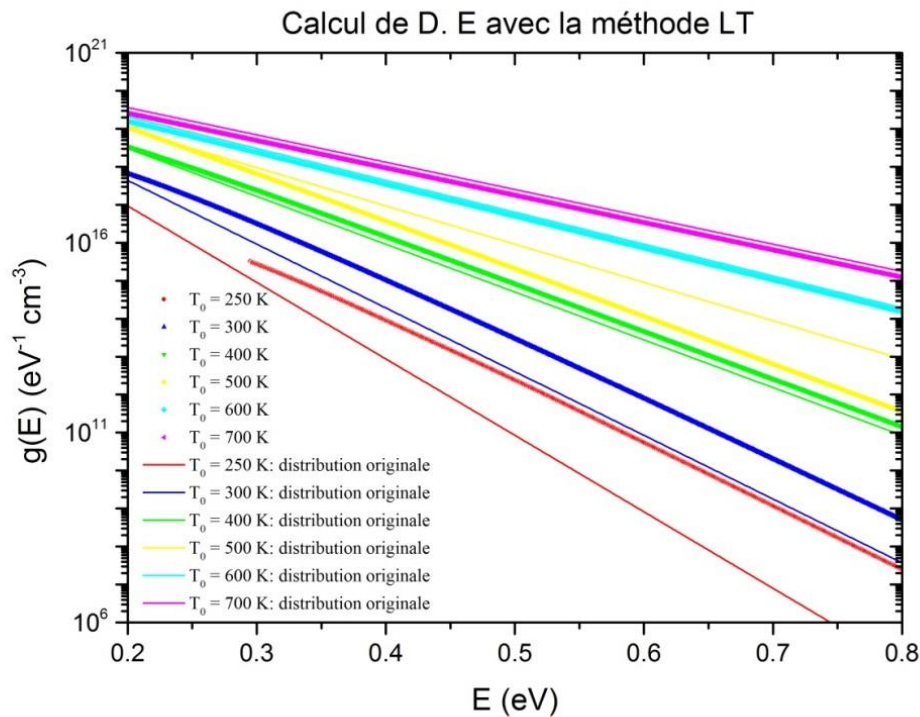
**Figure 2.2:** Le photocourant transitoire (TPC) simulé pour une distribution exponentielle des états localisés à différentes valeurs de  $T_0$  et pour  $\tau = 10^{-6} s$

Les points d'inflexions dans les photocourants transitoires sont dus à la recombinaison monomoléculaire des porteurs libres photogénérés. Le temps de recombinaison déterminé à partir du point d'inflexion,  $\tau'$  est plus long que  $\tau$ , cela résulte du piégeage fréquent et de la réémission des porteurs libres dans les distributions exponentielles des états localisés. La valeur de  $\tau'$  augmente avec  $T_0$  parce que le piégeage et la réémission des porteurs libres photogénérés devient beaucoup plus fréquent.

Les photocourants présentent une loi de puissance en fonction du temps pour  $T_0 \geq 400 K$  connus comme transports dispersif, qui a été généralement observé dans les semi-conducteurs amorphes tels que a-As<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> [76]. D'autre part, pour les températures  $T_0 < 400 K$

le transport est non dispersif, et qui a été observé dans a-Se [77], et a-Si:H [78] à température ambiante.

La Figure.2.3 représente la distribution des états localisés déterminée à partir des photocourants transitoires simulés de la Figure.2.2 et par le biais de la méthode de la transformée de la Laplace de la photoconductivité transitoire (LT TPC), en utilisant les équations (2.18) et (2.20).

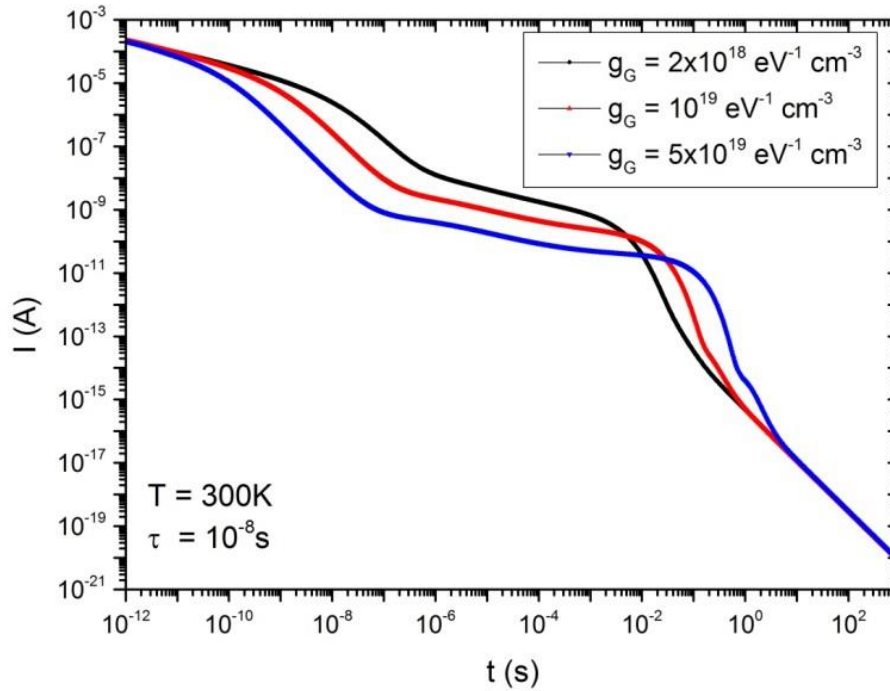


**Figure 2.3:** La densité des états localisés calculée par la méthode (LT) à partir du photocourant transitoire (TPC) de la Figure (2.2).

On peut voir que les distributions des états localisés ne sont pas reconstruites correctement pour  $T_0 \leq T$ , et par conséquent, la méthode de la transformée de Laplace de la photoconductivité transitoire (LT TPC) reproduit des distributions des états localisés exponentielles dont les largeurs énergétiques sont de l'ordre de  $K_B T$ . Ces résultats découlent de l'approximation de la fonction delta (équation (2.14)) utilisée pour la formulation des expressions de la transformée de Laplace de la photoconductivité transitoire. On peut conclure que la méthode de la transformée de Laplace de la photoconductivité transitoire standard, peut donc reproduire de vrais distributions exponentielles des états localisés uniquement pour  $T_0 > T$ .

### 2-5-2 L'influence de l'ordre de l'amplitude de la distribution gaussienne

La Figure.2.4 illustre les photocourants transitoires simulés pour une distribution exponentielle avec une température caractéristique  $T_0 = 500 K$ , superposée d'une distribution gaussienne avec différentes valeurs de l'amplitude  $g_G$ .



**Figure 2.4:** Le photocourant transitoire (TPC) simulé pour une distribution exponentielle des états localisés avec une température caractéristique  $T_0=500K$ , superposée d'une distribution gaussienne à différentes valeurs de  $g_G$  et pour  $\tau = 10^{-8} s$ .

Une dépression dans chaque photocourant transitoire situé dans l'intervalle de temps  $[10^{-9} - 10^{-5}]s$ , cette dépression est causée par le piégeage des porteurs libres dans les états localisés gaussiennes. La durée de recombinaison monomoléculaire des porteurs libres est située dans l'intervalle de temps  $[5 \times 10^{-4} - 2 \times 10^{-2}]s$ .

Les distributions des états localisés calculées à partir des photocourants transitoires (TPC) simulés utilisant la méthode de la transformée de Laplace, sont représentées sur la Figure.2.5. Bien que les positions en énergie et les densités des distributions gaussiennes soient bien reconstruites, les distributions calculées s'écartent de façon significative de vraies distributions dans la région de l'énergie profonde située dans l'intervalle  $(0.5 - 0.8)eV$ . Étant donné que les distributions calculées dans la région de l'énergie plus profonde correspondent

aux distributions exponentielles dont la largeur énergétique est de l'ordre de  $K_B T$ , cette déviation est clairement dû à l'approximation de la fonction delta introduite dans l'équation (2.14).

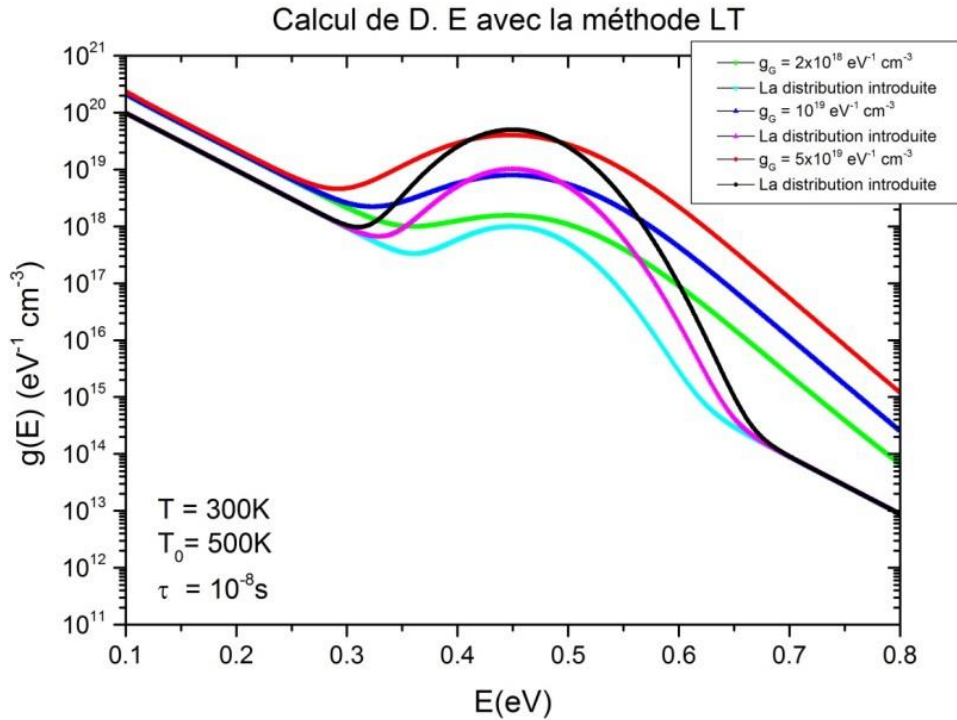


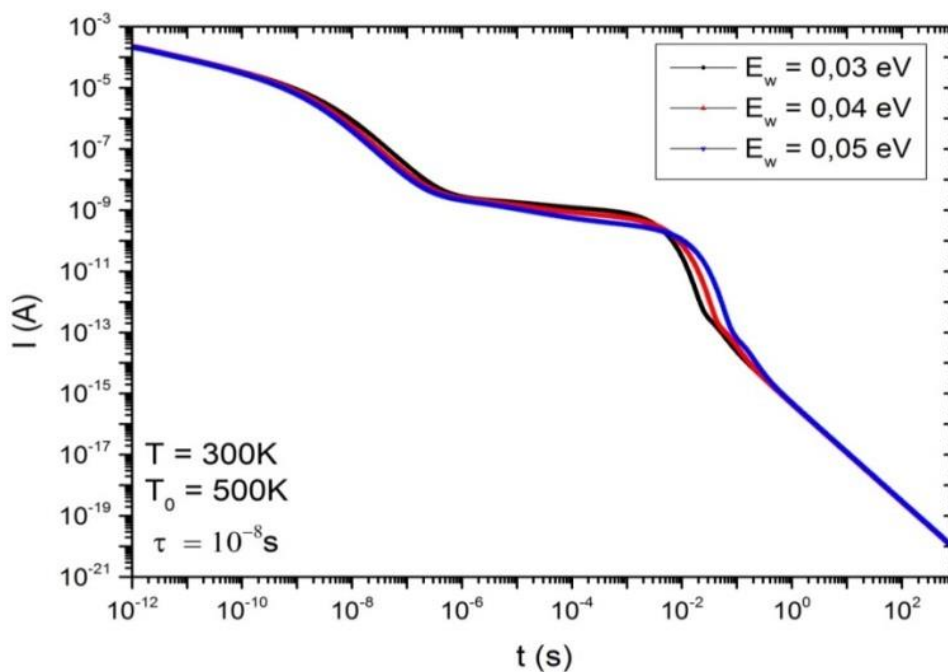
Figure 2.5: La densité des états localisés calculée par la méthode (LT) à partir du photocourant (TPC) de la Figure (2.4).

### 2-5-3 L'influence de l'ordre de la largeur de la distribution gaussienne

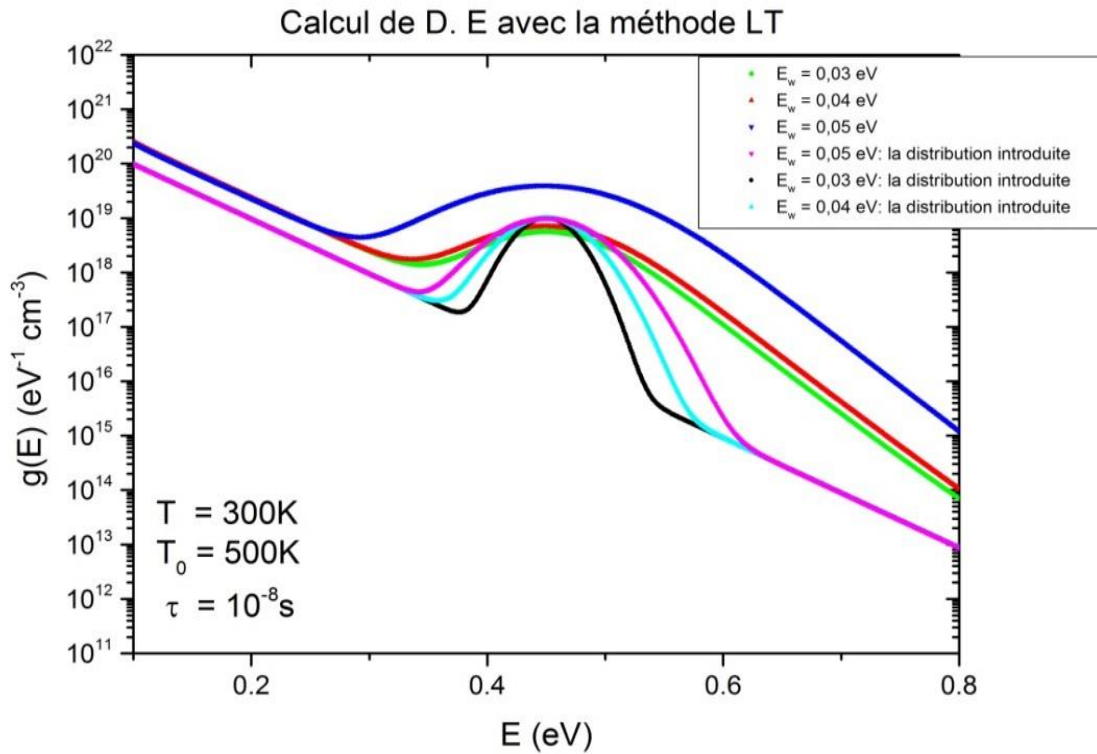
Nous examinons maintenant l'influence de l'ordre de la largeur de la distribution gaussienne sur la reproduction de la distribution introduite. A cet effet, un photocourant simulé pour le cas d'une distribution exponentielle des états localisés avec une température caractéristique  $T_0 = 500K$ , sur laquelle une distribution gaussienne avec des valeurs différentes de  $E_w$  a été superposé. Ces photocourants sont illustrés sur la Figure.2.6.

Sur la Figure.2.7, on montre la densité d'états calculée par la méthode de la transformée de Laplace de la photoconductivité transitoire générée par l'approximation de Padé. On peut voir que la position énergétique et l'amplitude du pic de la distribution gaussienne sont reconstruites, et on signale toujours une déviation entre la densité d'états calculée et l'initiale dans l'énergie profonde, à cause de l'approximation introduite dans la

formulation des équations de la photoconductivité transitoire dans le cadre du modèle de piégeage multiple.



**Figure 2.6:** Le photocouant transitoire (TPC) simulé pour une distribution exponentielle des états localisés avec une température caractéristique  $T_0=500\text{K}$ , superposée d'une distribution gaussienne à différentes valeurs de  $E_w$  et pour  $\tau = 10^{-8}\text{s}$ .



**Figure 2.7:** La densité des états localisés calculée par la méthode (LT) à partir du photocourant (TPC) de la Figure (2.6).

#### 2-5-4 L'influence des temps de mesure sur les distributions des états localisés calculées

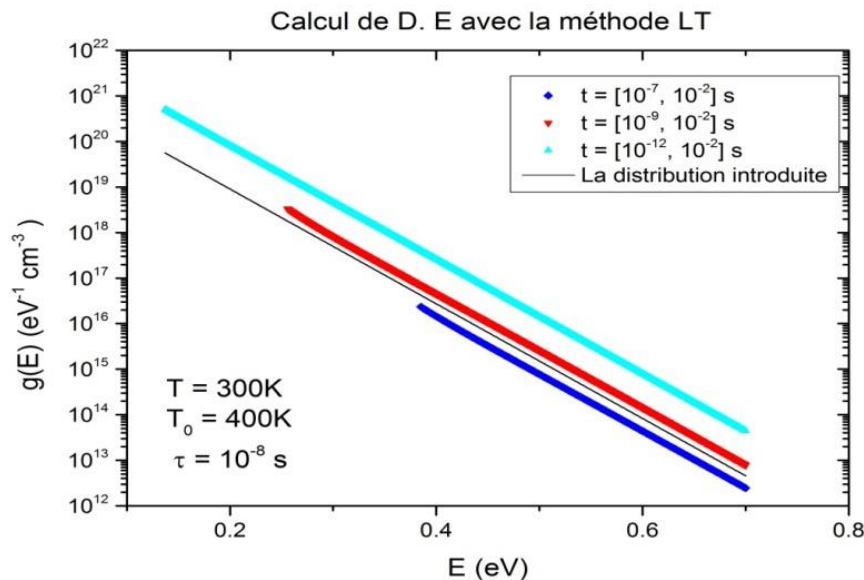
Les valeurs de  $\hat{I}(s)$  sont calculées par l'intégration numérique du photocourant transitoire sur une gamme de temps accessible expérimentalement. Pour l'analyse exacte par la méthode de la transformée de Laplace, le temps de démarrage du photocourant doit être plus court que le début du piégeage des porteurs photogénérés. Dans les semi-conducteurs tels que a-Si: H et a-As<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>, le début du piégeage est de l'ordre de  $10^{-12}s$  [79], mais les plus brefs délais résolu par les appareils électroniques d'échantillonnage numérique est d'environ  $10^{-9}s$  [80].

Nous examinons l'influence de la perte des données du photocourant à des temps courts, sur une distribution des états localisés calculée par la méthode de la transformée de Laplace. À cet effet, nous appliquons la méthode (LT) à des photocourants transitoires calculés avec différents temps de départ pour l'intégration numérique. Dans l'analyse, nous estimons  $I(t=0)$  au temps de démarrage de  $I(t)$ .

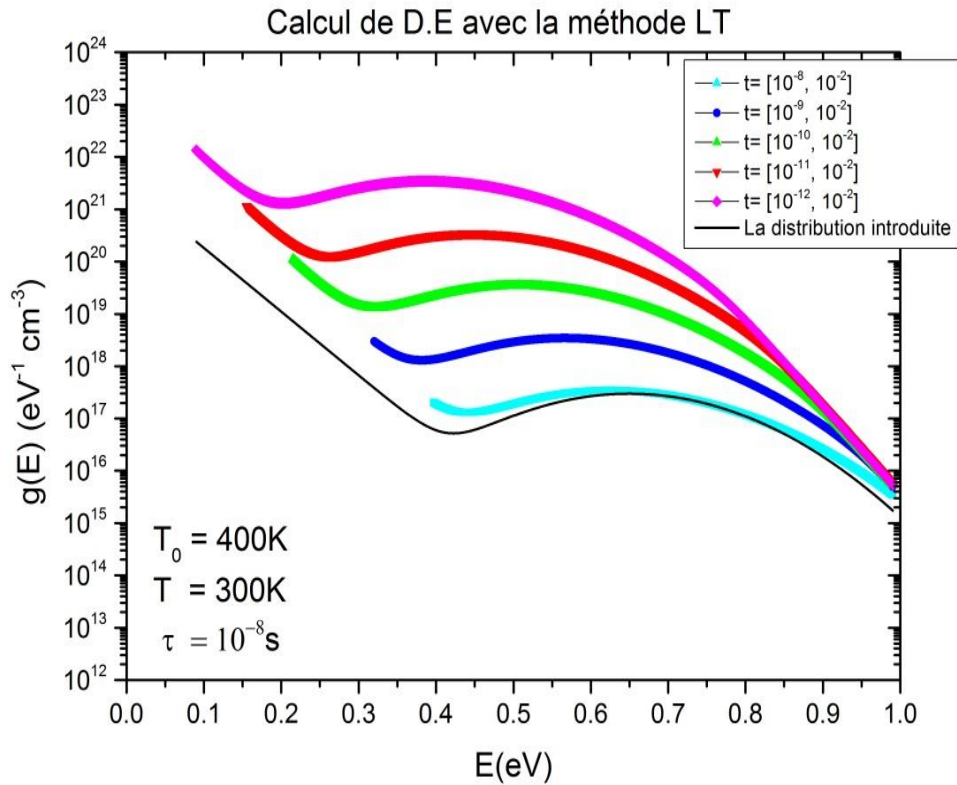
La Figure.2.8 montre les distributions des états localisés calculées à partir des photocourants transitoires de la Figure.2.2 pour trois temps de démarrage différents. On peut voir que les distributions calculées de la densité des états ne sont pas influencées par l'absence des données du photocourant à temps courts, mais la densité des états localisés calculée diminue avec l'augmentation du temps de démarrage.

La Figure.2.9 illustre la distribution de la densité d'états exposée par une distribution exponentielle des états localisés avec une température caractéristique  $T_0 = 400K$ , sur laquelle une distribution gaussienne a été superposée pour des temps de démarrage différents. Il est évident que, lorsque les données du photocourant avant la chute abrupte sont perdues, la distribution gaussienne n'est pas détectée du tout. Au lieu de cela, la méthode (LT) reproduit seulement la répartition des états localisés exponentielle.

Pour cette raison, lorsqu'on calcule une répartition des états localisés inconnue par la méthode de la transformée de Laplace, le temps de démarrage de l'intégration numérique doit être aussi court que possible. En outre, la distribution des états localisés doit être mesurée à des températures différentes; par exemple l'analyse du photocourant transitoire de  $10^{-9}$  à 1s donne une répartition des états localisés qui s'étalent sur une gamme d'énergie de  $(0.24 - 0.96)eV$  et de  $(0.12 - 0.48)eV$  pour des températures de 400K et 200K respectivement.



**Figure 2.8:** La densité des états localisés calculée par la méthode (LT) à partir des données complètes et tronquées du photocourant (TPC) de la Figure (2.2).



**Figure 2.9:** La densité des états localisés calculée par la méthode (LT) à partir des données complètes et tronquées du photocourant (TPC) de la Figure (2.4).

### 2-5-5 L'influence de la durée de vie de recombinaison sur les distributions des états localisés calculées

Un photocourant transitoire calculé, pour différentes valeurs de  $\tau$ , et pour des distributions représentatifs des états localisés appropriées aux semi-conducteurs amorphes, qui sont une distribution exponentielle seule et une distribution gaussienne superposée sur une distribution exponentielle. Les photocourants simulés sont obtenus numériquement, en résolvant les équations de base pour une distribution des états localisés décrite par les équations (2.28) et (2.29) par la technique d'une transformée inverse de Laplace. La transformée inverse de Laplace est déduite numériquement à partir des équations (2.32) et (2.33), en utilisant l'approximation de Padé (une approximation rationnelle avec des polynômes de 8- 2 degré). Les grandeurs physiques utilisées dans la simulation sont:

$$g_0 = 10^{21} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}, T_0 = 500K, g_G = 10^{19} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}, E_G = 0.4eV \text{ et } E_w = 0.06eV.$$

La Figure.2.10 montre les photocourants calculés pour des valeurs différentes de  $\tau$  pour une distribution exponentielle des états localisés, exprimée par l'équation (2.28) avec une température caractéristique  $T_0 = 500 K$ . Les durées de vie de recombinaison, qui sont déterminées à partir des points d'inflexions dans les photocourants transitoires, augmentent avec  $\tau$ . La Figure.2.11 représente les distributions des états localisés calculées selon la méthode (LT), à partir de l'équation (2.18). Il est évident que ces distributions calculées sont en excellent accord avec la distribution originale quelle que soit  $\tau$ .

La Figure.2.12 montre un ensemble de courbes du photocourant simulé à différentes valeurs de  $\tau$  pour une représentation exponentielle des états localisés, superposée d'une distribution gaussienne. La Figure.2.13 montre la densité d'états extraites du courant calculé dans la Figure.2.12 déterminée par le biais de la méthode (LT), selon l'équation (2.18) pour trois valeurs différentes de  $\tau$ , lorsque la distribution initiale est une queue exponentielle superposée d'une distribution gaussienne donnée par l'équation (2.29).

A partir de cette dernière Figure, nous pouvons observer que, les photocourants transitoires calculés à différentes valeurs de  $\tau$  n'affectent pas la densité d'états calculée, et la position énergétique du défaut représenté par la distribution gaussienne. Cependant, la densité d'états supposée est plus abrupte que la pente  $1/k_B T$  dans la région énergétique située entre  $(0.5 - 0.7) eV$ . Donc l'écart  $k_B T$  causé par la fonction d'approximation  $\delta$  donne une densité arbitraire avec une pente de  $1/k_B T$ . Cela signifie que la méthode est correcte seulement pour les structures de la densité d'états avec une pente supérieure à  $1/k_B T$ .

Nous soulignons que la méthode utilisée dans ce travail, nous permet de calculer la distribution des états localisés dans les semi-conducteurs amorphes à partir des données de la photoconductivité transitoire, à condition de satisfaire les conditions mentionnées ci-dessus.

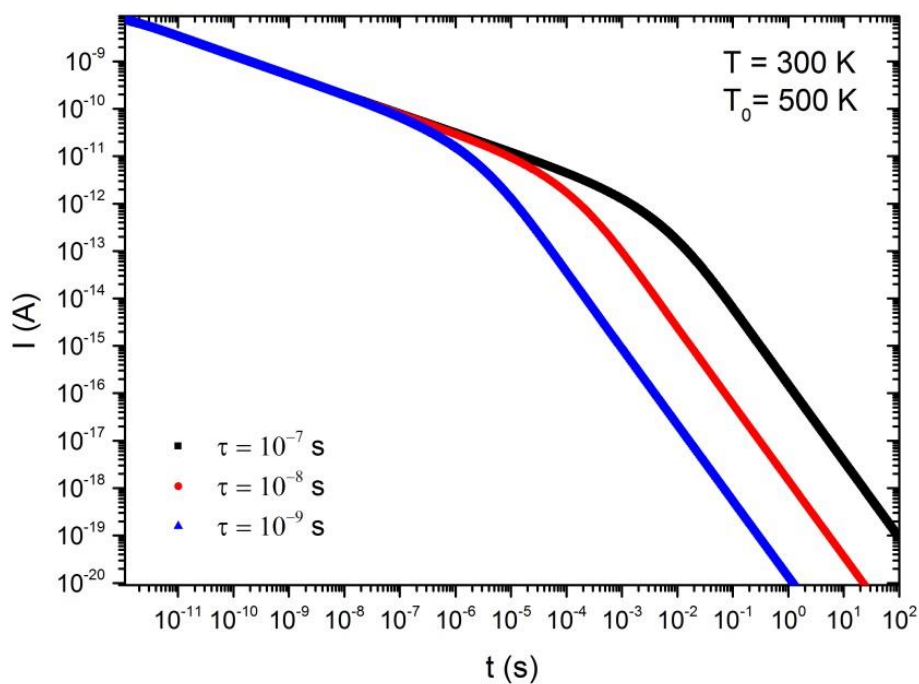


Figure 2.10: Le photocourant transitoire (TPC) simulé pour une distribution exponentielle des états localisés avec une température caractéristique  $T_0=500K$  à différentes valeurs  $\tau$ .

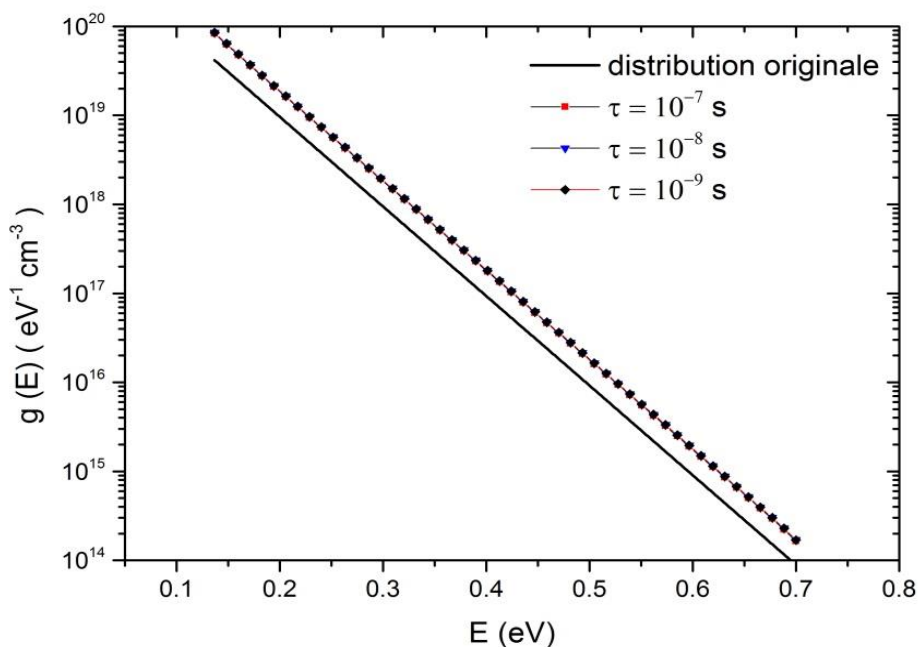


Figure 2.11: La densité des états localisés calculée par la méthode (LT) à partir du photocourant (TPC) de la Figure (2.10).

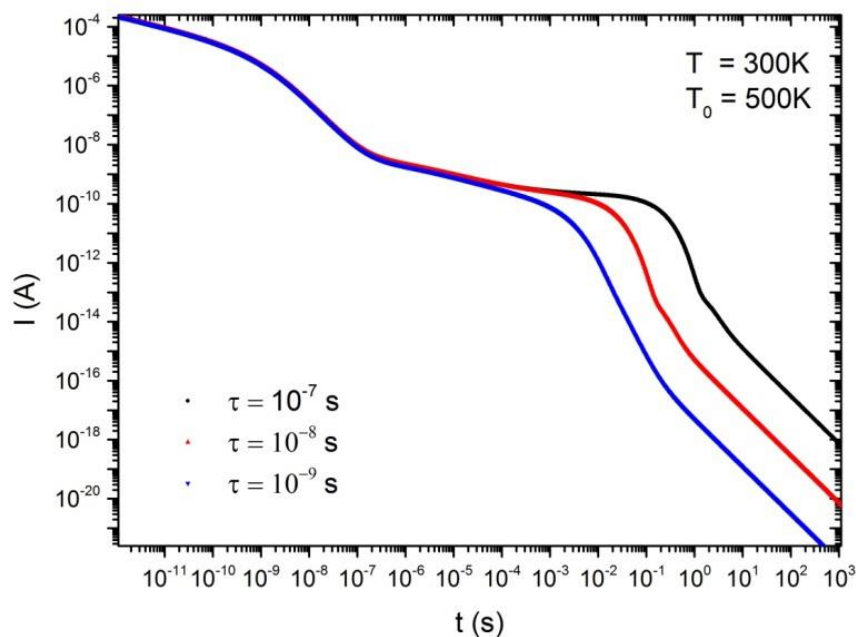


Figure 2.12: Le photocourant transitoire (TPC) simulé pour une distribution exponentielle des états localisés avec une température caractéristique  $T_0=500K$ , superposée d'une distribution gaussienne à différentes valeurs  $\tau$ .

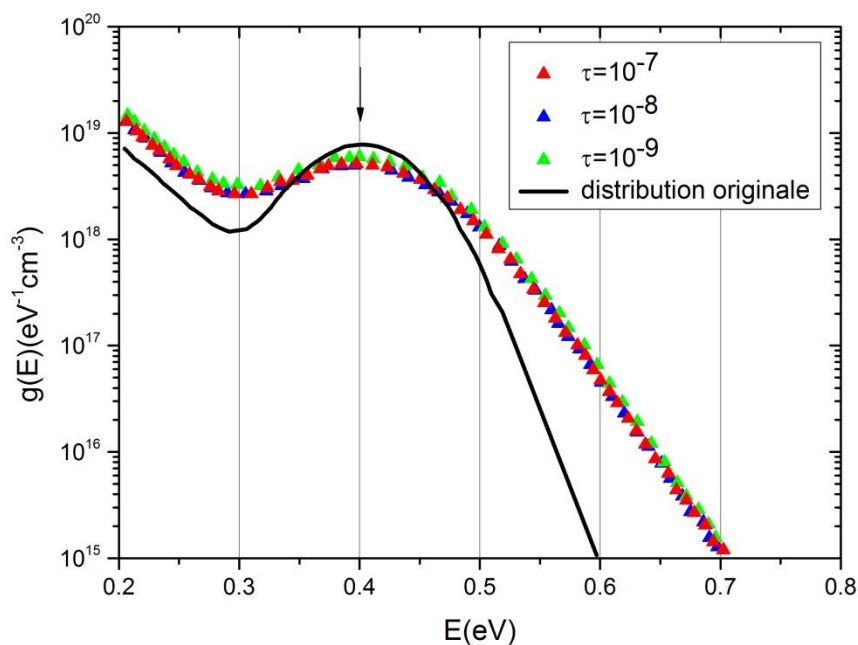


Figure 2.13: La densité des états localisés calculée par la méthode (LT) à partir du photocourant (TPC) de la Figure (2.12).

## 2-6 Amélioration de la résolution en énergie par l'application de la méthode (HLT)

Pour éliminer les écarts entre les distributions calculées et les distributions initiales en terme d'amélioré la résolution en énergie des distributions des états localisés, nous avons appliqué la méthode de la transformée de Laplace à haute résolution au photocourant transitoire des Figures.2.2 et 2.4. Les différents résultats obtenus sont les suivants :

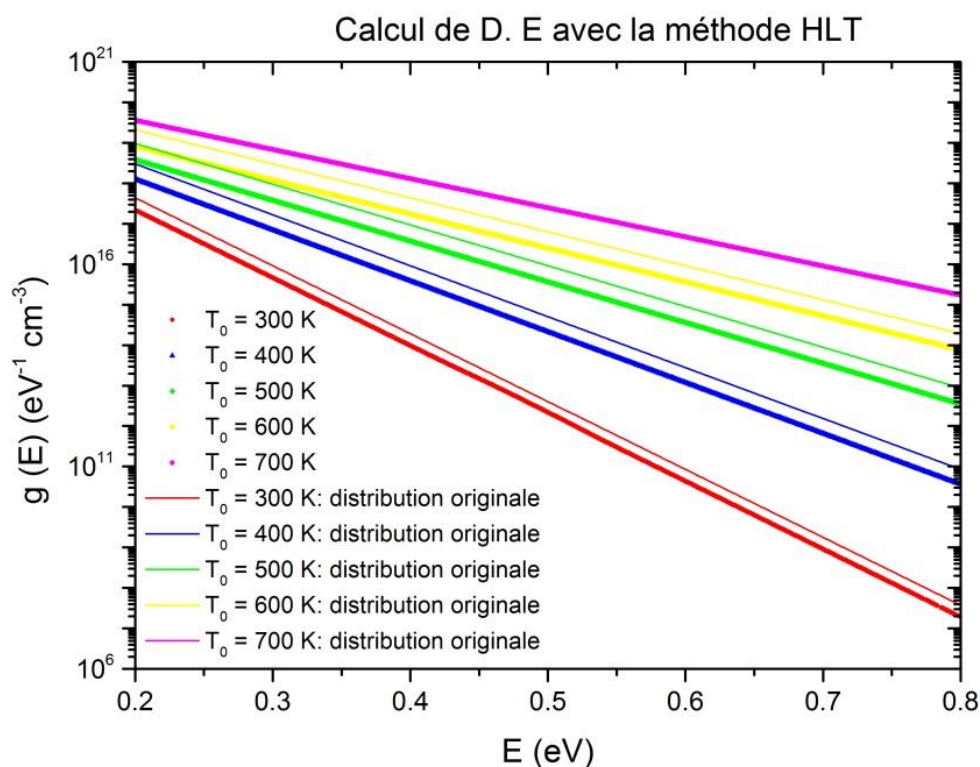


Figure 2.14: La densité des états localisés calculée par la méthode (HLT) à partir du photocourant (TPC) de la Figure (2.2).

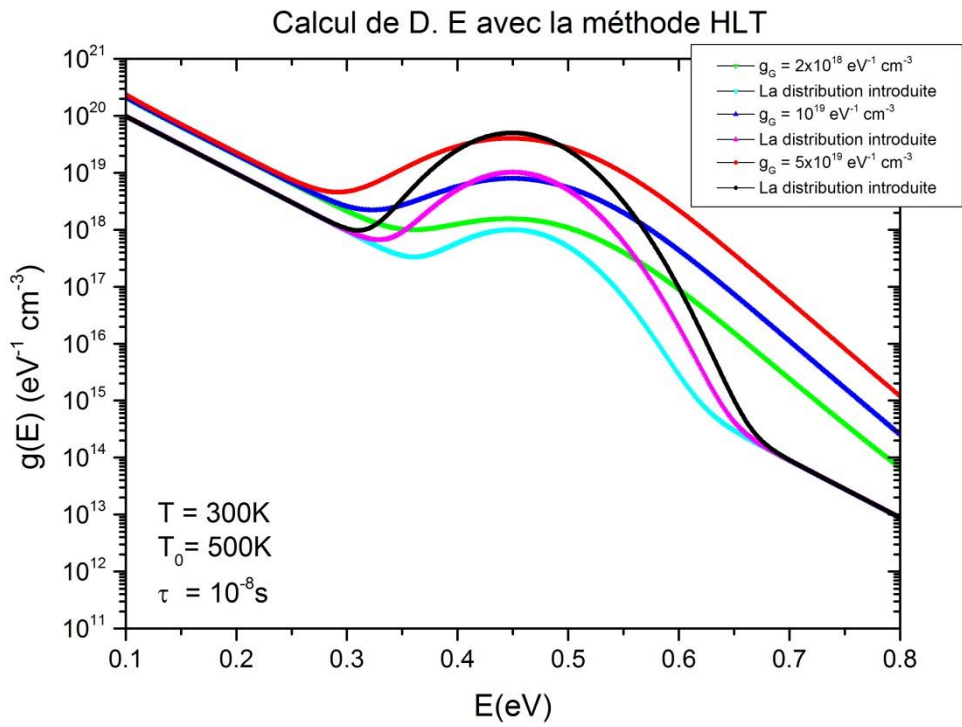


Figure 2.15: La densité des états localisés calculée par la méthode (HLT) à partir du photocourant (TPC) de la Figure (2.4).

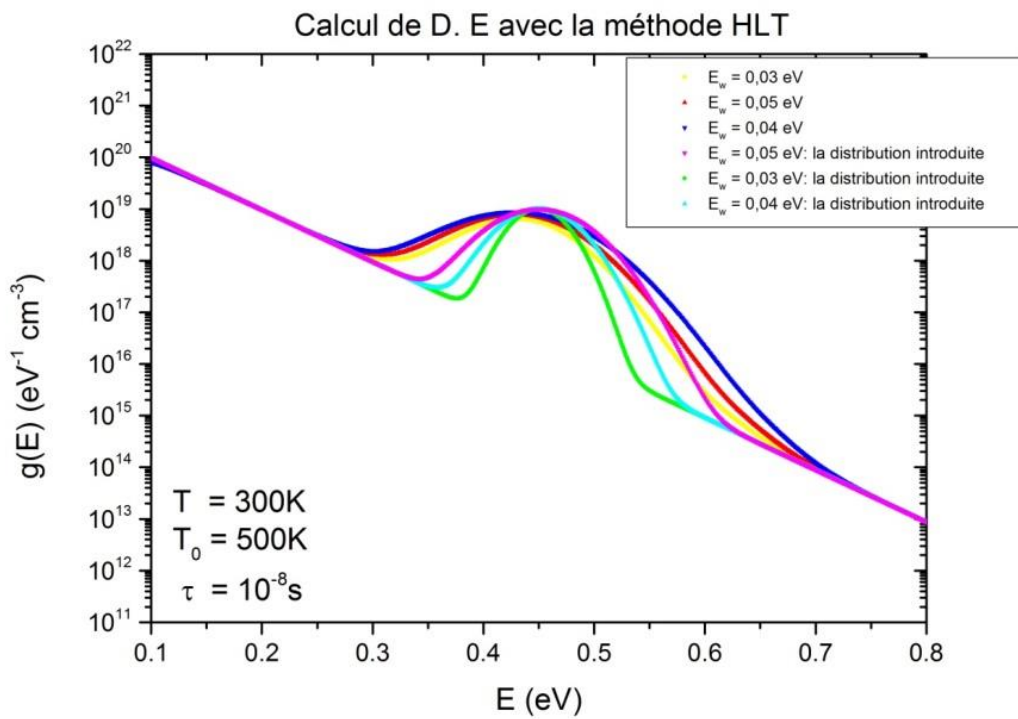
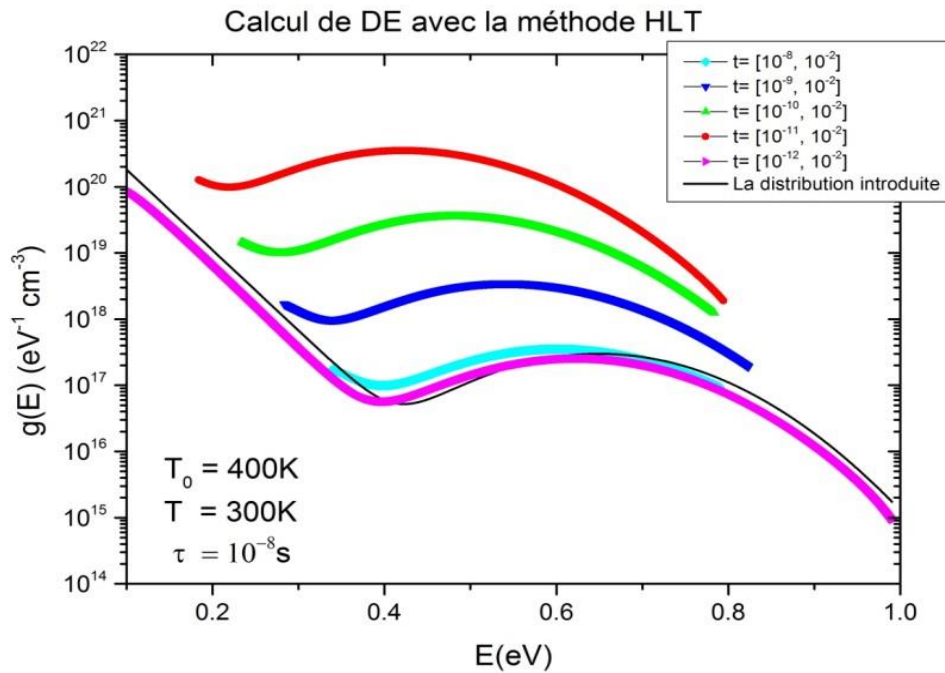


Figure 2.16: La densité des états localisés calculé par la méthode (HLT) à partir du photocourant (TPC) de la Figure (2.6).



**Figure 2.17:** La densité des états localisés calculée par la méthode (HLT) à partir des données complètes et tronquées du photocourant (TPC) de la Figure (2.4).

Nous avons développé et examiné la détermination de la distribution de la densité d'états  $g(E)$ , dans les semi-conducteurs amorphes à l'aide des calculs précis par la méthode de la transformée de Laplace à haute résolution (HLT). Haute précision de résolution en énergie est perceptible. Cette méthode a été testée en l'appliquant à des données simulées de (TPC). Elle recouvre la densité d'états proposée dans le cas d'une distribution exponentielle seule ou superposée d'une gaussienne.

Contrairement à la méthode (LT), la méthode de la transformée de Laplace à haute résolution (HLT) reproduit correctement les vrais distributions exponentielles comme le montre la Figure.2.14. La méthode (HLT) donne des résultats plus fiables dans le cas d'une distribution des états localisés composée d'une distribution exponentielle, superposée d'une distribution gaussienne. La raison de l'amélioration de la résolution en énergie par l'application de la méthode (HLT), est que la largeur de la distribution énergétique du noyau intégral dans l'équation (2.14) est plus étroite que celle de la méthode de la transformée de Laplace de la photoconductivité transitoire (LT TPC).

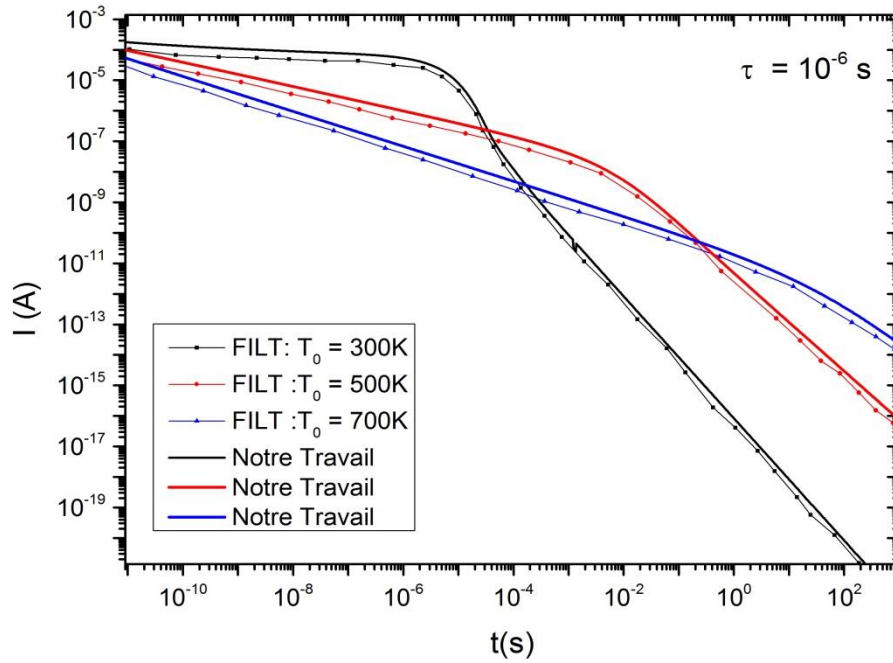
L'analyse par la méthode de la transformée de Laplace à haute résolution (HLT), donne la même précision que celle de l'inversion numérique de l'équation (2.6) en utilisant la régularisation de Tikhonov [81].

## **2-7 Comparaison avec d'autres méthodes**

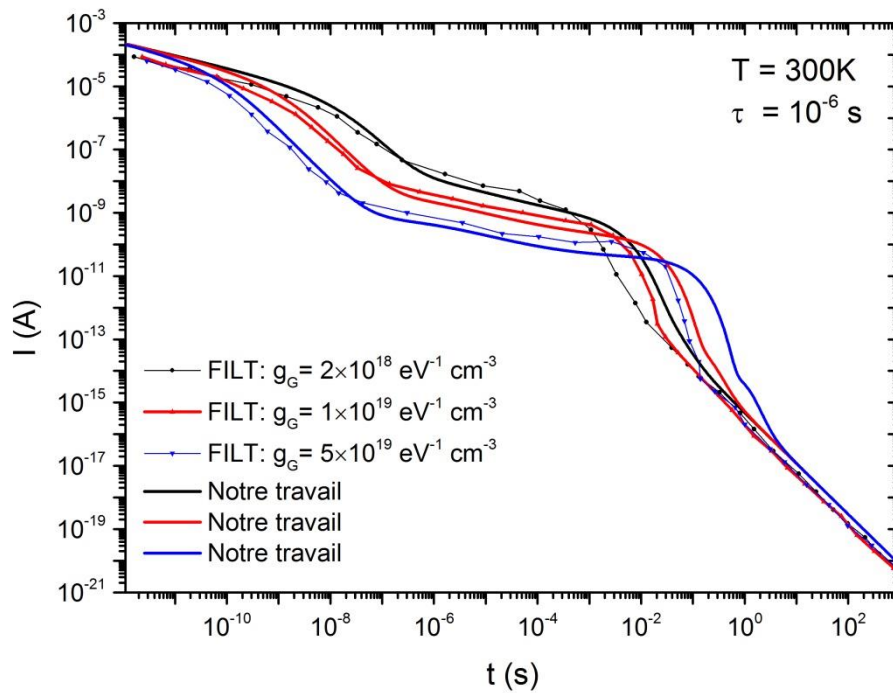
La simulation numérique est un grand défi en raison de la complexité des problèmes réalistes, elle est aussi un moyen puissant d'investigation des phénomènes physiques, parallèle et complémentaire aux approches théoriques et expérimentales. Elle permet d'obtenir des informations détaillées sur des systèmes complexes, devant lesquels les méthodes de calcul analytiques sont impuissantes, et permet aussi d'accéder à des grandeurs souvent inaccessibles à l'expérience.

Dans les sections antérieures nous avons développé les principes théoriques et pratiques de notre approche utilisée dans le calcul de l'inverse de Laplace. Pour la méthode de Fourier ou de Laplace les transformations sont des intégrales infinies, et la transformation inverse est une intégrale par rapport à la fréquence. Dans la pratique, ces intégrales infinies sont évaluées numériquement comme sommes finies. Les sommes sont réalisées par pas de fréquence d'échantillonnage et le temps de calcul peut être très grand. Donc, afin d'accélérer les calculs des techniques de transformée plus rapide doivent être utilisées. De nombreux algorithmes pour le calcul numérique de la transformée inverse de Laplace se trouvent dans la littérature. L'algorithme développé par Hosono [75] a été sélectionnée pour sa précision, l'efficacité et la facilité de la mise en œuvre. Des détails sur son approche numérique (abrégée FILT) pour le calcul de l'inverse de Laplace sont disponibles dans la référence [75].

La validation de notre approche utilisée dans cette étude a été réalisée en comparant nos résultats avec ceux réalisés avec le programme (FILT), souvent utilisés par le groupe de Naito [55]. Les résultats sont reportés sur les Figures.2.18 et 2.19, ces dernières montrent une grande concordance entre les deux approches. Notre algorithme peut alors être employé dans le cas des données expérimentales, la partie prochaine de ce travail.



**Figure 2.18:** Comparaison entre le courant simulé dans notre travail et celui obtenu par la méthode dite (FILT) : cas d'une distribution exponentielle.



**Figure 2.19:** Comparaison entre le courant simulé dans notre travail et celui obtenu par la méthode dite (FILT) : cas d'une distribution exponentielle plus gaussienne.

## **2-8 Conclusion**

Dans ce chapitre, Nous avons développé un algorithme de simulation pour étudier la réponse phototransitoire dans les semi-conducteurs amorphes, qui permet de simuler une densité des états localisés sans une forme préalable. Des (TPC) générés par simulation numérique, par l'intermédiaire des profils des densités d'états ainsi obtenus, ont permis de reconstituer fidèlement les densités introduites avec un changement dans les différents paramètres pour voir l'influence de ces derniers.

Les calculs témoignent des avantages de la méthode (LT) qui peut être appliquée à la fois dans les deux régimes avant et après la recombinaison de la photoconductivité transitoire, et à des semi-conducteurs amorphes présentant soit un transport dispersif ou non dispersif. Nous avons démontré l'amélioration de la résolution en énergie par l'application de la méthode (HLT) en utilisant les données de la photoconductivité transitoire, générés par simulation numérique pour des distributions types d'états localisés appropriées pour les semi-conducteurs amorphes. Nous avons trouvé à partir de la simulation numérique que la méthode (HLT) donne des distributions des états localisés plus exacts en cas des distributions de queue continu à partir d'un seuil de mobilité qui ont souvent été rapportés dans les semi-conducteurs amorphes. La méthode (LT) fonctionne toujours correctement dans le cas, où la température caractéristique de la queue de bande exponentielle est supérieure à la température de mesure.

# Chapitre 3

## Application de la méthode de la transformée de Laplace dans la simulation de la structure de la queue de bande de valence dans le sélénium amorphe

---

L'objectif initialement visé par ce travail de recherche étant de calculer la densité des états localisés dans la bande interdite des semi-conducteurs amorphes, ce travail s'inscrit parfaitement dans le cadre des recherches menées par notre groupe puisqu'il se propose d'apporter un nouvel outil, permettant d'observer et de comprendre les processus à l'origine des limitations des performances de la conduction électrique dans ces matériaux, notamment les mécanismes liés au piégeage des porteurs libres.

La méthode développée basée sur l'utilisation de l'approche de Naito [36], doit en effet permettre d'effectuer une mesure de la densité d'états à partir des mesures de la photoconductivité transitoire, où nous avons présenté et discuté les résultats obtenus grâce à la technique de la transformée de Laplace dans le chapitre précédent.

Dans le but d'en tester la validité de cette méthode et d'entrevoir ses potentialités, des matériaux ont fait l'objet de mesure au cours de ce chapitre. Notre discussion se restreindra cependant à deux groupes de matériaux distincts [53], pour lesquels les résultats obtenus sont les plus complets et les plus significatifs, de notre point de vue, à cause de la présence des résultats expérimentaux, et ce pour garantir la prise en compte des particularités spécifiques de chaque échantillon. Nous exposons les résultats de la simulation numérique concernant la photoconductivité transitoire, et nous comparons les résultats obtenus par la simulation avec les mesures expérimentales existantes dans la littérature. Les interprétations des résultats qui y

sont proposées font nécessairement appel à des données complémentaires concernant les matériaux étudiés.

### 3-1 Simulation numérique de la densité d'états dans Le sélénium amorphe pur

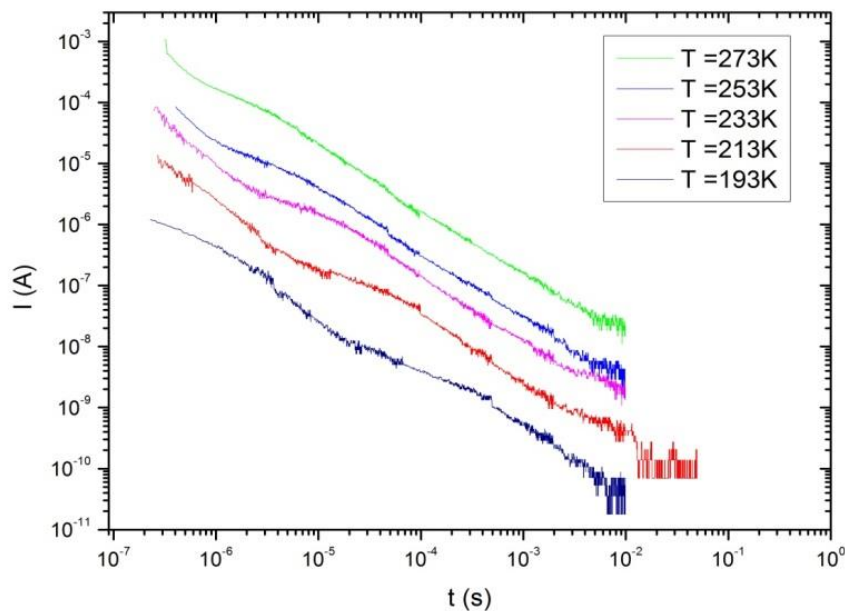
Dans cette section, nous étudions par simulation numérique, la photoréponse transitoire des films à base de sélénium amorphe à travers une configuration coplanaire, étudiée par la technique de caractérisation de la photoconductivité transitoire (TPC). Cette technique nous permet de simuler la densité d'états en fonction de l'énergie à différentes températures.

La densité des états dans le gap obtenue par simulation numérique est calculée dans le cadre du modèle de piégeage multiple. Sur la Figure.3.1 est reportée les résultats expérimentaux du photocourant transitoire [53] d'un échantillon coplanaire de sélénium amorphe, généralement abrégé (a-Se), d'épaisseur 15  $\mu\text{m}$  sous une tension de 200 V et une excitation optique pulsé de longueur d'onde  $\lambda = 400\text{nm}$ . La durée de l'impulsion lumineuse est de l'ordre de 5 ns. Les résultats sont représentés en échelle log-log.

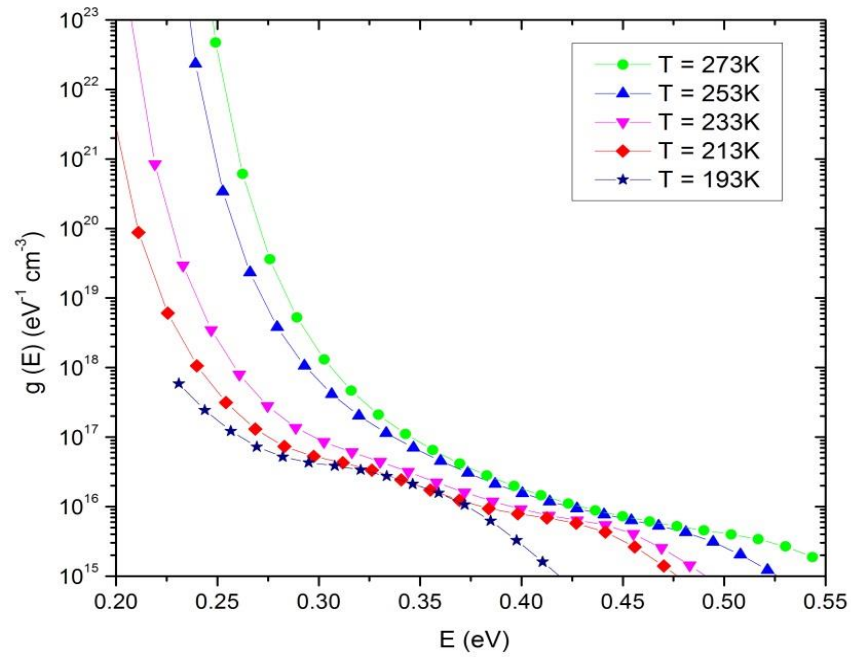
Etant donné que les trous sont d'environ 30 fois plus mobiles que les électrons dans le sélénium amorphe pur (a-Se) [82], ils domineront le signal de la photoconductivité transitoire (TPC). Alors, le photocourant transitoire est dû principalement au transport des trous, et l'analyse de la méthode nous permet donc d'explorer une distribution des états localisés ci-dessus de la bande de valence  $E_V$ . En d'autre terme elle renseigne sur la distribution de la queue de bande de valence. Pour obtenir des informations similaires sur la densité d'états  $g(E)$  du côté de la bande de conduction, un photocourant dominé par les électrons doit être généré. Ceci peut être obtenu à travers l'expérience du temps de vol (TOF).

Puisque le photocourant transitoire a été mesuré dans la condition des courts signaux [53], les équations (2.15) et (2.18) dérivées de la méthode de la transformée de Laplace (LT) dans le cadre du mécanisme de piégeage multiple, peuvent être appliquées pour la détermination de la distribution des états localisés dans le sélénium amorphe (a-Se). Dans le calcul l'échelle de l'énergie est définie par  $E = K_B T \ln(\nu/s)$  et on utilise une fréquence de tentative d'échappement  $\nu = 10^{12}\text{s}^{-1}$ . La Figure.3.2 présente les profils de notre modèle de densité d'états  $g(E)$  qui sont générés par la simulation numérique de la photoconductivité

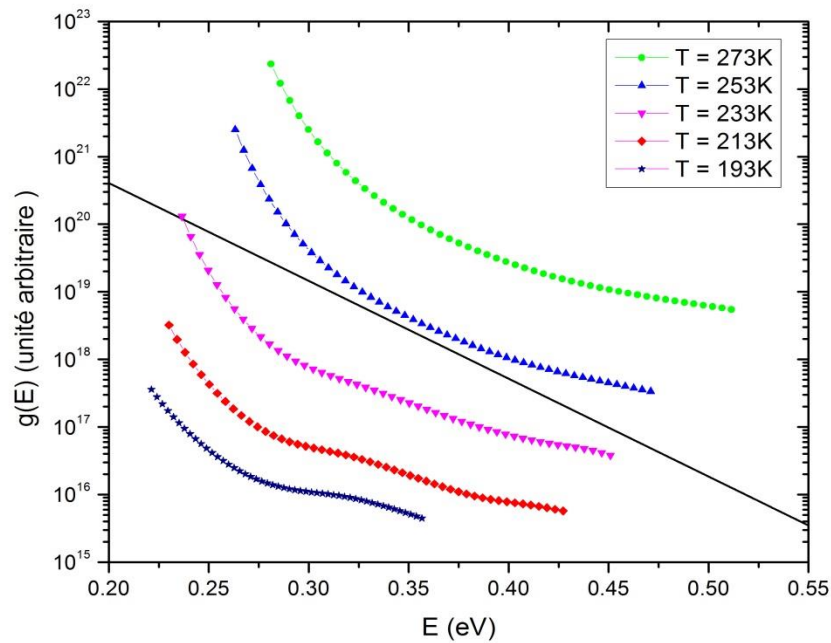
transitoire de la Figure.3.1, pour les différentes températures situées dans l'intervalle  $[193 - 273]K$  avec un pas de 20 K. D'après cette Figure, nous pouvons constater que la densité d'états ne décroît pas d'une façon continue à partir du bord de la bande de valence  $E_V$ . La densité d'états dans le gap du sélénium amorphe dans l'intervalle de l'énergie  $(0.2 - 0.55)eV$ , est caractérisée par une distribution exponentielle superposée de deux distributions gaussiennes. Pour plus de clarté, les courbes individuelles de la Figure.3.2 ont été séparées verticalement comme le montre la Figure.3.3. La ligne en continue est un fond exponentielle avec une pente de  $1/k_B T_0$ , où  $T_0 = 350 K$ . Cette ligne est utilisée pour guider l'œil. La déviation de la structure de la densité des états  $g(E)$  simulée dans le gap du sélénium amorphe pur par rapport à la distribution exponentielle représentée par la ligne droite dans la même Figure, peut être considérée comme une signature d'un défaut profond situé autour de  $(0.45 - 0.5)eV$ . À basse température et dans les mêmes profils, on peut voir aussi une bosse près de  $0.3eV$  au-dessus du bord de la bande de valence qui peut être aussi une signature d'un niveau de défaut peu profond.



**Figure 3.1:** Le photocourant transitoire expérimental (TPC) dans le sélénium amorphe pur à différentes températures [53].



**Figure 3.2:** Reconstruction de la densité d'états dans (a-Se) à partir de la simulation de (TPC) de la Figure (3.1). Les différents symboles correspondent à la densité d'états à une température donnée.



**Figure 3.3:** La densité d'états dans (a-Se) calculée à partir des données expérimentales du photocourant transitoire de Benkhedir et al [53]. Pour plus de clarté, les courbes individuelles ont été décalées verticalement. La ligne en continue est un fond exponentiel avec une pente de  $1/k_B T_0$  dont  $T_0 = 350\text{K}$ . Cette ligne consiste à guider l'œil.

## **3-2 Simulation numérique de la densité d'états dans le sélénium amorphe dopé par l'arsenic**

Le sélénium amorphe (a-Se) est doté d'un certain nombre de propriétés physiques remarquables, rendant ce matériau attractif pour une variété d'applications dans les dispositifs. Traditionnellement, (a-Se) a été employé dans la xérographie, et plus récemment Il y a eu un regain d'intérêt pour le sélénium amorphe (a-Se) en raison de son utilisation comme un photoconducteur à rayon X dans les détecteurs d'imagerie médicale [83].

Le sélénium amorphe pur n'est pas très stable, et se cristallise facilement dans les conditions ambiantes, car il a une faible température de transition d'environ  $40\text{ C}^0$ . Pour contourner ce problème, un (a-Se), qui contient (0.2-0.5) at.% As, qui est plus stable est utilisé à la place. Toutefois, le dopage de (a-Se) avec ces petites quantités d'arsenic a conduit à une diminution indésirable de la durée de vie des trous [84]. Cet effet défavorable pourrait être médié par l'addition de 10 à 20 ppm de chlore [85-86].

Les détecteurs de rayons X à écran plat basé sur le sélénium amorphe reportés dans plusieurs conférences, sont maintenant à un stade qui peut fournir d'excellentes images, et sont employés dans diverses applications d'imagerie à rayons X dans le domaine médical. La couche photoconductrice est appelée le sélénium amorphe stabilisé, car il est dopé avec 0.2-0.5 at% As. Les expériences indiquent que l'ajout de l'arsenic empêche la structure de la cristallisation mais ce dopage entraîne une diminution dans la durée de vie des trous.

Dans la littérature, on attribue généralement la diminution de la durée de vie des trous à un nouveau piège de trous introduit par l'ajout des petites quantités de As [87]. Néanmoins, aucune preuve expérimentale de l'existence actuelle de ce piège des trous, et aucune information n'est disponible sur les changements précis de la densité des états localisés qui réduit la durée de vie des trous dans le sélénium amorphe dopé avec l'arsenic.

Bien que le sélénium amorphe stabilisé est maintenant un photoconducteur à rayon X bien établi, il y a de nombreux aspects scientifiques du matériau qui n'ont pas été résolus tel que la diminution de la durée de vie expliqué par l'introduction d'un nouveau piège de trous. Notre contribution est une analyse critique de nombreux aspects scientifiques des travaux qui n'ont pas été résolus. Dans la section suivante, nous examinons les différentes propriétés discutées plus haut on identifions et discutons ces études expérimentales par des études théoriques, à travers l'exploitation de la densité d'états à la fois dans le sélénium pur et dopé

par l'arsenic pour voir les changements dans la distribution de la densité d'états, et nous essayons d'arriver à une explication motivée de la diminution de la durée de vie des trous.

### 3-2-1 Procédure expérimentale

Pour notre étude, les échantillons de sélénium amorphe dopé avec 0.2 at% et 0.5 at% d'arsenic, les mesures du photocourant transitoire à partir de la technique de (TPC) ont été effectuées au sein du laboratoire voor Halfgeleiderfysic de l'université de Leuven.

Dans ce paragraphe, nous fournissons quelques détails sur la méthode de mesure des photocourants des deux matériaux qui font l'objet de ce travail. Si le lecteur désire acquérir une connaissance plus profonde de la méthode et plus de détails sur les techniques expérimentales et l'instrumentation, il est donc invité à consulter les travaux fournis dans les références suivantes [44,51]. La photoconductivité transitoire a été utilisée sur des échantillons de (a-Se) d'épaisseur  $(10 - 20) \mu m$  dopé avec 0.2 at% et 0.5 at% d'arsenic dans une configuration coplanaire. Un LASER d'azote pulsé fournit un flash de lumière des nanosecondes pour les expériences transitoires. Des photocourants transitoires représentatifs générés par l'application d'une tension de 230V à différentes températures, sont illustrés sur la Figure.3.4. Un ensemble de traces du photocourant transitoire mesuré sur un échantillon de sélénium amorphe dopé avec 0.5 at% d'arsenic, avec une tension de 100 V appliquée, à différentes températures, est représenté sur la Figure.3.5. Ces traces sont différentes de celles mesurées sur des échantillons dopés avec 0.2 at% As ou ceux non dopés [88].

Utilisant ces mesures dans le formalisme de la transformée de Laplace, la densité représentative des états localisés des deux échantillons calculée à partir des données du photocourant mesuré à différentes températures des Figures.3.4 et 3.5, et par le biais de l'équation (2.18) est représentée sur les Figures.3.6 et 3.8 respectivement. Pour plus de clarté, les courbes individuelles des Figures.3.6 et 3.8 ont été séparées verticalement comme le montre les Figures.3.7 et 3.9. Dans cette dernière représentation semi-logarithmique, nous pouvons facilement voir un pic dans la distribution de la densité d'états  $g(E)$  situé autour de 0.45 eV à toutes les températures pour les échantillons dopés avec 0.2 at% As. Un état de défaut similaire est observé dans les échantillons de (a-Se) dopé avec 0.5 at% As, dont la position énergétique est indépendante de la température.

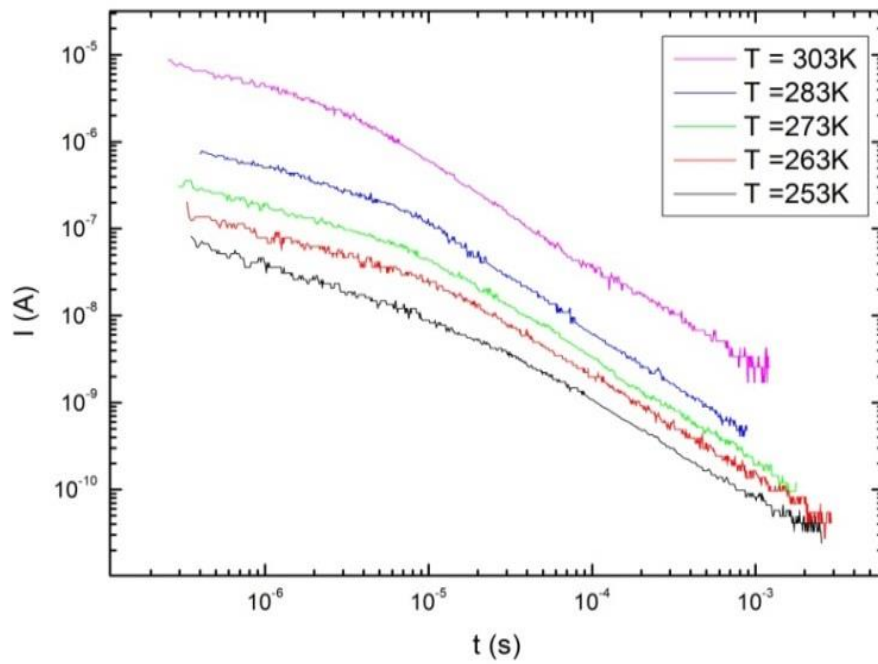


Figure 3.4: Le photocourant transitoire expérimental (TPC) dans le sélénium amorphe dopé avec 0.2 at % d'arsenic à différente température [88].

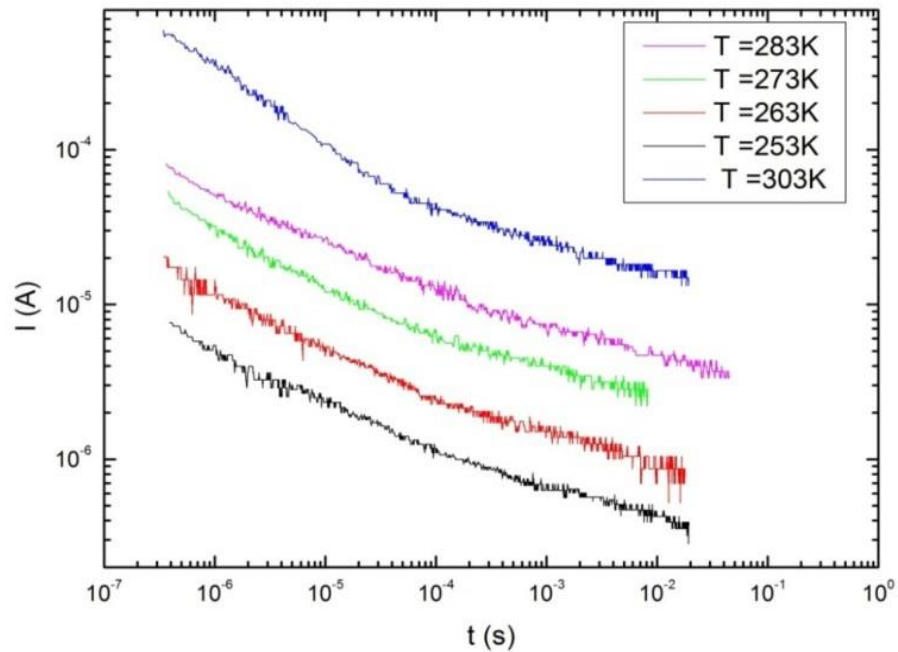
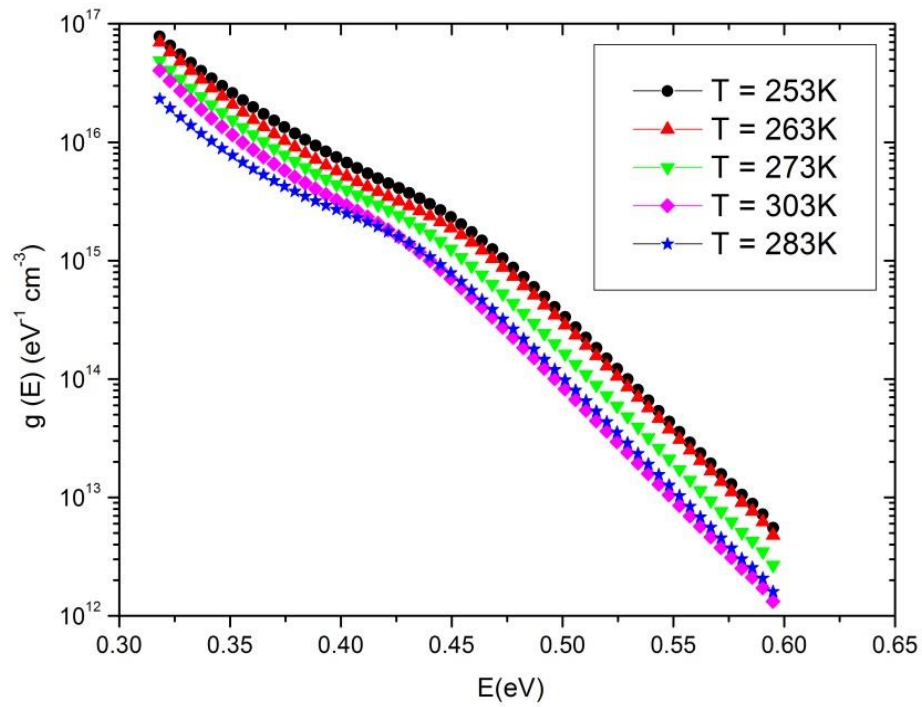
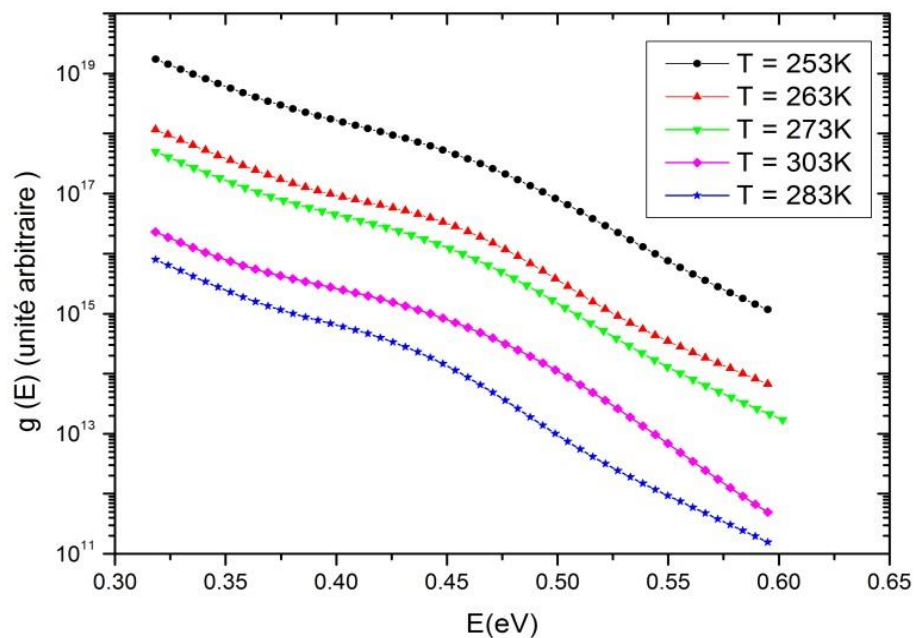


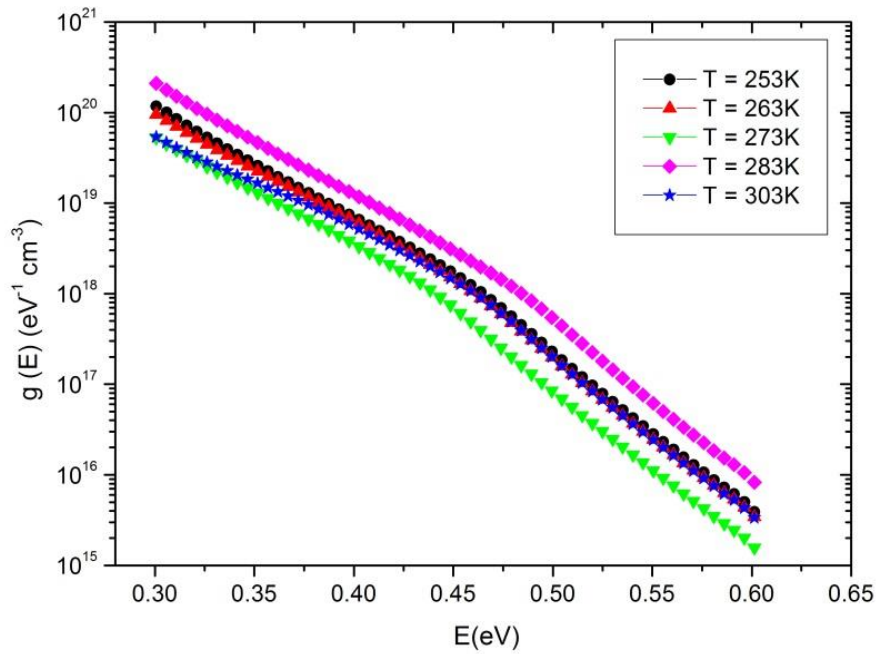
Figure 3.5: Le photocourant transitoire expérimental (TPC) dans le sélénium amorphe dopé avec 0.5at% d'arsenic à différente température [88].



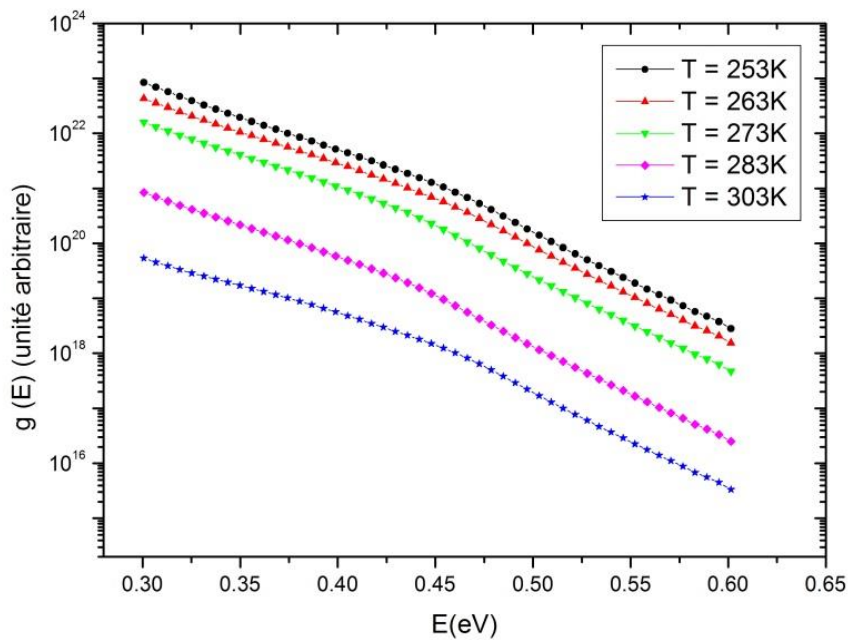
**Figure 3.6:** Reconstruction de la densité d'états dans *a*-Se :0.2 at% As à partir de la simulation de (TPC) de la Figure (3.4). Les différents symboles correspondent à la densité des états à une température donnée.



**Figure 3.7:** La densité d'états dans *a*-Se: 0.2 at% As calculée à partir des données expérimentales du photocourant transitoire de Benkhedir et al [88]. Pour plus de clarté, les courbes individuelles ont été décalées verticalement.



**Figure 3.8:** Reconstruction de la densité d'états dans *a*-Se: 0.5 at% As à partir de la simulation de (TPC) de la Figure (3.5). Les différents symboles correspondent à la densité d'états à une température donnée.



**Figure 3.9:** La densité d'états dans *a*-Se: 0.5 at% As calculée à partir des données expérimentales du photocourant transitoire de Benkhedir et al [88]. Pour plus de clarté, les courbes individuelles ont été décalées verticalement.

### 3-3 Modélisation de la densité d'états dans le sélénium amorphe stabilisé

Afin d'avoir une forme analytique avec des paramètres connus de la densité d'états  $g(E)$  pour les échantillons de sélénium amorphe dopé avec 0.2at% As et 0.5 at% As, nous avons ajusté la forme de notre densité d'états  $g(E)$ , extraite théoriquement des données expérimentales [88] par l'intermédiaire de la méthode de la transformée de Laplace de la photoconductivité transitoire (LT), utilisant la méthode des moindres carrés. Alors, nous mettons les profils de la densité d'états  $g(E)$  à différentes températures, des Figures.3.6 et 3.8, sous la forme analytique décrite par une queue exponentielle superposée d'une distribution gaussienne comme suit :

$$g(E) = g_0 \exp(-\beta E) + g_G \exp\left[-\left\{\frac{E - E_G}{E_w}\right\}^2\right], \quad (3.1)$$

où les paramètres en question sont  $g_0, g_G, E_G, \beta = 1/k_B T_0$  et  $E_w$ . Dans cette équation,  $g_0$  est la densité des états localisés à l'extrémité de la bande valence,  $T_0$  est la température caractéristique de la composante exponentielle et enfin  $g_G, E_G$  et  $E_w$  sont respectivement la densité, la position énergétique et la largeur de la distribution gaussienne. Le Tableau 3.1 rassemble, pour chaque échantillon les différents paramètres ajustés

Températures (K)	$\beta(eV^{-1})$		$g_0(eV^{-1}cm^{-3})$		$g_G(eV^{-1}cm^{-3})$		$E_G(eV)$		$E_w(eV)$	
	0.2 at %	0.5 at%	0.2 at%	0.5 at%	0.2 at%	0.5 at%	0.2 at%	0.5 at%	0.2 at%	0.5 at%
253	34.691	29.321	$4.994 \times 10^{21}$	$7.677 \times 10^{23}$	$2.699 \times 10^{15}$	$6.414 \times 10^{17}$	0.412	0.389	0.045	0.085
263	35.248	28.142	$4.995 \times 10^{21}$	$4.408 \times 10^{23}$	$1.877 \times 10^{15}$	$8.855 \times 10^{17}$	0.415	0.388	0.048	0.030
273	36.306	29.055	$4.983 \times 10^{21}$	$3.252 \times 10^{23}$	$1.829 \times 10^{15}$	$1.136 \times 10^{18}$	0.401	0.367	0.055	0.045
283	38.874	28.816	$9.580 \times 10^{21}$	$3.018 \times 10^{23}$	$1.515 \times 10^{15}$	$9.911 \times 10^{17}$	0.401	0.367	0.039	0.048
303	40.017	28.592	$8.629 \times 10^{21}$	$2.016 \times 10^{23}$	$1.823 \times 10^{15}$	$4.311 \times 10^{18}$	0.399	0.365	0.045	0.042
Valeurs moyennes du fit	<b>37.027</b> $\pm 2.310$	<b>28.785</b> $\pm 0.450$	<b><math>6.636 \times 10^{21}</math></b>	<b><math>4.074 \times 10^{23}</math></b>	<b><math>1.949 \times 10^{15}</math></b>	<b><math>1.593 \times 10^{18}</math></b>	<b>0.406</b> $\pm 0.038$	<b>0.375</b> $\pm 0.038$	<b>0.046</b> $\pm 0.005$	<b>0.045</b> $\pm 0.020$

**Tableau 3.1:** Les différents paramètres ajustés de notre modèle de densité d'états obtenus par la méthode des moindres carrés.

D'après le Tableau 3.1, la forme théorique de notre modèle de densité d'états pour la série des deux échantillons à différentes températures est donnée par les équations suivantes:

$$g(E)_{0.2at\%As} = 6.636 \times 10^{21} \exp(-37.027 E) + 1.949 \times 10^{15} \exp\left[-\left\{\frac{E - 0.406}{0.046}\right\}^2\right], \quad (3.2)$$

$$g(E)_{0.5at\%As} = 4.074 \times 10^{23} \exp(-28.785 E) + 1.593 \times 10^{18} \exp\left[-\left\{\frac{E - 0.375}{0.045}\right\}^2\right]. \quad (3.3)$$

Les résultats de la simulation réalisée à l'aide de notre programme, permettent de visualiser sur la Figure.3.10 les profils du modèle de la densité d'états généré pour les deux séries d'échantillons.

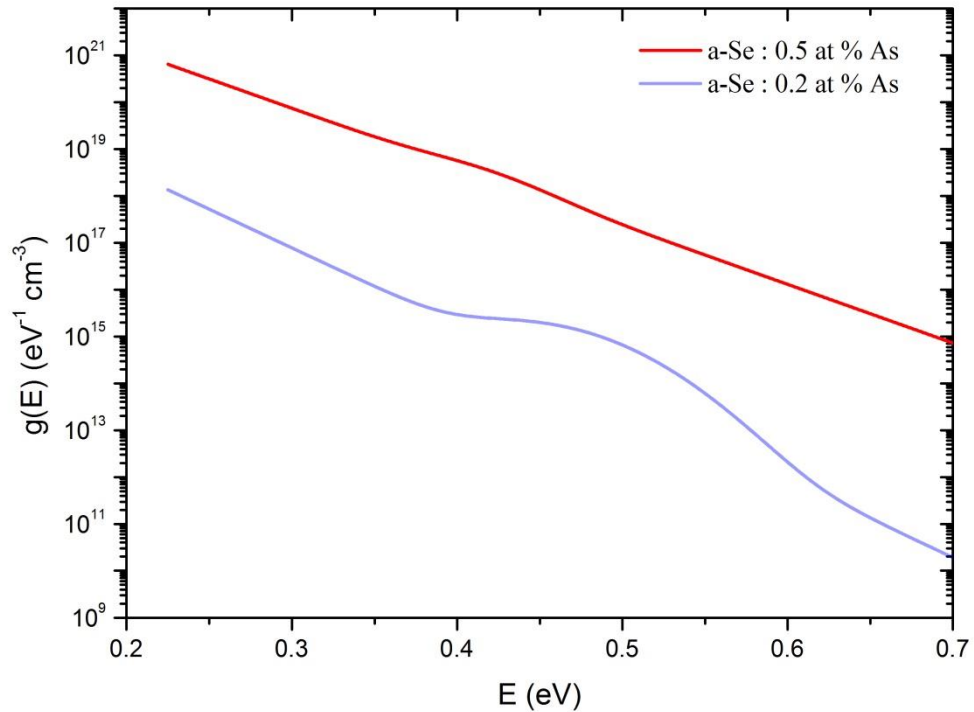


Figure 3.10: La densité d'états théorique dans a-Se dopé avec 0.2 at% et 0.5 at% As.

### **3-4 Simulation de la photoconductivité transitoire en configuration coplanaire dans le sélénium amorphe dopé avec l'arsenic**

Nous pensons donc mis en évidence expérimentalement et théoriquement, notre modèle de densité d'états dans la moitié inférieur du gap de sélénium amorphe dopé avec l'arsenic. On veut maintenant examiner la validité de notre modèle de densité d'états proposé dans cette étude, alors il faut tester la possibilité de reproduire les photocourants théoriquement et les comparer avec les photocourants mesurés expérimentalement, pour voir si cette densité reflète la réalité. Alors, on injecte les équations (3.2) et (3.3) dans l'équation (2.19) pour calculer la transformée de Laplace du courant. On peut voir que cette dernière équation demande la connaissance de la valeur de la durée de vie des porteurs libres, alors on procède premièrement au calcul de ce paramètre.

#### **3-4-1 Estimation numérique de la durée de vie des trous**

La durée de vie est un paramètre important dans la détermination des propriétés de transport des charges dans les semi-conducteurs amorphes parce qu'elle est liée directement à la sensibilité d'un photoconducteur, qui dépend de l'efficacité de collecter des charges, en relation directe avec leurs portées.

La mesure de la durée de vie des porteurs dans un échantillon semi-conducteur à partir de la décroissance des réponses de la photoconductivité transitoire, relève des techniques classiques et directes de mesures, bien adaptées au suivi de cette grandeur. Les valeurs de la durée de vie peuvent être extraites des expériences du temps de vol ou à champ interrompu [89]. Nous avons entrepris une recherche bibliographique, mais nous n'avons pas trouvé aucune information concernant cette valeur. Dans cette circonstance, on a essayé de solutionner ce problème par la simulation numérique de cette valeur. Après l'achèvement de nos calculs, une publication ultérieure concernant la mesure de cette grandeur entreprise par Kasap et ces collaborateurs, nous a fait confiance sur les valeurs simulées [90].

Le premier but de l'analyse qui suit est de mettre en relief quelles conditions sont par suite nécessaires pour atteindre les valeurs de la durée de vie, dans un échantillon donné, et selon les réponses de la photoconductivité transitoire. La méthode proposée dans cette section pour l'évaluation de la durée de vie se compose de deux étapes:

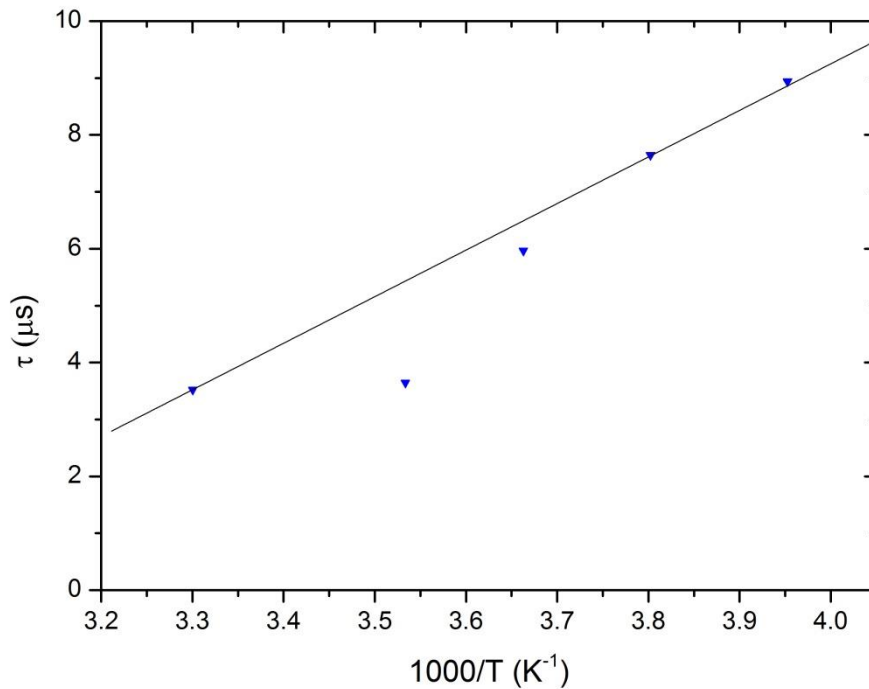
- premièrement, une distribution des états localisés est déterminée à partir des données de la photoconductivité transitoire par le biais de la méthode, basée sur la transformée de Laplace comme le montre la Figure.3.10.
- deuxièmement, on calcule La transformée de Laplace des photocourants transitoires pour chaque température en utilisant les équations (2.19) et (2.20).

Pour le traitement numérique de cette valeur, Nous avons confrontés les transformées de Laplace du courant calculées à partir des équations (2.19) et (2.20), à l'aide de la méthode des moindres carrés on fait un ajustement jusqu'à l'obtention d'un bon fit. Les valeurs de la durée de vie pour les échantillons précédents à différentes températures, montrent une indépendance du taux de dopage utilisé dans cette étude. L'accord entre l'expérimental et la théorie est satisfaisant, et donne les valeurs de la durée de vie pour les échantillons de (a-Se) dopé avec 0.2at% As et 0.5at% As récapitulé dans le Tableau suivant :

Température(K)	$\tau$ (S)	Fit
253	$8.94 \times 10^{-6}$	0.975
263	$7.645 \times 10^{-6}$	0.972
273	$5.963 \times 10^{-6}$	0.985
283	$3.646 \times 10^{-6}$	0.994
303	$3.523 \times 10^{-6}$	0.993

**Tableau 3.2 :** La durée de vie simulée dans le sélénium amorphe stabilisé par la méthode des moindres carrés.

Les résultats consignés sur la Figure.3.11 permettent de comparer les évolutions de la durée de vie, avec la température T comme paramètre. La forme générale observée expérimentalement [90] est bien reproduite par la courbe simulée.



**Figure 3.11:** La durée de vie des trous en fonction de l'inverse de la température dans le sélénium amorphe stabilisé.

### 3-4-2 Comparaison des valeurs calculées et mesurées de la photoconductivité transitoire dans les échantillons étudiés

Une fois nos structures de densité d'états sont mises en évidence, l'étape suivante consiste à analyser le photocourant transitoire. Dans cette dernière section, on utilise la fonction de la densité d'états extraite des données expérimentales de la photoconductivité transitoire prélevées sur les deux échantillons de sélénium amorphe dopé par l'arsenic, provenant du Laboratoire de voor Halfgeleiderfysica de l'université de Leuven, pour la reconstitution de la (TPC) par simulation numérique.

On procède premièrement au calcul des valeurs de  $I(s)$  obtenues par l'intégration numérique selon l'équation (2.19). Pour l'analyse exacte selon la méthode de la transformée de Laplace, on injecte dans cette expression les valeurs de la durée de vie simulées précédemment, et on utilise les densités d'états de la Figure.3.10.

Pour obtenir le photocourant théoriquement, on procède à l'inverse de Laplace de ces courant à l'aide de l'équation(2.33), dont on utilise notre algorithme basé sur l'approximation de Padé. Les photocourants générés sont représentés sur les Figures ci-dessous.

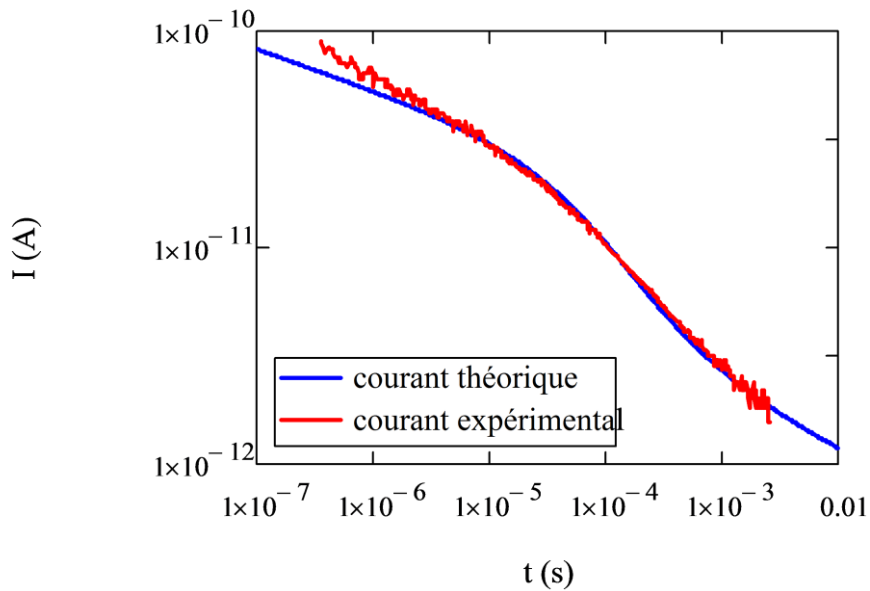
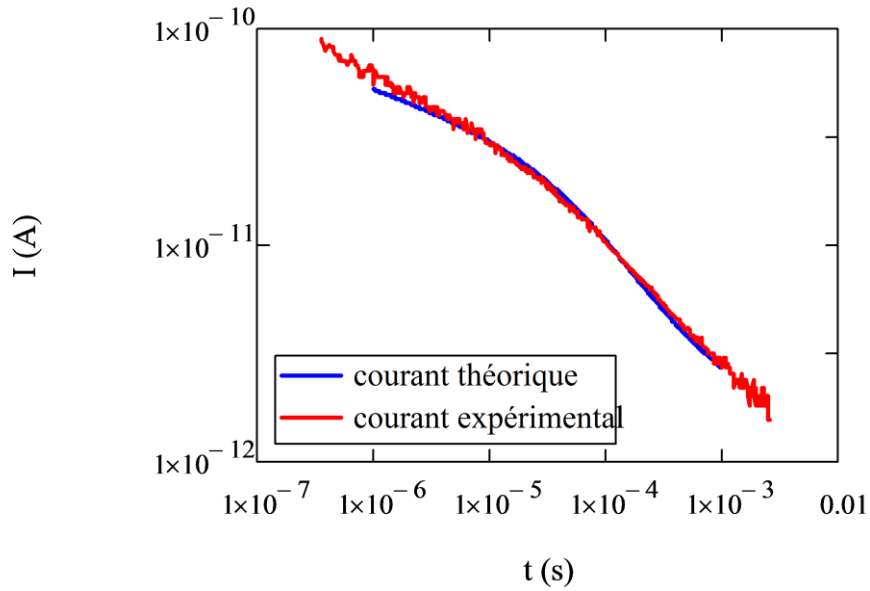
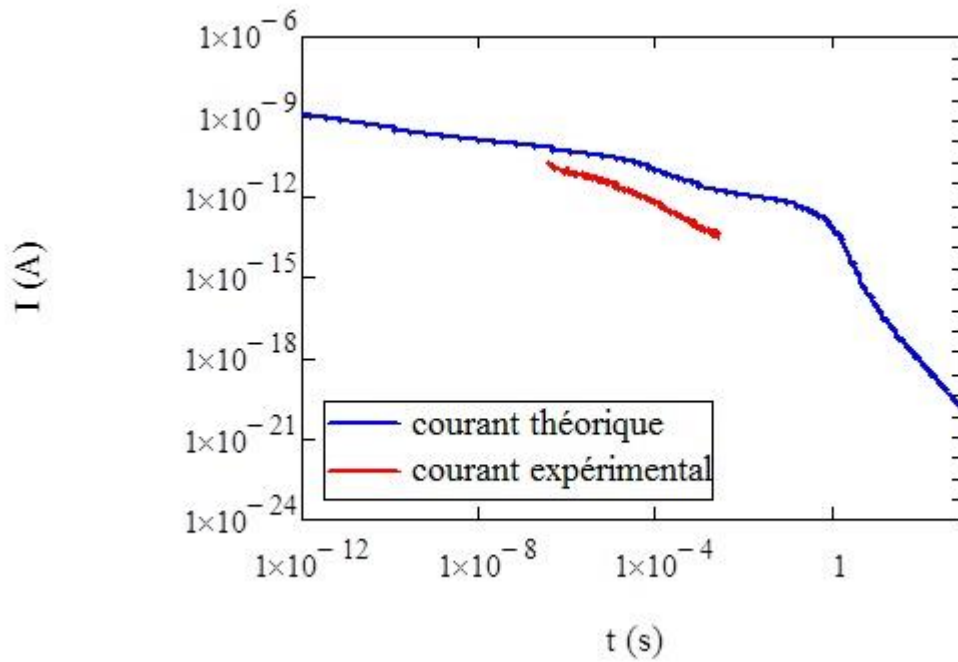
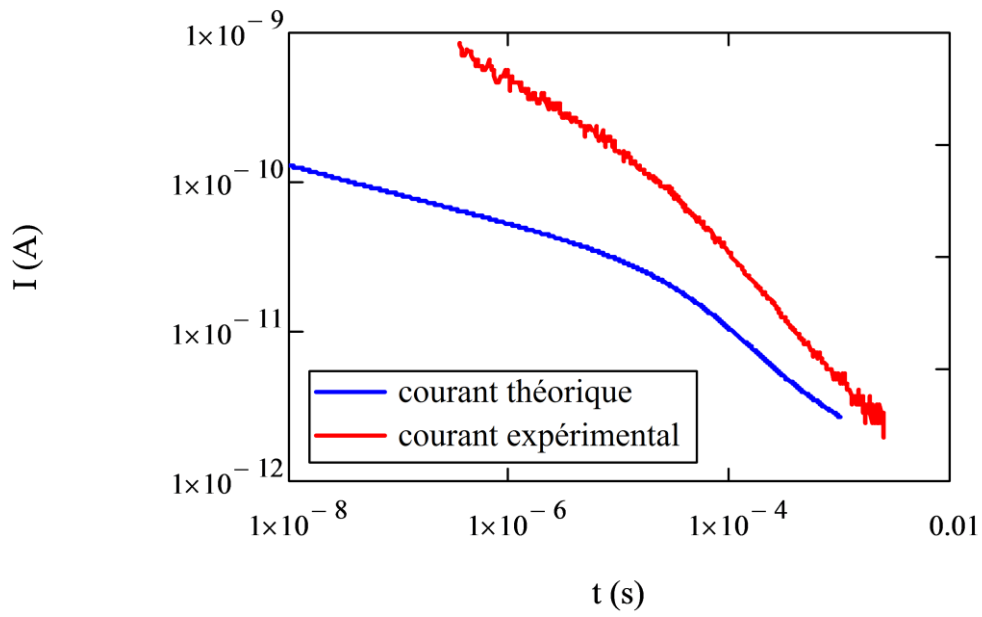
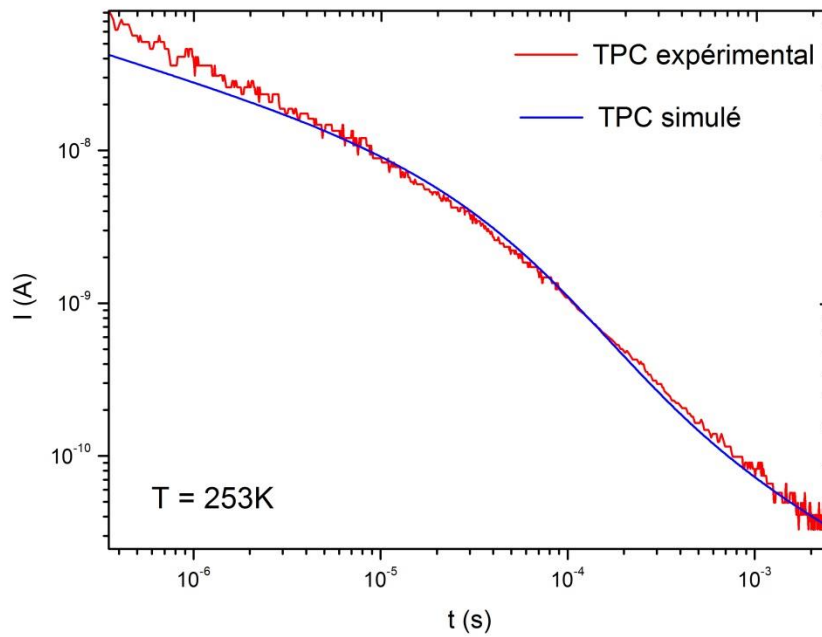


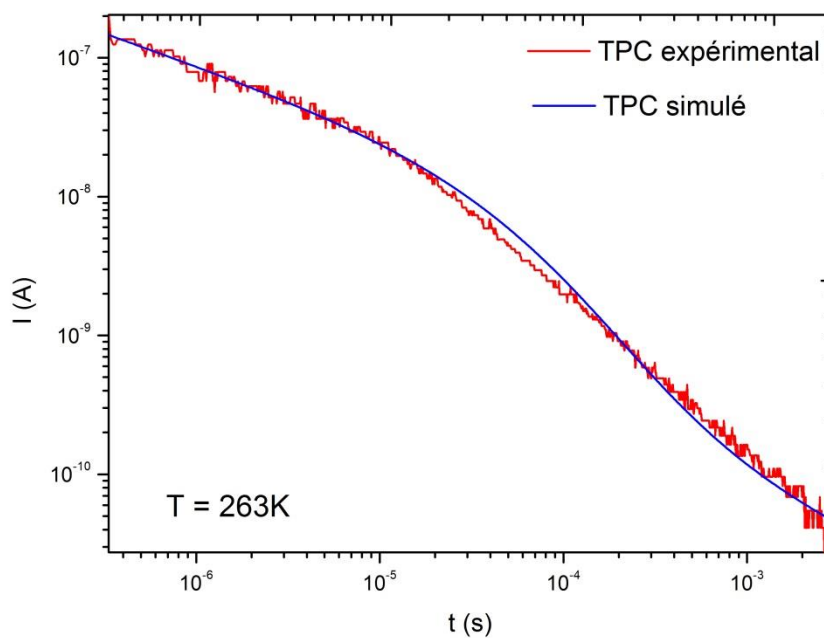
Figure 3.12: L'évolution du courant théorique et expérimental pour un temps de démarrage de  $10^{-7}$ s.



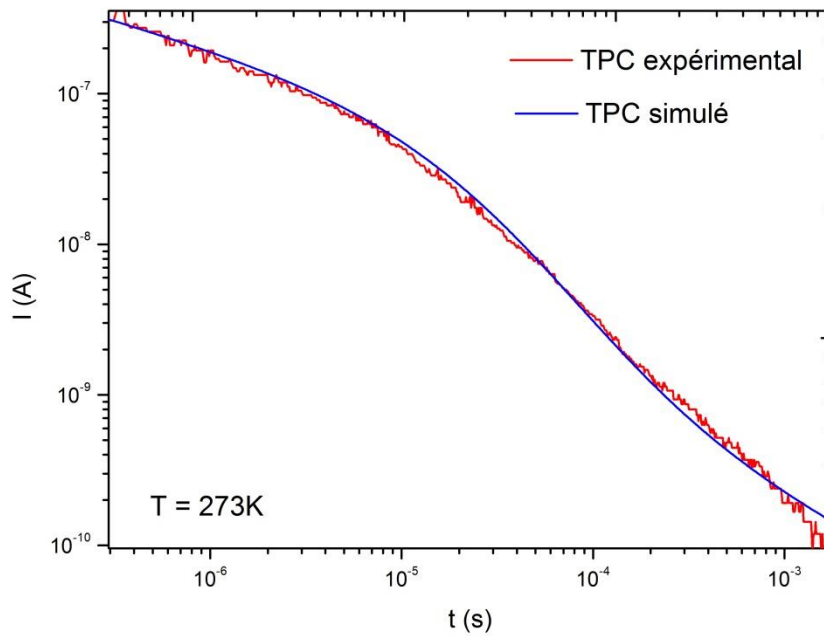
**Figure 3.13:** L'évolution du courant théorique et expérimental pour un temps de démarrage  $10^{-8}$  s et  $10^{-12}$  s.



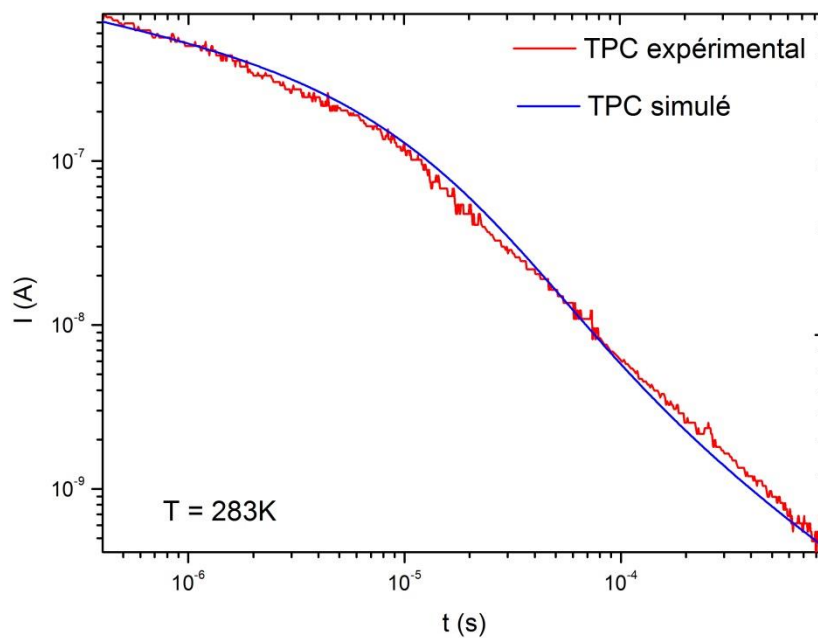
**Figure 3.14:** Comparaison entre le photocourant transitoire simulé et expérimental dans le sélénium amorphe dopé avec 0.2 at% d'arsenic à  $T=253K$ .



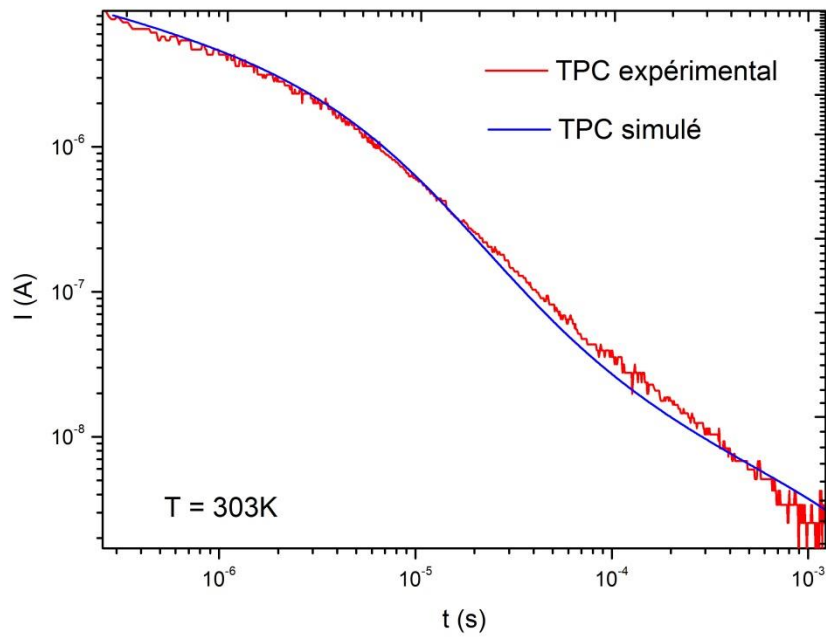
**Figure 3.15:** Comparaison entre le photocourant transitoire simulé et expérimental dans le sélénium amorphe dopé avec 0.2 at% d'arsenic à  $T=263K$ .



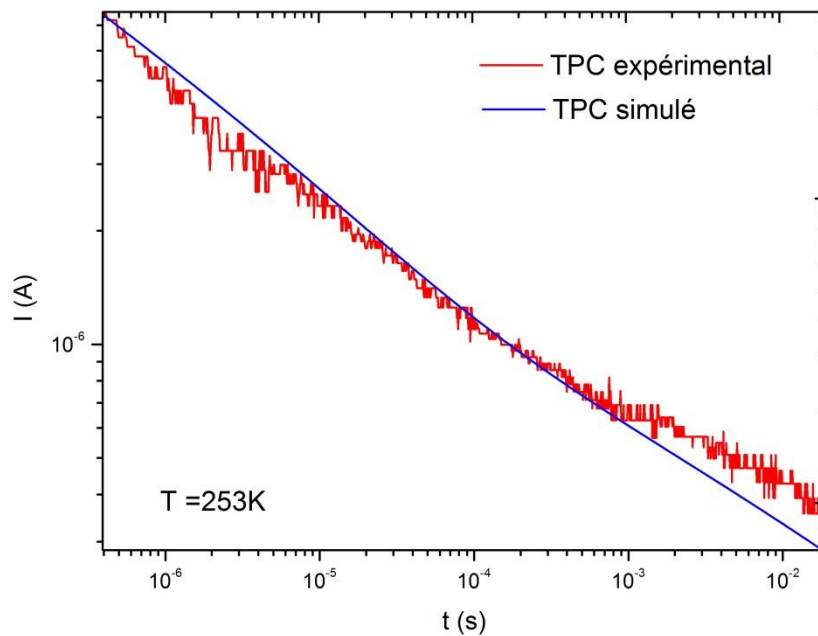
**Figure 3.16:** Comparaison entre le photocourant transitoire simulé et expérimental dans le sélénium amorphe dopé avec 0.2 at% d'arsenic à  $T=273K$ .



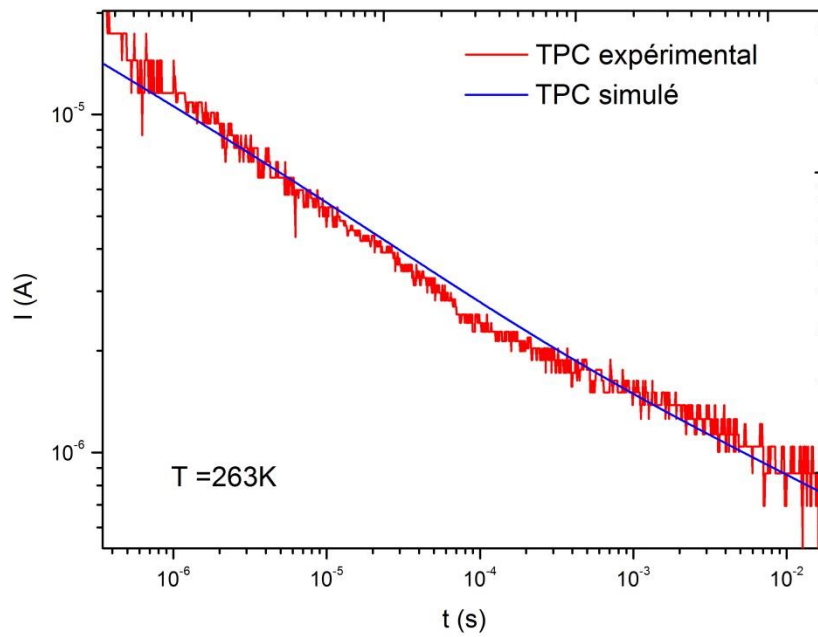
**Figure 3.17:** Comparaison entre le photocourant transitoire simulé et expérimental dans le sélénium amorphe dopé avec 0.2 at% d'arsenic à  $T=283K$ .



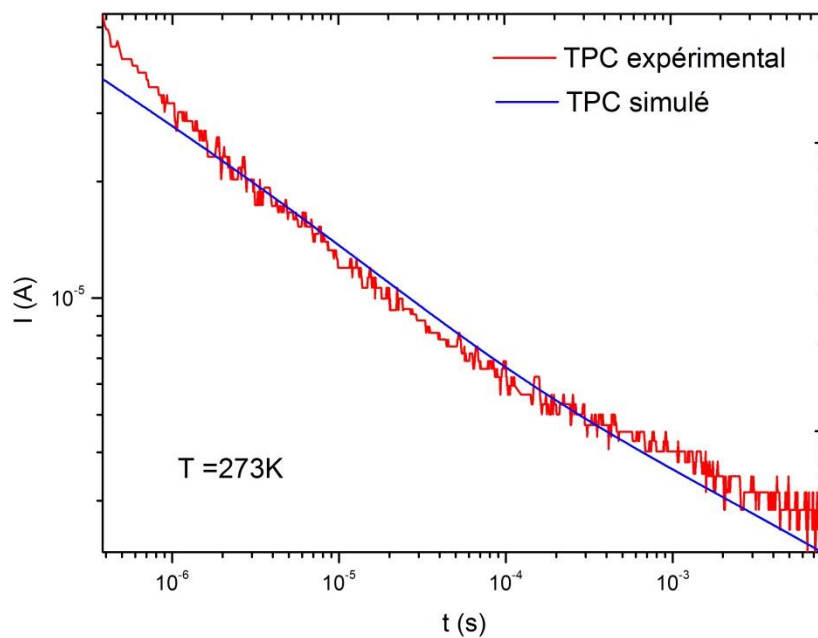
**Figure 3.18:** Comparaison entre le photocourant transitoire simulé et expérimental dans le sélénium amorphe dopé avec 0.2 at% d'Arsenic à  $T=303K$



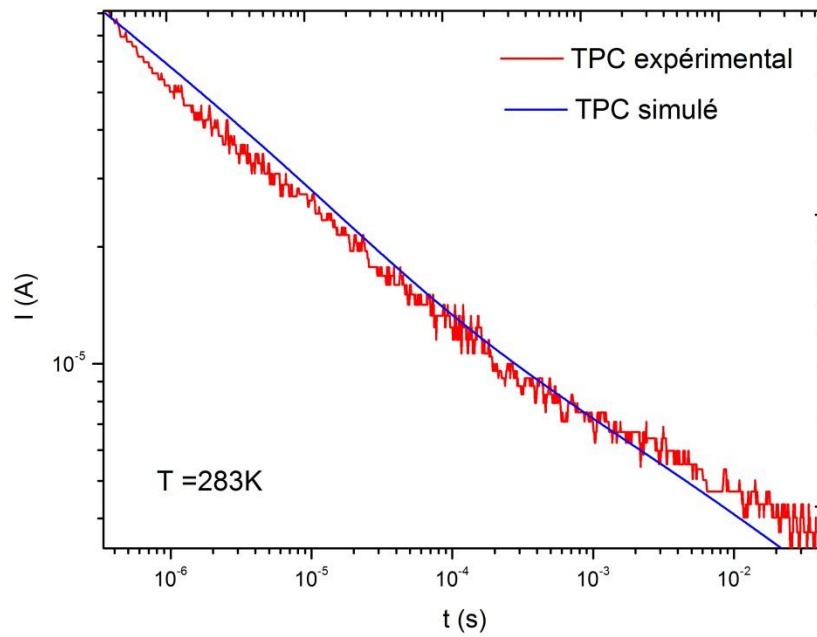
**Figure 3.19:** Comparaison entre le photocourant transitoire simulé et expérimental dans le sélénium amorphe dopé avec 0.5 at% d'arsenic à  $T=253K$ .



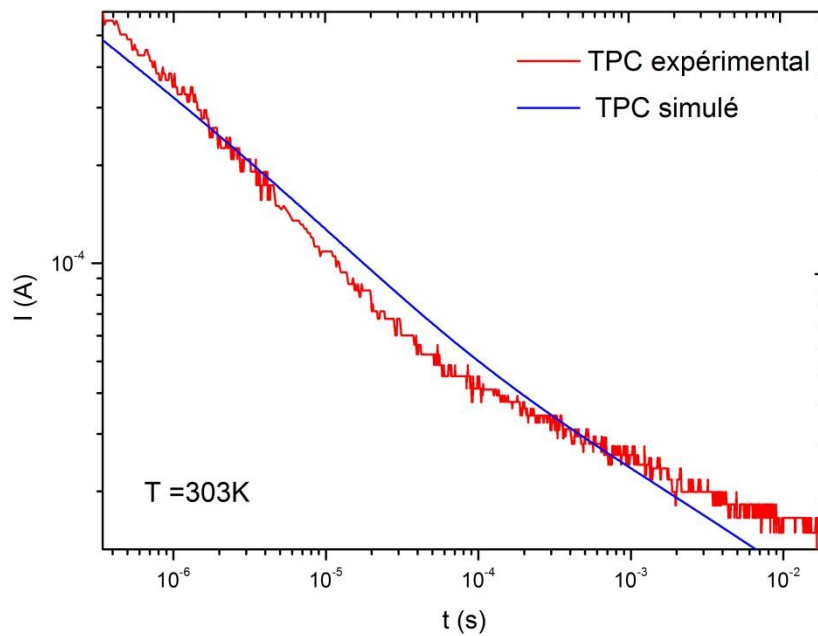
**Figure 3.20:** Comparaison entre le photocourant transitoire simulé et expérimental dans le sélénium amorphe dopé avec 0.5 at% d'arsenic à  $T=263K$ .



**Figure 3.21:** Comparaison entre le photocourant transitoire simulé et expérimental dans le sélénium amorphe dopé avec 0.5at% d'arsenic à  $T=273K$ .



**Figure 3.22:** Comparaison entre le photocourant transitoire simulé et expérimental dans le sélénium amorphe dopé avec 0.5 at% d'arsenic à  $T=283K$ .



**Figure 3.23:** Comparaison entre le photocourant transitoire simulé et expérimental dans le sélénium amorphe dopé avec 0.5 at% d'arsenic à  $T=303K$ .

### 3-5 Discussion des résultats

La Figure.3.3 montre la distribution des états localisés dans le sélénium amorphe pur (a-Se), calculée à partir des photocourants transitoires de la Figure.3.1 en utilisant l'équation (2.18). Il apparaît clairement que la distribution de la densité d'états dans la moitié inférieure du gap de (a-Se) est la somme d'une queue exponentielle et deux pics Gaussiens: le premier situé à environ 0.32eV avec une amplitude de  $10^{17} \text{eV}^{-1} \text{cm}^{-3}$ , et se manifeste à basses températures. Le deuxième est une large caractéristique autour de (0.45-0.5) eV avec une amplitude de  $10^{15} \text{eV}^{-1} \text{cm}^{-3}$  qui apparaît à des températures plus élevées, et se présente comme une déviation par rapport à distribution de la densité d'états  $g(E)$ , calculée à partir d'un fond exponentielle schématisé par la ligne droite dans la même Figure. Ces valeurs d'énergie sont obtenues en utilisant une fréquence de tentative d'échappement  $\nu = 10^{12} \text{s}^{-1}$  dans le formalisme de la transformée de Laplace. Afin de mieux éclaircir ce que nous venons d'expliquer, il est important de noter que la fenêtre d'énergie résultante des données expérimentales du photocourant transitoire à la température 193K est comprise entre 0.23 eV et 0.38 eV, cela signifie que nous perdons les informations sur la densité d'états  $g(E)$  pour des énergies supérieures à 0.38 eV. À des températures élevées, nous perdons l'information sur la distribution des états localisés pour les faibles énergies.

Le premier niveau de défaut est peu profond et peut être attribué à un changement dans l'angle dièdre comme le montre Lukovský et al [91], ce défaut est neutre. Le deuxième défaut est attribué au centre de défaut chargé  $D^{\cdot-}$  dans les chalcogénures [44]. Nous pouvons voir que le deuxième niveau de défaut est moins résolu que le premier, ce qui peut s'expliquer par la coupure des données expérimentales dans les longs temps et les très faibles valeurs du courants qui introduisent plus de bruit.

Conformément à l'équation de bilan détaillé  $\nu = N_0 \nu_{th} \sigma$ , où  $N_0$  est la densité d'états à la limite des bandes, une grande valeur de  $\nu$ , reflète une large section efficace de piégeage du défaut. Cette dernière est compatible avec les défauts chargés [53]. Concernant le défaut peu profond qui est neutre, il est caractérisé par une fréquence de tentative d'échappement beaucoup plus faible que la valeur utilisée ici et qui est une caractéristique des défauts neutres [92]; la position réelle du premier niveau de défaut est, par conséquent, moins profonde qu'il apparaît [53].

Un ensemble de données expérimentales qui peuvent offrir de très faibles valeurs du courant à des temps très courts, et à différentes températures proches l'une de l'autre devrait donner une meilleure image de la réalité de la densité d'états  $g(E)$  dans ce matériau.

Il convient de souligner qu'il est difficile jusqu'à présent, de faire un ajustement des paramètres de notre modèle de densité d'états généré dans le gap du sélénium amorphe pur dans le cas présent avec une distribution exponentielle, sur laquelle sont superposées deux distributions gaussiennes. Ceci est dû au nombre important des paramètres à ajuster (8) et la limitation de l'ensemble des données aux longs temps, ainsi que dans les temps courts.

Les résultats trouvés à travers cette étude supportent plus que la distribution de la densité d'états dans le sélénium amorphe n'est pas monotone, en opposition avec les études rapportées par Koughia et al [93] et suggère la présence d'un pic peu profond en bonne concordance avec les travaux de recherches reporté par Naito [94], et propose en plus un pic profond à 0.4 eV en bonne concordance avec les mesures expérimental du courant post-transit rapporté par Benkhedir et al [44]. Cela confirme une fois de plus la fiabilité de notre approche utilisée pour calculer la distribution des états localisés. Les dernières remarques sont illustrées sur les deux figures ci-dessous à titre indicatif.

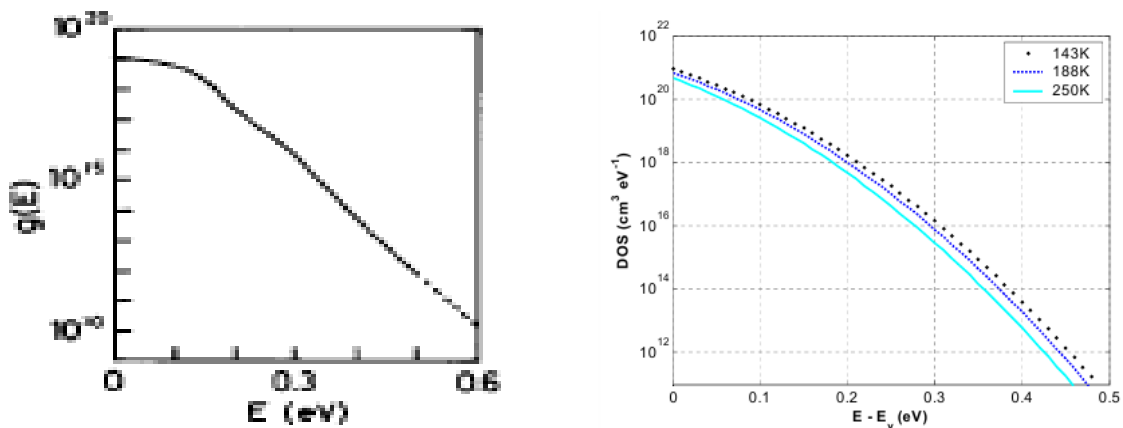


Figure.3.24: La densité d'état dans a-Se: à gauche selon Naito [94], à droite selon Koughia [93].

De l'ensemble des résultats illustrés sur les Figures.3.3, 3.7 et 3.9, trois remarques peuvent être dégagées :

- le formalisme de Laplace révèle que le dopage du sélénium amorphe (a-Se) par l'arsenic affecte la distribution des états localisés, comme le témoignent les Figures.3.7 et 3.9.
- nous pouvons voir que le dopage de (a-Se) avec As supprime les défauts peu profonds liés aux variations de l'angle dièdre dans les chaînes de (a-Se), et rend la distribution des états de la queue de bande de valence moins abrupte.
- ces changements dans la densité d'états  $g(E)$  dans le sélénium amorphe augmentent l'importance relative des niveaux de défauts profonds dans (a-Se) dopé par As et explique le raccourcissement de la durée de vie des trous, largement rapporté dans la littérature avec l'addition de l'arsenic, et qui a été expliqué par un niveau de défaut supplémentaire dans (a-Se) [49].

En résumé, nous pouvons conclure que nos résultats sur l'influence du dopage de (a-Se) avec As sur la distribution de la densité d'états, éliminent la possibilité de la présence d'un autre défaut signalé avant dans la littérature. Les calculs reportés dans le Tableau 3.2 concordent avec les données expérimentales de la durée de vie des trous portant sur la diminution de cette grandeur dans ce matériau.

La Figure.3.10 représente la densité d'états théorique reconstruite dans ce travail. Un pic situé à 0.406 eV au-dessus de la bande de valence avec une amplitude relativement stable de l'ordre de  $10^{15} \text{eV}^{-1} \text{cm}^{-3}$  pour l'échantillon de (a-Se) dopé avec 0.2 at% As, et un pic énergétique positionné à 0.375 eV avec une amplitude de  $10^{17} - 10^{18} \text{eV}^{-1} \text{cm}^{-3}$  pour l'échantillon du sélénium amorphe dopé avec 0.5 at% As. La Figure illustre encore l'influence du taux de dopage sur les paramètres de la distribution des états localisés du sélénium amorphe stabilisé. D'après le Tableau 3.1, le niveau de défaut pour la série des deux échantillons de a-Se dopé avec 0.2 at% As et 0.5 at% As est situé à  $(0.406 \pm 0.038) \text{eV}$  et à  $(0.375 \pm 0.038) \text{eV}$  respectivement, peut être attribuée au centre de défaut chargé  $D^{\cdot}$  dans les chalcogénures. Pour les deux échantillons, et en regardant l'erreur dans la position du pic, on peut dire que le niveau de défaut est à la même position pour chacun d'eux.

Nos résultats obtenus dans cette étude, concordent mieux avec les prédictions de Marshall rapportées sur l'application de la méthode de prés-transit définie par l'équation (1.1). Selon Marshall [54] cette méthode peut détecter la présence du pic mais elle introduit des erreurs dans le calcul, et donne une fausse lecture de sa position énergétique. Toutefois, cette méthode a été appliquée par notre groupe de recherche, la position du défaut chargé pour

les deux échantillons précédentes calculée dans cette étude est respectivement  $(0.40 \pm 0.05) eV$  et  $(0.33 \pm 0.02) eV$  [88], où nous pouvons signaler dans ce travail une amélioration dans la position énergétique du défaut profond pour l'échantillon de a-Se:0.5 at% As en utilisant la transformée de Laplace.

Revenons maintenant aux différents paramètres ajustés de la distribution des états localisés illustrés sur la Figure.3.10 comme nous le voyons, la densité et la largeur de la distribution exponentielle changent par l'augmentation du taux de dopage. Le fond exponentiel de la densité d'états  $g(E)$  est beaucoup plus abrupt pour le premier échantillon. En effet, d'après le Tableau 3.1 la température caractéristique de la queue de bande exponentielle pour le dopage de 0.2 at% As est 313K, alors qu'elle est de l'ordre de 403K pour les échantillons de a-Se dopé avec 0.5 at% As. Il est important de mentionner que l'amplitude de la queue exponentielle à  $E=E_V=0$  eV pour l'échantillon de a-Se dopé avec 0.5 at% As est plus élevée que celle de 0.2 at% As.

L'analyse des résultats des variations simultanées des densités à l'extrémité de la bande de valence, a conduit à lier qualitativement l'aspect à la structure du matériau. Ces deux dernières observations peuvent s'expliquer par le fait que le deuxième échantillon est assez grand pour considérer que nous parlons d'alliage et non du dopage. Cette interprétation physique de la situation a été appuyée par une comparaison entre nos résultats de simulation avec d'autres expérimentales, où nous avons signalé un bon accord avec la littérature comme le montre la Figure ci-dessous. Cette comparaison que nous venons de faire, nous permet d'avoir une idée sur l'ordre de grandeur de la densité des défauts. Les queues de bandes expérimentales données dans les références [95-96] pour les films de a-As<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>, montrent que l'amplitude des états de queue à  $E_V=0$  eV est supérieure à  $10^{23} (eV^{-1} cm^{-3})$ , qui est quasiment la même valeur obtenue dans cette étude pour les échantillons de a-Se dopé avec 0.5 at% As.

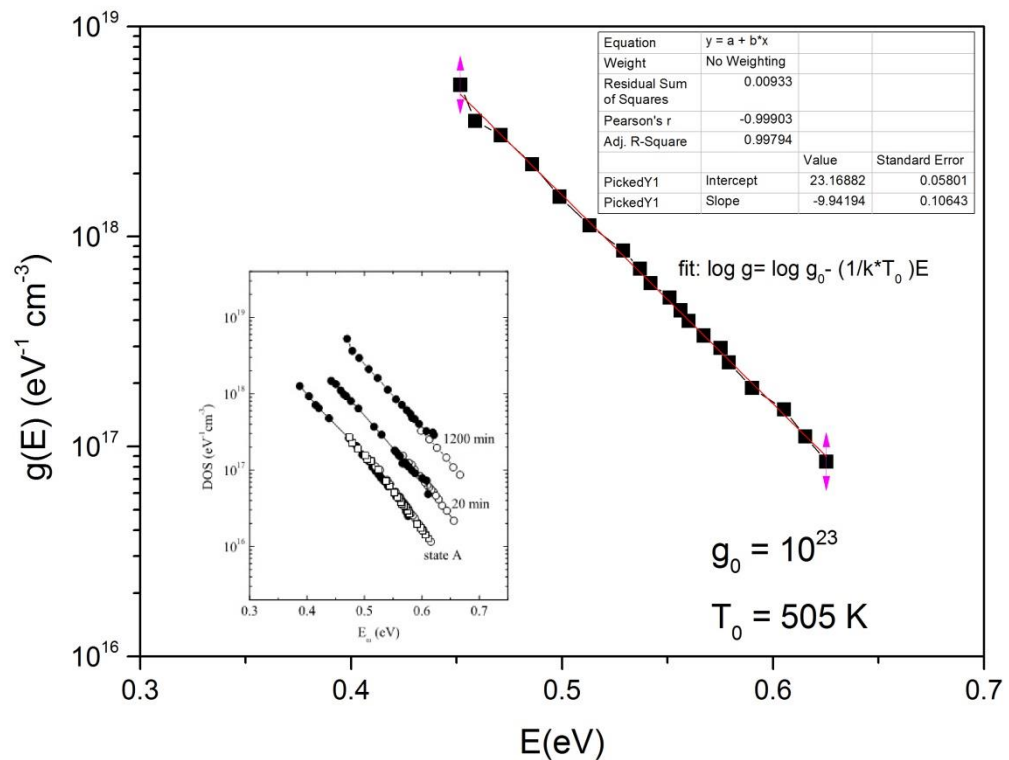


Figure 3.25 : La densité d'états dans  $a\text{-As}_2\text{Se}_3$  [95].

Nous avons assuré la validité de notre modèle de la densité d'états élaboré dans cette étude par la simulation de la photoconductivité transitoire à différentes températures. Les décroissances du photocourant transitoire simulé correspondent à l'équation (2.19) par une transformation de l'inverse de Laplace, ce qui signifie que, malheureusement, pour la plupart des cas pratiques, les décroissances doivent être évaluées numériquement. Ceci est typiquement un problème mal posé. En fait, la solution passe par l'application des techniques spéciales. Les résultats obtenus sur la base de cette analyse sont généralement connectés à des incertitudes significatives et doivent être utilisés avec prudence.

L'algorithme d'inversion est basé sur l'approximation de Padé (une approximation rationnelle des polynômes de degré 8-2). Le temps de piégeage moyen utilisé dans ce travail  $10^{-12}$  s est tout à fait réaliste. D'un point de vue expérimental, il est extrêmement difficile de mesurer ces moments dans les expériences de la photoconductivité transitoire. Par conséquent, l'application de la transformée de Fourier ou de Laplace à ces photocourants transitoires peuvent laisser une certaine incertitude sur l'unicité. Comme le montre les Figures.3.12-3.13, une décroissance du photocourant  $I(t)$  pendant des différentes décades de temps superposées sur l'expérimental, ne peut être compatible avec une distribution de densité

d'états qui est limitée par le domaine temporel accessible expérimentalement. Le photocourant transitoire simulé s'écarte de l'expérimental parce que la densité d'états aura une irréaliste longue queue dans le domaine des grandes énergies.

Il convient de noter que l'échelle d'énergie recouverts par la méthode de la transformée de Laplace, est déterminé par l'échelle du temps de la mesure de la photoconductivité transitoire coplanaire. Les données de Benkhedir et al [88] couvrent un domaine de temps d'environ quatre décades situé entre  $10^{-6}$  s et  $10^{-2}$  s, cela signifie que toutes les données de la densité d'états hors ce domaine ne sont pas valides, car il n'y a pas de données  $I(t)$  hors du temps mesuré. L'équation (2.18) indique qu'il existe un rapport étroit entre la densité d'états et la transformée de Laplace du photocourant. Nous soulignons ici qu'un résultat intéressant de l'analyse est que, la solution numérique dépend de la fonction de la densité d'états obtenue qui est limitée par le domaine temporel accessible expérimentalement, donc nous ne pouvons pas introduire des données supplémentaires dont les effets sur la solution finale sont difficiles à prévoir [97-100].

Puisque l'information dans le domaine temporel pour des temps courts et longs est absente dans un ensemble de données expérimentales de (TPC), les résultats de la transformée de Laplace ne peuvent être qu'une approximation de ce que les résultats réels pourraient être, avec en particulier la fréquence des régions moins fiables basse et haute. Après le calcul de la transformée inverse, des distorsions similaires seront évidemment produites. Toutefois, il est judicieux de limiter la transformation à l'intervalle qui a fourni les données d'origine, et non pas à un domaine plus large qui comprend les régions qui ne contribuent pas à la transformée initiale.

Koughia et al [49] ont utilisé la méthode des fonctions prédéfinies dans le calcul de la densité d'états dans le sélénium amorphe du côté de la bande de conduction dans laquelle, la distribution a été approximée comme la somme d'une queue exponentielle et deux pics Gaussiens. Les paramètres ajustés sont effectués en minimisant la différence entre les photocourants simulés et les photocourants transitoires expérimentaux. Comme il est mentionné dans la référence, la dépendance temporelle du photocourant a été calculé numériquement par la transformée inverse de Laplace. Lors du calcul, les auteurs ont noté que la coïncidence entre les photocourants calculés et mesurés est peu susceptible d'être accidentel sur un intervalle de temps couvrant plus de deux ordres de grandeur (le domaine temporel des mesures rapportées par Koughia et al). En outre, Benkhedir et al [51] ont utilisé la méthode

mentionnée ci-dessus, où ils ont recours à l'utilisation des photocourants transitoires obtenus à partir de la technique du temps de vol (TOF) complets, plutôt que seulement les parties post-transit. La comparaison est également effectuée dans l'intervalle expérimental ( $10^{-3}$ - $10^{-7}$ ) s.

Ainsi, selon les raisons ci-dessus, il est important de limiter notre superposition du photocourant transitoire simulé et mesuré comme le montre les Figures.3.14-3.23 au domaine du temps accessible expérimentalement, et que nous ne pouvons pas utiliser des parties du photocourant théorique calculé initialement, à partir d'un domaine de temps limité du photocourant mesuré. De nombreuses limitations proviennent des problèmes mal posés.

Les résultats des Figures.3.14-3.23 sont en très bon accord avec les résultats expérimentaux de la photoconductivité transitoire. Il faut noter que la densité optimisée dans ce travail peut ne pas être nécessairement unique, plutôt, elle est une effective densité qui est capable d'expliquer les photocourants observés. Cependant, il y a quelques points importants qui soutiennent le modèle de la densité d'états proposé dans ce travail. D'abord, la forme de la distribution proposée est stable avec l'effet de dopage. Cela signifie que seulement des variations dans la distribution de la densité d'états, comme un changement dans les amplitudes et les pentes de la distribution exponentielle que nous avons discuté et comparé avec la littérature comme il est mentionné plus haut. Le fait que la densité reste cohérente pour les ordres de dopage est lui-même un facteur convaincant.

### **3-6 Conclusion**

Les résultats qui précèdent confirment la grande puissance prédictive du formalisme de la transformée de Laplace de la photoconductivité transitoire. On savait, qu'en utilisant seulement des mesures de la photoconductivité transitoire, les méthodes pré-transit et post-transit permettent de prédire semi-quantitativement la distribution des états localisés. Les Figures ci-dessus montrent qu'en utilisant ces mêmes données dans la technique de la transformée de Laplace, on peut également prévoir de façon assez exacte, la densité d'états dans le gap du sélénium amorphe pur et dopé par l'arsenic. A notre connaissance, c'est la première fois qu'une telle étude est faite à partir des photocourants transitoires à différentes températures. Si des études semblables donnent des résultats aussi encourageants, on pourra faire confiance ultérieurement à notre programme élaboré dans cette étude pour calculer la densité d'états dans le gap des semi-conducteurs amorphes.

# Conclusion générale

---

La réponse phototransitoire d'un semi-conducteur désordonné suite à une excitation courte, est examinée par la simulation numérique dans le cadre du mécanisme par piégeage multiple, en utilisant la méthode basée sur l'inversion du photocourant transitoire dans le domaine fréquentiel, pour la détermination de la distribution de la densité des états localisés dans les semi-conducteurs amorphes à l'aide de la technique de la transformée de Laplace (LT). La méthode est applicable à la fois aux régimes avant et après la recombinaison monomoléculaire de la photoconductivité transitoire, et à des semi-conducteurs amorphes présentant un transport dispersif ou non dispersif.

Ces avantages sont démontrés par la simulation numérique de la photoconductivité transitoire en utilisant notre programme de l'inverse de Laplace, basé sur l'approximation de Padé pour des distributions types des états localisés appropriées aux semi-conducteurs amorphes. Une amélioration en résolution de l'énergie est perceptible par l'application de la méthode de la transformée de Laplace à haute résolution (HLT). La méthode est testée en l'appliquant à des données simulées de la photoconductivité transitoire générée par notre algorithme. Nous avons bien testé la flexibilité de notre programme sur des distributions types de la densité des états localisés, où nous avons souligné qu'il récupère la densité d'états proposée. L'applicabilité de la méthode 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. Les résultats essentiels que nous avons tirés de cette étude sont comme suit:

- la densité d'états simulée dans la moitié inférieure du gap de sélénium amorphe pur est composée d'une queue de bande de valence, superposée d'un pic peu profond situé à 0.32eV et un autre profond autour de 0.45eV.
- le dopage avec l'arsenic fait disparaître le premier pic de la distribution de la queue de bande de valence.
- la densité d'états simulée dans le sélénium amorphe dopé avec 0.2 at% As et 0.5 at% As, est composée respectivement d'une queue de bande de valence de température caractéristique  $T_0=313$  K et 403K, et une distribution gaussienne centrée autour de 0.406 eV au-dessus de Ev, avec une valeur d'amplitude de  $1.949 \times 10^{15} \text{cm}^{-3} \text{eV}^{-1}$  et un écart type de 0.038 eV pour le dopage avec 0.2 at% As. La distribution gaussienne dans a-Se dopé 0.5 at% As est centrée autour de 0.375 eV au-dessus de Ev, avec une amplitude de  $1.593 \times 10^{18} \text{cm}^{-3} \text{eV}^{-1}$  et un écart type de 0.038 eV.
- nous avons proposé une méthode pour le calcul de la durée de vie à partir des mesures de la photoconductivité transitoire. Cette méthode a été appliquée dans l'étude de l'effet du dopage de sélénium amorphe avec l'arsenic, on a constaté que la durée de vie des trous n'est pas affectée par le changement du taux de dopage jusqu'à 0.5 at% As. Comme il a été signalé dans le manuscrit, le taux de dopage peut avoir un effet significatif sur les paramètres de la distribution exponentielle de la densité d'états.
- l'exploitation de la densité d'états à la fois dans le sélénium amorphe pur et dopé par l'arsenic, nous a permis d'éliminer la possibilité de la présence d'un autre piège dans le cas du dopage souvent rapportée dans la littérature.

En introduisant notre modèle de densité d'états généré dans cette étude dans les simulations numériques, nous avons été capables de reproduire tous les comportements expérimentaux observés pour les échantillons dopés. Tous ces résultats sont une bonne confirmation expérimentale de tous les développements théoriques, qui étaient réalisés sur la technique de la photoconductivité transitoire. Ces résultats numériques nous ont permis de lever l'ambiguïté qui concerne la distribution de la densité d'états dans la moitié inférieure du gap du sélénium amorphe et qui est, sans doute, non monotone mais elle contient des pics à certains niveaux d'énergie.

En conclusion, nous avons répondu à la question de longue date concernant la diminution de la durée de vie dans a-Se par l'effet de dopage avec l'arsenic. Les résultats obtenus dans les systèmes étudiés avec l'approximation de padé, nous permettent de conclure que son implémentation est valide et reproduit correctement les prédictions du modèle. La

simulation numérique constitue, de ce fait, un outil prédictif qui aide à expliquer les différents processus électroniques intervenant dans le matériau. Le but de ce travail de recherche fut donc réalisé: le nouvel outil numérique est maintenant disponible.

Comme perspective à notre travail, nous suggérons :

- approfondir la présente étude pour dériver, à partir de la technique du temps de vol (TOF), une méthode plus générale qui serait valable pour les deux régimes avant et après la recombinaison, et par conséquent balayer les niveaux d'énergie du côté de la bande de conduction.
- simulation de la durée de vie dans le cas du dopage avec le chlore.
- simulation de l'effet de la relaxation structurale sur la densité des états localisés.
- étendre l'étude aux cas des structures conçues à base des matériaux polymorphes et organiques.

# Bibliographie

---

- [1] J. Robertson, *Can. J. Phys.* **92**, 553 (2014).
- [2] J. A. Rowlands and S. O. Kasap. *Phys. Today.* **50**, 24 (1997).
- [3] S. O. Kasap, J. B. Frey, G. Belev, O. Tousignant, H. Hani, L. Laperriere, A. Reznik and J. A. Rowlands, *Phys. Status Solidi. B.* **246**, 1794 (2009).
- [4] B. Fogal, G. Belev, R.E. Johanson and S.O. Kasap, *J. Non-Cryst. Solids.* **338-340**, 569(2006).
- [5] I. Arkhipov and I. Rudenko, *Philos. Mag.* **45**, 177 (1982).
- [6] J. M. Marshall, *J. Non-Cryst. Solids.* **78**, 425 (1985).
- [7] H. Scher and E. Montroll, *Phys. Rev. B.* **12**, 2455 (1975).
- [8] F. W Schmidlin, *Phys. Rev. B.* **16**, 2362 (1977).
- [9] H. Michiel, J. M. Marshall and G. J. Adriaenssens, *Philos. Mag.* **48**, 187 (1983).
- [10] G. F. Seynhaeve, G. J. Adriaenssens and H. Michiel, *Solid. State. Commun.* **56**, 323 (1985).
- [11] C. Main, A. Mearzga, I. K. Kristensen and J. Berkin, *Solid. State. Commun.* **74**, 667 (1990).
- [12] J. Orenstein and M. Kastner, *Phys. Rev. Lett.* **46**, 1421 (1981).
- [13] T. Tiedje and A. Rose, *Solid. State. Commun.* **37**, 49 (1981).
- [14] N. A. Goryunova and B. T. Kolomiets, *Zh. Tekh. Fiz.* **25**, 2069 (1955).
- [15] J. M. Marshall, *Rep. Prog. Phys.* **46**, 1235 (1983).
- [16] S. K. Bose, K. Winer and O. K. Andersen, *Phys. Rev. B.* **37**, 6262 (1988).
- [17] N. F. Mott, *Adv. Phys.* **16**, 49 (1967).
- [18] M. H. Cohen, H. Fritzsche and S. R. Ovshinski, *Phys. Rev. Lett.* **22**, 1065 (1969).
- [19] J. M. Marshall and A. E. Owen, *Philos. Mag.* **24**, 1281 (1971).
- [20] P. B. Kirby and W. Paul, *Phys. Rev. B.* **29**, 826 (1984).
- [21] G. P. Pfister and M. Scher, *Adv. Phys.* **27**, 747 (1978).
- [22] H. Belgacem, A. Merazga and C. Longeaud, *Semiconductor science and technology.* **20**, 56 (2005).
- [23] M. Brinza, J. Willekens, M. L. Benkhedir and G. J. Adriaenssens, *J. Mate. Sci. Mater. Electron.* **16**, 703 (2005).

- [24] A. I. Rudenko and V. I. Arkipov, *Philos. Mag. B.* **45**, 209 (1982).
- [25] W.E. Spear, *J. Non-Cryst. Solids.* **1**, 197 (1969).
- [26] T. Yoshikawa, T. Nagase, T. Kobayashi, S. Murakami and H. Naito, *Thin. Solid. Film.* **516**, 2595 (2008).
- [27] G. F. Seynhaeve, G. J. Adriaenssens and H. Michiel, *Philos. Mag. B.* **58**, 421 (1988).
- [28] M. E. Sharfe, *Phys. Rev. B.* **2**, 5025 (1970).
- [29] J. Noolandi, *Phys. Rev. B.* **16**, 4466 (1977).
- [30] M. L. Benkhedir, *Defects levels in the amorphous selenium bandgap*, Catholic Universiteit Leuven, Belgium, (2006).
- [31] H. Michiel, J. M. Marshall and G. J. Adriaenssens, *Philos. Mag. B.* **51**, 27 (1985).
- [32] S. Reynolds, C. Main and R. Bruggemann, *J. Mater. Sci.* **14**, 615(2003).
- [33] V. I. Arkhipov and A.I. Rudenko, *J. Non-Cryst. Solids.* **30**, 163 (1978).
- [34] J. M Marshall, H. Michiel and G.J. Adriaenssens, *Philos. Mag. B.* **47**, 211 (1983).
- [35] C. Main, R. Bruggemann, D.P. Webb and S. Reynolds, *Solid State Commun.* **83**, 401 (1992).
- [36] H. Naito, J. Ding and M. Okuda, *Appl. Phys. Lett.* **64**, 1830 (1994).
- [37] M. Kastner, D. Adler and H. Fritzsche, *Phys. Rev. Lett.* **37**, 1504 (1976).
- [38] M. Abkowitz and R. C. Enck, *Phys. Rev. B.* **25**, 2567 (1982).
- [39] M. Abkowitz, *Philos. Mag. Lett.* **58**, 53 (1988).
- [40] S. O. Kasap and J. A. Rowlands, *J. Mater. Sci. Mater. Electron.* **11**, 179 (2000).
- [41] H. Z. Song, G. J. Adriaenssens, E. V. Emelianova and V. I. Arkhipov, *Phys. Rev. B.* **59**, 10610 (1999).
- [42] N. Qamhieh, M. L. Benkhedir, M. Brinza, J. Willekens and G. J. Adriaenssens, *J. Phys.: Condens. Matter.* **16**, 3827 (2004).
- [43] M. L. Benkhedir, M. S. Aida and G. J. Adriaenssens, *J. Non-Cryst. Solids.* **344**, 193 (2004).
- [44] M. L. Benkhedir, M. Brinza and G. J. Adriaenssens, *J. Phys.: Condens. Matter.* **16**, S5253 (2004).
- [45] M. L. Benkhedir, M. S. Aida, N. Qamhieh, A. Stesmans and G. J. Adriaenssens, *J. Optoelectron. Adv. Mater.* **7**, 329 (2005).
- [46] M. L. Benkhedir, M. Brinza, J. Willekens, K. Haenena, M. Daenena, M. Nesladeka and G. J. Adriaenssens, *J. Optoelectron. Adv. Mater.* **7**, 2223 (2005).
- [47] N. Qamhieh, J. Willekens, M. Brinza and G. J. Adriaenssens, *J. Phys.: Condens. Matter.* **15**, L631 (2003).

- [48] N. Qamhieh, M. L. Benkhedir, M. Brinza and G. J. Adriaenssens, *J. Optoelectron. Adv. Mater.* **7**, 1781 (2005).
- [49] K. Koughia, Z. Shakoor, S. Kasap, and J. Marshall, *J. Appl. Phys.* **97**, 033706 (2005).
- [50] T. E. Orlowski and M. Abkowitz, *J. Non-Cryst. Solids.* **77**, 439 (1985).
- [51] E. Emelianova, M. Benkhedir, M. Brinza and G. Adriaenssens, *J. Appl. Phys.* **99**, 083702 (2006).
- [52] J. M. Marshall, *J. Non-Cryst. Solids.* **77**, 564 (1985).
- [53] M. L. Benkhedir, M. Brinza, G. J. Adriaenssens and C. Main, *J. Phys. Condens. Matter.* **20**, 215202 (2008).
- [54] J. M. Marshall and C. Main, *NATO Science for Peace and Security Series B: Physics and Biophysics*, 49 (2009).
- [55] H. Naito, T. Nagase, T. Ishii, M. Okuda, T. Kawaguchi and S. Maruno, *J. Non-Cryst. Solids.* **363**, 198 (1996).
- [56] T. Nagase and H. Naito, *J. Non-Cryst. Solids.* **824**, 227 (1998).
- [57] T. Nagase, K. Kishimoto and H. Naito, *J. Appl. Phys.* **86**, 5026 (1999).
- [58] N. Ogawa, T. Nagase and H. Naito, *J. Non-Cryst. Solids.* **367**, 266 (2000).
- [59] M. J. Gueorguieva, C. Main, S. Reynolds, R. Brüggemann and C. Longeaud, *J. Non-Cryst. Solids.* **299**, 541 (2002).
- [60] M. Brinza and G. J. Adriaenssens, *J. Optoelectron. Adv. Mater.* **8**, 2028 (2006).
- [61] S. Tobbeche and A. Merazga, *Courrier du Savoir.* **5**, 31 (2004).
- [62] M. M. Saad, K. Stephen and O. Leaky, *J. Mater. Sci. Mater. Electron.* **16**, 177 (2005).
- [63] J. M. Marshall and C. Main, *Philos. Mag. B.* **56**, 641 (1987).
- [64] J. Kočka, O. Klíma, G. Juška, M. Hoheisel and R. Plättner, *J. Non-Cryst. Solids.* **137-138**, 427 (1991).
- [65] R. A. Street, *Phys. Rev. B.* **32**, 3910 (1985).
- [66] R. A. Street and D. K. Biegelsen, *In The Physics of Hydrogenated Amorphous Silicon II*, Springer, Berlin, (1984).
- [67] H. Oheda, *J. Appl. Phys.* **52**, 6693 (1981).
- [68] C. Longeau and J. P. Kleider, *Phys. Rev. B.* **45**, 11672 (1992).
- [69] H. Naito and M. Okuda, *J. Appl. Phys.* **74**, 5064 (1993).
- [70] H. Michiel, G. J. Adriaenssens and J. M. Marshall, *J. Phys. C.* **16**, L1005 (1983).
- [71] G. Simmons and M. C. Tam, *Phys. Rev. B.* **7**, 3706 (1973).
- [72] A. Merazga and M. Herbane, *Solid. State. Comm.* **145**, 316 (2008).

- [73] H. Naito and M. Okuda, *J. Appl. Phys.* **77**, 3541 (1995).
- [74] G. J. Adriaenssens, *Philos. Mag. B.* **62**, 79 (1990).
- [75] H. Hosono, *Radio. Science.* **16**, 1015 (1981).
- [76] H. Meyer, D. Haarer, H. Naarmann and H. H. Horhod, *Phys. Rev. B.* **52**, 2587 (1999).
- [77] D. Mortensen, G. Belev, C. Koughia, R. E. Johanson and S.O. Kasap, *Can. J. Phys.* **92**, 629(2014).
- [78] H. Suzuki, H. Meyer, J. Simmer, J. Yang and D. Haarer, *Adv. Mater.* **5**, 743 (1993).
- [79] G. F. Seynhaeve, R. P. Barclay, G. J. Adriaenssens and J. M. Marshall, *Phys. Rev. B.* **39**, 10196 (1989).
- [80] H. Oheda, *Philos. Mag. B.* **52**, 29 (1985).
- [81] A. N. Tikhonov, A. V. Goncharsky, V. V. Stepanov and A. G. Yagola, *Numerical Methods for the Solution of ill-Posed Problems* (1995).
- [82] S. O. Kasap and C. Juhasz, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **18**, 703 (1985).
- [83] B. Fogal , R. E. Johanson , G. Belev , S. O’Leary and S.O. Kasap, *J. Non-Cryst. Solids.* **299**, 993 (2002).
- [84] J. C. Shottmiller, M. D. Tabak, G. Lucovsky and A. T. Ward, *J. Non-Cryst. Solids.* **4**, 88 (1970).
- [85] S. O. Kasap and C. Juhasz, *Photogr. Sci. Eng.* **26**, 239 (1982).
- [86] M. D. Tabak and W. J. Hillegas, *J. Vac. Sci. Technol.* **9**, 387 (1971).
- [87] S. O. Kasap, K. V. Koughia, B. Fogal, G. Belev and R. E. Johanson, *Semiconductors.* **37**, 789 (2003).
- [88] M. L. Benkhedir, F. Djefafliia, M. Mansour and N. Qamhieh, *Phys. Status. Solidi. C.* **7**, 877 (2010).
- [89] B. Polischuk, S.O. Kasap, V. Aiyah, A. Baillie and M.A. Abkowitz, *Can. J. Phys.* **69**, 361 (1991).
- [90] B. Fogal and S. Kasap, *Can. J. Phys.* **92**, 634 (2014).
- [91] C. K. Wong, G. Lucovsky and J. Bernholc, *J. Non-Cryst. Solids.* **97**, 1171 (1987).
- [92] G. J. Adriaenssens and M. L. Benkhedir, *J. Non-Cryst. Solids.* **354**, 2687 (2008).
- [93] K. Koughia and S.O. Kasap, *J. Non-Cryst. Solids.* **352**, 1539 (2006).
- [94] H. Naito, T. Iwai, M. Okuda, T. Matsushita and A. Sugimura, *J. Non-Cryst.Solids.* **114**, 112, (1989).
- [95] P. Kounavis, *Solid. State. Commun.* **131**, 47 (2004).

- [96] C. Main, D. P. Webb, R. Bruggemann and S. Reynolds, *J. Non-Cryst. Solids*. **137&138**, 951 (1991).
- [97] R. Bruggemann, C. Main , J. Berkin and S. Reynolds, *Philos. Mag. B*. **62**, 29 (1990).
- [98] C. Main, R. Bruggemann, D. P. Webb and S. Reynolds, *J. Non-Cryst. Solids*.**164-166**, 481 (1993).
- [99] S. Reynolds, C. Main, D. P. Webb and S. Grabtchak, *J. Appl. Phys.* **279-282**, 88 (2000).
- [100] S. Grabtchak, C. Main and S. Reynolds, *J. Non-Cryst. Solids*.**266-269**, 362 (2000).

# Liste des communications et des publications

---

## Liste des communications

- **F. Serdouk** and M.L. Benkhedir, **Simulation of the band tail in amorphous semiconductors**, *Noth African Conference on Computational Physics and Chemistry*. Sidi Bel-Abbes, Algeria, December, 12-14, 2010
- **F. Serdouk** and M.L. Benkhedir, **Determination de la densité d'états (DOS) dans les semi-conducteurs amorphes par la technique de Laplace**, *International Conference on Non Equilibrium Materials ICONEM*, Annaba, Algeria, May 03-05, 2011.
- **F. Serdouk** and M. L. Benkhedir, **Band tail modeling in amorphous semiconductors**, *Le 1<sup>er</sup> Séminaire National sur la Physique Appliquée et Théorique SPAT'2014*, Tébessa, 16-17 December 2014.

## Liste des publications

- **Fadila Serdouk** and Mohammed Loutfi Benkhedir, **Density of states in pure and As doped amorphous selenium determined from transient photoconductivity using Laplace-transform method**, *Physica. B.* **459**, 122-128 (2015).