

Titre: Modélisation du transport par piégeage multiple de porteurs
Title: électronique dans le silicium amorphe hydrogéné

Auteur: Jesse Maassen
Author:

Date: 2006

Type: Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

Référence: Maassen, J. (2006). Modélisation du transport par piégeage multiple de porteurs
Citation: électronique dans le silicium amorphe hydrogéné [Mémoire de maîtrise, École
Polytechnique de Montréal]. PolyPublie. <https://publications.polymtl.ca/7922/>

 **Document en libre accès dans PolyPublie**
Open Access document in PolyPublie

URL de PolyPublie: <https://publications.polymtl.ca/7922/>
PolyPublie URL:

**Directeurs de
recherche:** Arthur Yelon, & Louis-André Hamel
Advisors:

Programme: Non spécifié
Program:

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

MODÉLISATION DU TRANSPORT PAR PIÉGEAGE MULTIPLE DE PORTEURS
ÉLECTRONIQUES DANS LE SILICIUM AMORPHE HYDROGÉNÉ

JESSE MAASSEN

DÉPARTEMENT DE GÉNIE PHYSIQUE
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

MÉMOIRE PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE MAÎTRISE ÈS SCIENCES APPLIQUÉES
(GÉNIE PHYSIQUE)
DÉCEMBRE 2006



Library and
Archives Canada

Bibliothèque et
Archives Canada

Published Heritage
Branch

Direction du
Patrimoine de l'édition

395 Wellington Street
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

395, rue Wellington
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Your file *Votre référence*
ISBN: 978-0-494-25555-1
Our file *Notre référence*
ISBN: 978-0-494-25555-1

NOTICE:

The author has granted a non-exclusive license allowing Library and Archives Canada to reproduce, publish, archive, preserve, conserve, communicate to the public by telecommunication or on the Internet, loan, distribute and sell theses worldwide, for commercial or non-commercial purposes, in microform, paper, electronic and/or any other formats.

The author retains copyright ownership and moral rights in this thesis. Neither the thesis nor substantial extracts from it may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

AVIS:

L'auteur a accordé une licence non exclusive permettant à la Bibliothèque et Archives Canada de reproduire, publier, archiver, sauvegarder, conserver, transmettre au public par télécommunication ou par l'Internet, prêter, distribuer et vendre des thèses partout dans le monde, à des fins commerciales ou autres, sur support microforme, papier, électronique et/ou autres formats.

L'auteur conserve la propriété du droit d'auteur et des droits moraux qui protègent cette thèse. Ni la thèse ni des extraits substantiels de celle-ci ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.

In compliance with the Canadian Privacy Act some supporting forms may have been removed from this thesis.

Conformément à la loi canadienne sur la protection de la vie privée, quelques formulaires secondaires ont été enlevés de cette thèse.

While these forms may be included in the document page count, their removal does not represent any loss of content from the thesis.

Bien que ces formulaires aient inclus dans la pagination, il n'y aura aucun contenu manquant.


Canada

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé:

MODÉLISATION DU TRANSPORT PAR PIÉGEAGE MULTIPLE DE PORTEURS
ÉLECTRONIQUES DANS LE SILICIUM AMORPHE HYDROGÉNÉ

présenté par: MAASSEN Jesse

en vue de l'obtention du diplôme de: Maîtrise ès sciences appliquées

a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de:

M. MEUNIER Michel, Ph.D., président

M. YELON Arthur, Ph.D., membre et directeur de recherche

M. HAMEL Louis-André, Ph.D., membre et codirecteur de recherche

M. MOVAGHAR Bijan, Ph.D., membre

Remerciements

Je souhaite remercier mon directeur de recherche, Arthur Yelon, pour m'avoir aidé et encadré durant mes études supérieures et durant la fin de mon baccalauréat. J'aimerais également remercier Louis-André Hamel pour avoir accepté la codirection de ce mémoire. Nos nombreuses discussions ont contribué à ma formation ainsi qu'à mon intérêt pour le silicium amorphe et pour la physique en général. Je tiens à souligner leur support financier durant toute la durée de ma maîtrise.

J'ai aussi apprécié les discussions sur le silicium amorphe avec Wen Chao Chen ainsi que son support technique.

Résumé

Nous étudions, avec la méthode Monte Carlo (MC), le transport par piégeage multiple (MT) des porteurs électroniques, en supposant une densité exponentielle des états localisés dans le silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H). Les buts de cette recherche sont (i) d'approfondir nos connaissances des mécanismes microscopiques du transport et (ii) de développer un modèle unifié pouvant reproduire adéquatement les données expérimentales dans tous les régimes de température, de champ électrique appliqué et de temps. D'abord, nous révisons la question du dépiégeage par effet tunnel et ce particulièrement pour un modèle à haut champ développé précédemment. Afin de rigoureusement inclure l'influence de l'effet tunnel dans le taux de dépiégeage $K_r(E)$, nous proposons que ce dernier est obtenu en faisant la somme des contributions des différents chemins de sortie Δx . Nous appliquons cette idée à un modèle existant. Nous suggérons la possibilité qu'un porteur peut piéger avec une contribution par effet tunnel. En appliquant le bilan détaillé, nous trouvons le taux de piégeage $k_c(E)$ incluant l'influence des Δx lorsque la forme du dépiégeage en fonction de Δx est définie.

Nous développons un modèle conjoint basé sur le transport par MT incluant l'effet Meyer-Neldel et le dépiégeage par effet tunnel. En modélisant les expériences de temps de vol par simulation MC, nous montrons que ce nouveau modèle, avec une série de cinq paramètres fixes, reproduit de manière satisfaisante le comportement en température et en champ électrique des résultats empiriques. Ceux-ci incluent le paramètre de dispersion pré-transit α_1 et les différentes définitions de la mobilité μ . Nous observons une contradiction entre la mobilité de dérive μ_D mesurée par deux groupes de recherche. Les données suggèrent que cette incohérence est due à des différences entre les échantillons ou aux difficultés expérimentales associées aux mesures à haut champ.

Nous trouvons que notre modèle est capable, avec une légère modification des paramètres optimaux trouvés auparavant, de reproduire les données expérimentales mesurées jusqu'à des temps de l'ordre d'une picoseconde. Ceci démontre que le transport par MT est dom-

inant à des temps courts ($t \sim 1$ ps) et longs ($t > 1$ ns). Nous montrons que les résultats picoseconde sont cohérents avec les résultats nanoseconde traditionnaux. Nos calculs suggèrent que le régime de transport sans-piégeage serait observable expérimentalement avec une amélioration en résolution temporelle d'un ordre de grandeur. Notre modèle est le premier, à notre connaissance, à produire des données en accord avec les expériences et ce pour tous les régimes de température, de champ électrique et de temps qui ont été étudiés jusqu'à présent.

Abstract

We study, using the Monte Carlo (MC) method, multiple trapping (MT) controlled charge transport assuming an exponential band tail in hydrogenated amorphous silicon (a-Si:H). The primary goals of this research are (i) to deepen our knowledge of the microscopic mechanisms for this type of transport and (ii) to develop a unified model able to adequately reproduce the experimental data in all temperature, field and time regimes. First, we review the physics of field assisted detrapping, particularly a high field model, developed earlier. In order to rigorously include the effects of tunneling on the release rate $K_r(E)$, we examine the sum of contributions from all the different tunneling paths Δx . We apply this idea to the model. We suggest the possibility that tunneling may contribute to carrier trapping. By applying the condition of detailed balance, we find that we may include the effects of tunneling on the capture rate $k_c(E)$ by properly defining the Δx dependent release rate.

We develop a unified model based on MT transport including the Meyer-Neldel effect and field assisted detrapping. By simulating time-of-flight experiments using the MC method, we show that this new model, which includes five fixed parameters, satisfactorily reproduces the temperature and field behavior of all the empirical results. These include the pre-transit dispersion parameter α_1 and alternative definitions of the mobility μ . We observe a contradiction between drift mobility μ_D measurements made by different laboratories. The data suggests that this inconsistency is due to differences between the samples or to inherent difficulties associated with high field measurements.

We find that our model is able, with a slight modification of the optimal parameters found previously, to reproduce the experimental data measured at all times longer than one picosecond. This shows that MT controlled transport is dominant at short ($t \sim 1$ ps) and long ($t > 1$ ns) times. We also show that picosecond domain data are compatible with the traditional nanosecond domain data. Our calculations suggest that trap-free transport could be experimentally observable with an improvement in time resolution of one order

of magnitude. Our model is the first, to our knowledge, to produce predictions in agreement with the experimental results for all temperature, field and time regimes studied to date.

Table des matières

Remerciements	iv
Résumé	v
Abstract	vii
Table des matières	ix
Liste des figures	xii
Liste des annexes	xv
Introduction	1
Chapitre 1 Semi-conducteurs amorphes, expérience de temps de vol, transport électronique et modélisation Monte Carlo	4
1.1 Semi-conducteurs amorphes	4
1.1.1 Structure atomique	4
1.1.2 Structure de bande et densité des états	5
1.2 Expérience de temps de vol	7
1.3 Transport électronique dans les semi-conducteurs amorphes	10
1.3.1 Modèle de conduction par sauts (« hopping »)	10
1.3.2 Modèle de piégeage multiple (MT)	12
1.4 Méthode de simulation Monte Carlo (MC)	16
1.4.1 Introduction	16
1.4.2 Méthode MC appliquée aux expériences de TOF avec le modèle MT	16
1.5 Conclusion	19

Chapitre 2	Révision de l'interaction par effet de champ (tunnel) entre les porteurs et la DOS localisés	21
2.1	Dépiégeage des états localisés : Effet tunnel et chemin de sortie (Δx) . . .	21
2.2	Le modèle DJM (« Diagonal Jump Model »)	22
2.2.1	Probabilité de dépiéger par un chemin de sortie $P(\Delta x)$	26
2.2.2	Comparaison entre $K_r(E, < \Delta x >)$ et $< K_r(E) >$	27
2.3	Taux d'émission $K_r(E)$: Sommation sur les chemins de sortie (Δx) . . .	27
2.4	Formulation du taux d'émission $K_r(E)$ dans le modèle DJM	29
2.4.1	Approximation dans l'expression de $k_r(E, \Delta x)$	33
2.5	Piégeage par effet tunnel	35
2.5.1	Bilan détaillé	36
2.5.2	Obtention de $\tilde{k}_c(E, \Delta x)$ par le bilan détaillé	37
2.6	Conclusion	39
Chapitre 3	Transport contrôlé par piégeage multiple avec effet Meyer-Neldel et dépiégeage par effet tunnel : Simulations de l'expérience de temps de vol dans le a-Si:H	40
3.1	Introduction	40
3.1.1	Effet Meyer-Neldel	41
3.1.2	Dépiégeage par effet tunnel	42
3.2	Modèle et Algorithme	44
3.2.1	Développement du modèle MN-DJM	44
3.2.2	Paramètres du modèle MN-DJM	48
3.2.3	Effet de négliger le courant et la charge induite tunnel	48
3.2.4	Algorithme de simulation	50
3.3	Résultats et Discussion	51
3.3.1	Paramètres optimaux	51
3.3.2	Présentation et discussion des résultats	51

3.4	Conclusion	57
Chapitre 4	Simulation des expériences de temps de vol à des temps de l'ordre de la picoseconde dans le a-Si:H	59
4.1	Introduction	59
4.2	Méthode expérimentale	60
4.3	Résultats et Discussion	62
4.4	Conclusion	69
	Conclusion	70
	Références	75
	Annexes	78

Liste des figures

Figure 1.1	Densité des états $g(E)$ en fonction de l'énergie E entre E_v et E_c . L'énergie de Fermi correspond à $E = 0$	6
Figure 1.2	Courant transitoire normalisé et charge induite normalisé versus le temps pour $T = 150$ K et $F = 50$ kV/cm. Les lignes pointil- lées possèdent des pentes de $-1 + \alpha_1$ et $-1 - \alpha_2$, où l'intersection correspond à t_T	9
Figure 1.3	Transport par MT et par sauts.	11
Figure 1.4	Mobilité de dérive, μ_D , versus $1000/T$ à $F = 20, 175$ kV/cm. Les données expérimentales proviennent de Tiedje (Tiedje, 1984) ($F = 20$ kV/cm et $L = 3.8 \mu\text{m}$) et de Nebel et Bauer (Nebel, 1989) ($F = 175$ kV/cm et $L = 4 \mu\text{m}$).	15
Figure 2.1	Diagramme d'énergie montrant le piégeage par effet tunnel pour un électron lorsque $F \neq 0$	22
Figure 2.2	Diagramme d'énergie montrant le piégeage et le dépiégeage pour le modèle DJM.	23
Figure 2.3	Taux de dépiégeage $K_r(E, \Delta x)$ versus Δx pour $E = 0.001, 0.02$ eV et $F = 25, 250$ kV/cm.	24
Figure 2.4	Comparaison entre $K_r(E, \Delta x_{opt})$ et $\langle K_r(E) \rangle$ versus E pour $T = 75, 250$ K.	28
Figure 2.5	Comparaison entre les deux solutions possibles de $K_r(E)$ versus E pour $T = 75, 250$ K.	32
Figure 2.6	Comparaison entre $k_r^{exacte}(E, \Delta x)$ et $k_r^{approx}(E, \Delta x)$ versus Δx . .	34
Figure 3.1	Diagramme d'énergie montrant le piégeage et le dépiégeage pour le modèle DJM.	43
Figure 3.2	Courant transitoire normalisé versus le temps pour $T = 100, 250$ K et $F = 50, 350$ kV/cm avec $L = 10 \mu\text{m}$	52

Figure 3.3	Paramètre de dispersion pré-transit α_1 versus T pour $F = 350$ kV/cm avec $L = 10 \mu\text{m}$. Les données expérimentales proviennent de Nebel et al. (Nebel, 1992).	53
Figure 3.4	Mobilité de dérive μ_D versus la température réciproque pour $F = 20, 75, 175$ kV/cm. Les données expérimentales proviennent de Tiedje (Tiedje, 1984) ainsi que Nebel et Bauer (Nebel, 1989).	54
Figure 3.5	Mobilité instantanée à $t = 30$ ns, μ_{30} , versus F pour $T = 100, 125, 150$ K avec $L = 10 \mu\text{m}$. Les points empiriques sont de Gu et al. (Gu, 1995).	55
Figure 3.6	Mobilité instantanée μ_t versus F pour $t = 30, 100, 300, 1000$ ns, $T = 77$ K et $L = 10 \mu\text{m}$. Les résultats expérimentaux sont de Gu et al. (Gu, 1995).	56
Figure 4.1	Charge induite $Q_{ind}(t)/Q_0$ calculée avec MN-DJM en fonction du temps pour $T = 285.7, 333.3$ K avec $F = 170$ kV/cm. La méthode pour obtenir t_T avec la pente initiale et le maximum de $Q_{ind}(t)$ est montrée pour la courbe à $T = 333.3$ K.	62
Figure 4.2	Mobilité de dérive μ_D versus la température réciproque pour $F = 130, 170$ kV/cm. Les données expérimentales proviennent de Devlen et al. (Devlen, 1989(1)).	63
Figure 4.3	Mobilité de dérive μ_D versus la température réciproque pour $F = 20, 75, 130, 170, 175$ kV/cm. Les lignes pleine et pointillée sont les mesures picosecondes de Devlen et al. (Devlen, 1989(1)) pour $F = 130, 170$ kV/cm respectivement. Les points sont les données nanosecondes expérimentales et calculées.	66
Figure 4.4	Vitesse de dérive v_D versus le champ électrique appliqué pour $T = 234, 263, 295, 396$ K. Les données expérimentales proviennent de Devlen et al. (Devlen, 1989(1)).	68

Figure III.1 Comparaison entre $k_r^{exacte}(E, \Delta x)$ et $k_r^{approx}(E, \Delta x)$ versus Δx .
Nous indiquons la valeur de $\Delta x = E/eF$ 83

Liste des annexes

Annexe I	Intégration de $K_r(E, \Delta x)$ dans le modèle DJM	78
Annexe II	Calcul de $\langle \Delta x \rangle$ pour le modèle DJM	80
Annexe III	Calcul de l'erreur introduite en utilisant l'expression approxi- mative de $k_r(E, \Delta x)$	82
Annexe IV	Optimisation du taux de dépiégeage $K_r(E, \Delta x)$ dans le modèle MN-DJM	84

Introduction

Le transport électronique dans les semi-conducteurs amorphes est un sujet intéressant et complexe, autant d'un point de vue théorique que pratique, en raison de la structure atomique désordonnée. Contrairement aux matériaux cristallins, la théorie semi-classique, basée sur le théorème de Bloch (et l'invariance translationnelle), utilisée pour calculer les états électroniques ainsi que les propriétés de transport, n'est pas applicable aux matériaux amorphes. Le désordre occasionne une densité d'états (DOS) localisés situés dans la bande interdite. La forte interaction entre les états localisés et les porteurs fait en sorte que le transport de ces derniers est dominé par la présence des états localisés. Donc, la forme particulière de la DOS est une quantité essentielle afin de décrire le transport électronique dans les semi-conducteurs amorphes. Il existe deux modèles de transport; (i) le transport par piègeage multiple (MT) propose que les porteurs piègent et dépiègent entre la bande de conduction (BC) et la DOS localisés et (ii) le transport par sauts (« hopping ») énonce que les porteurs sautent entre différents états localisés, en demeurant toujours sous le seuil de mobilité. Ces deux types de transport produisent des mobilités inférieures à celles mesurées dans les semi-conducteurs cristallins, ce qui n'est pas un avantage quant aux applications.

L'intérêt pour le silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) se situe dans les dispositifs macro-électroniques (à grande surface), en raison de la facilité et des faibles coûts liés à la fabrication, comparativement aux semi-conducteurs cristallins. Les applications les plus communes sont les cellules solaires, les détecteurs de particules et les transistors en couches minces. De plus, le a-Si:H peut être déposé à des faibles températures sur des substrats flexibles, tel que le plastique. L'évolution des technologies actuelles et futures utilisant le a-Si:H dépend de notre compréhension du transport des charges dans ce matériau. Une méthode couramment utilisée afin d'extraire les propriétés de transport est l'expérience de temps de vol. La principale motivation de la recherche présente est de

modéliser l'expérience de temps de vol dans le a-Si:H par la méthode Monte Carlo dans le but d'étudier les mécanismes microscopiques de transport. Un modèle de transport valide nous permet de déterminer la valeur des paramètres ajustables dont il dépend, en réduisant l'écart entre les résultats expérimentaux et calculés. Les paramètres nous informent sur les propriétés électroniques intrinsèques du matériau, telles que la mobilité microscopique et la forme de la DOS localisés.

Ce mémoire est divisé comme suit: Au premier chapitre, nous abordons les semi-conducteurs amorphes, ensuite nous décrivons l'expérience de temps de vol, la théorie standard de transport par MT et la méthode Monte Carlo. Cette dernière est une technique de calcul numérique que nous employons afin de simuler le problème de transport.

Dans le second chapitre, nous faisons une révision de l'interaction par effet tunnel entre les porteurs et la DOS localisés. Nous décrivons le dépiégeage par effet tunnel, et ce particulièrement pour un modèle développé par Chen et al. (Chen, 1999) nommé DJM (« Diagonal Jump Model »). Nous mettons en évidence certaines hypothèses incluses dans le modèle DJM jusqu'à présent inconnues. Nous proposons une méthode rigoureuse afin d'inclure l'influence de l'effet tunnel dans le taux de dépiégeage que nous appliquons par la suite au modèle DJM. Nous montrons comment, à l'aide du bilan détaillé, inclure l'effet tunnel dans l'expression du taux de piégeage.

Nous développons, au chapitre 3 ainsi que dans l'article (Maassen, 2005), un modèle conjoint basé sur le transport par MT incluant l'effet Meyer-Neldel et le dépiégeage par effet tunnel. Nous abordons la physique ainsi que la formulation mathématique de l'effet Meyer-Neldel et du dépiégeage assisté par champ. Nous présentons les idées qui mènent au développement du modèle conjoint. Nous montrons que ce modèle réussit à reproduire de manière satisfaisante, avec une seule série de paramètres fixes, le comportement en champ électrique et en température des données expérimentales.

Au chapitre 4 et dans l'article (Maassen, 2006), nous montrons que le modèle développé au chapitre 3 peut reproduire les résultats expérimentaux obtenus à des temps de l'ordre de la picoseconde avec une légère variation des paramètres optimaux. Par contre, ceci résulte en une légère détérioration en accord entre les calculs et les données empiriques mesurées à des temps supérieurs à une nanoseconde. Notre modèle produit des résultats satisfaisants pour tous les régimes de champ électrique, température et de temps ce qui constitue une première.

Enfin, dans la conclusion, nous récapitulons les résultats importants de cette recherche et nous proposons quelques voies de recherche intéressantes pour des travaux futurs.

Chapitre 1

Semi-conducteurs amorphes, expérience de temps de vol, transport électronique et modélisation Monte Carlo

Ce chapitre est consacré aux connaissances nécessaires pour la suite de ce mémoire. Nous abordons en premier lieu les semi-conducteurs amorphes, ensuite l'expérience de temps de vol, le transport électronique dans les semi-conducteurs amorphes et finalement la méthode numérique de Monte Carlo qui nous permet de résoudre les équations de transport.

1.1 Semi-conducteurs amorphes

1.1.1 Structure atomique

Une structure atomique amorphe signifie que les liaisons entre les atomes composant le matériau sont orientées de manière désordonnée. Celle-ci diffère d'une structure atomique cristalline qui présente une périodicité quant à l'arrangement atomique. Les matériaux amorphes ne sont pas complètement désordonnés. Dans le cas du silicium amorphe (a-Si) les propriétés suivantes sont sensiblement les mêmes en comparaison avec le silicium cristallin (c-Si): le nombre de voisins (4 liaisons covalentes), la distance interatomique et l'angle entre les liaisons. Puisque l'architecture atomique n'est pas entièrement aléatoire, les matériaux amorphes présentent un ordre à courte portée. À l'intérieur d'un rayon r de quelques distances interatomiques (r_a), le a-Si possède une structure semblable au c-Si, celle-ci devient désordonnée pour $r \gtrsim 3r_a$. En raison de ceci, comme nous allons le voir dans les sections subséquentes, le comportement électronique possède aussi une certaine

similitude dans les cas amorphe et cristallin.

Les défauts sont inévitables lors de la fabrication des semi-conducteurs cristallins et amorphes. Pour les cristallins, la position idéale de chaque atome est connue, donc n'importe quel écart entre le réseau réel par rapport au réseau idéal est un défaut. Les plus communs sont les lacunes (atome manquant d'un site) et les atomes interstitiels (atome en trop entre deux sites). Dans le cas amorphe, la définition précédente du défaut n'est pas applicable, car il n'existe pas de position prédite. Nous parlons plutôt de liaison pendante (« dangling bond ») qui est présente lorsqu'une liaison atomique n'a pas de voisin. Ces défauts sont à éviter puisqu'ils agissent comme des centres de recombinaison, réduisant ainsi fortement la conductivité. Ce problème est contourné en introduisant de l'hydrogène qui s'associe aux liaisons pendantes (la présence de l'hydrogène est inclus dans le symbole du matériau, a-Si:H et nous parlons alors de silicium amorphe hydrogéné).

En résumé, les trois caractéristiques principales des semi-conducteurs amorphes sont l'ordre à courte portée, le désordre à longue portée et la présence de liaisons pendantes.

1.1.2 Structure de bande et densité des états

Dans le cas d'un matériau cristallin, nous pouvons exploiter le concept du réseau réciproque. L'invariance translationnelle permet au vecteur d'onde \vec{k} d'être un bon nombre quantique, et le théorème de Bloch permet de solutionner l'équation de Schrödinger. En utilisant ce formalisme, nous avons une méthode établie pour calculer la densité des états électroniques et les propriétés de transport. Par contre, lors d'une analyse portant sur un matériau amorphe, ce cadre théorique n'est pas applicable.

Comme nous l'avons mentionné à la section précédente, il y a des similitudes entre les propriétés électroniques des structures amorphe et cristalline. Tel est le cas pour les bandes d'énergie. La mécanique quantique prédit, dans un solide cristallin, l'existence

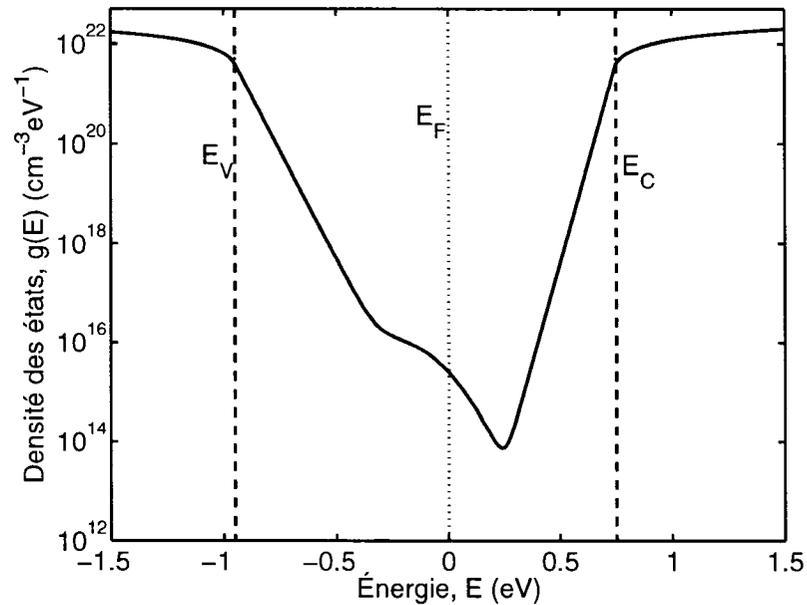


Figure 1.1 Densité des états $g(E)$ en fonction de l'énergie E entre E_v et E_c . L'énergie de Fermi correspond à $E = 0$.

d'une bande énergétique interdite dans laquelle il n'y a pas d'états électroniques. De manière analogue, les matériaux amorphes possèdent aussi une bande interdite. Mais, cette dernière est accompagnée d'une distribution continue d'états localisés située à l'intérieur de la bande. La fig. 1.1 montre la densité des états (DOS), $g(E)$, versus l'énergie E (Dubeau, 1996). Les états situés entre la bande de conduction (E_c) et la bande de valence (E_v) sont localisés. La présence des états localisés dans la bande interdite peut être expliquée par la localisation d'Anderson (Anderson, 1958). Avec un potentiel qui varie aléatoirement sur une certaine période, la localisation d'Anderson (en une dimension) nous informe que la transmission électronique tend exponentiellement vers zéro avec la période. Ce phénomène prédit l'existence d'états localisés et étendus qui dépendent de l'énergie. Les porteurs interagissent fortement avec la DOS localisés et le comportement électrique du a-Si:H est dominé par la présence de celle-ci. La distribution des états localisés est donc une quantité physique essentielle lors du développement d'un modèle de transport dans les semi-conducteurs amorphes. Il y a plusieurs expériences (Tiedje,

1981; Orenstein, 1981; Winer, 1988; Aljishi, 1990) et calculs (Dong, 1998) qui supportent l'hypothèse que la DOS possède une distribution exponentielle de la forme:

$$g(E) = g_0 \exp\left(\frac{-E}{k_B T_0}\right), \quad E \geq 0, \quad (1.1)$$

où g_0 est une constante ($[g_0] = \text{cm}^{-3} \text{eV}^{-1}$, notons qu'une quantité entre crochets désigne les unités de celle-ci), $k_B = 8.61734 \times 10^{-5} \text{ eV K}^{-1}$ est la constante de Boltzmann et T_0 est la température caractéristique de la DOS localisés. Nous supposons l'énergie croissant de la bande de conduction vers la bande de valence. Marshall et al. (Marshall, 1986) ont rapporté des données qui ne sont pas en accord avec une DOS exponentielle. Mais, la majorité des expériences et des calculs appuient la forme de l'éq.(1.1).

Les défauts, dans les structures amorphes, créent des états localisés qui se situent environ au milieu de la bande interdite ($\approx E_F$). Nous négligeons l'influence de ces états, puisque le temps de vie moyen du porteur libre qui interagit avec ceux-ci est $\sim 1 \text{ s}$ (Street, 1991) comparativement à $\langle t_c \rangle \sim 10^{-11} \text{ s}$ (voir section 1.4.2) pour les états localisés dus au désordre. À très faible température le transport électronique est dominé par les états localisés situés à $\approx E_F$ (Mott, 1969), mais dans ce travail $T > 75 \text{ K}$.

1.2 Expérience de temps de vol

L'expérience de temps de vol (TOF, « Time-of-flight ») est une technique puissante et communément utilisée pour l'étude des propriétés de transport dans les semi-conducteurs amorphes (et d'autres matériaux à faible mobilité). Cette méthode a été développée par Spear (Spear, 1968) à la fin des années 60. Nous illuminons une extrémité de l'échantillon avec une impulsion laser très courte (photons d'énergie $E_{\text{photon}} = \hbar\omega$), afin de générer une « feuille » bi-dimensionnelle de porteurs libres (électrons et trous) sous le contact (à $x = 0$). Par après, un des types de porteurs voyage à travers l'échantillon sous l'influence

du champ électrique appliqué, F . Le champ électrique doit demeurer uniforme, donc pour négliger l'influence de la charge d'espace (champ électrique créé par la séparation des paires électrons-trous), nous générons un faible nombre de porteurs N_0 (comparativement au nombre de porteurs associé à F). Durant l'expérience, les porteurs sont piégés par les états localisés situés sous le seuil de mobilité, puis, par activation thermique ils retournent vers la bande de conduction. Les porteurs piègent et dépiègent jusqu'au moment où ils sont collectés (à $x = L$). Le mouvement des porteurs libres induit un courant qui est mesuré par le circuit externe. Toute l'information concernant la physique des interactions entre les porteurs et la DOS localisés est tirée des courbes de courant transitoire $I(t)$. Pour les semi-conducteurs amorphes, nous observons couramment un courant qui obéit une loi de puissance décroissante de la forme:

$$I(t) \sim \begin{cases} (\nu_0 t)^{-1+\alpha_1} & : t \lesssim t_T, \\ (\nu_0 t)^{-1-\alpha_2} & : t \gtrsim t_T, \end{cases} \quad (1.2)$$

où ν_0 est une fréquence d'essai, α_1 et α_2 sont les paramètres de dispersion pré-transit et post-transit respectivement et t_T est le temps de transit (temps moyen pour traverser l'échantillon). La fig. 1.2 montre le courant transitoire I et la charge induite Q_{ind} ($= \int_0^t I(t') dt'$) en fonction du temps t . Les lignes pointillées sont tangentes aux pentes $-1 + \alpha_1$ et $-1 - \alpha_2$, et t_T , dans ce cas, est défini par l'intersection entre ces deux droites. À la section 1.3, nous aborderons deux modèles de transport pouvant expliquer la forme du courant donnée par l'éq.(1.2).

À partir des courbes de courant en fonction du temps, nous obtenons toutes les données présentées dans la littérature, telles que t_T , α_1 , α_2 et la mobilité de dérive μ_D qui est définie comme

$$\mu_D = L/t_T F, \quad (\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}) \quad (1.3)$$

où L est la longueur de l'échantillon. Nous verrons aux chapitres 3 et 4 qu'il existe des

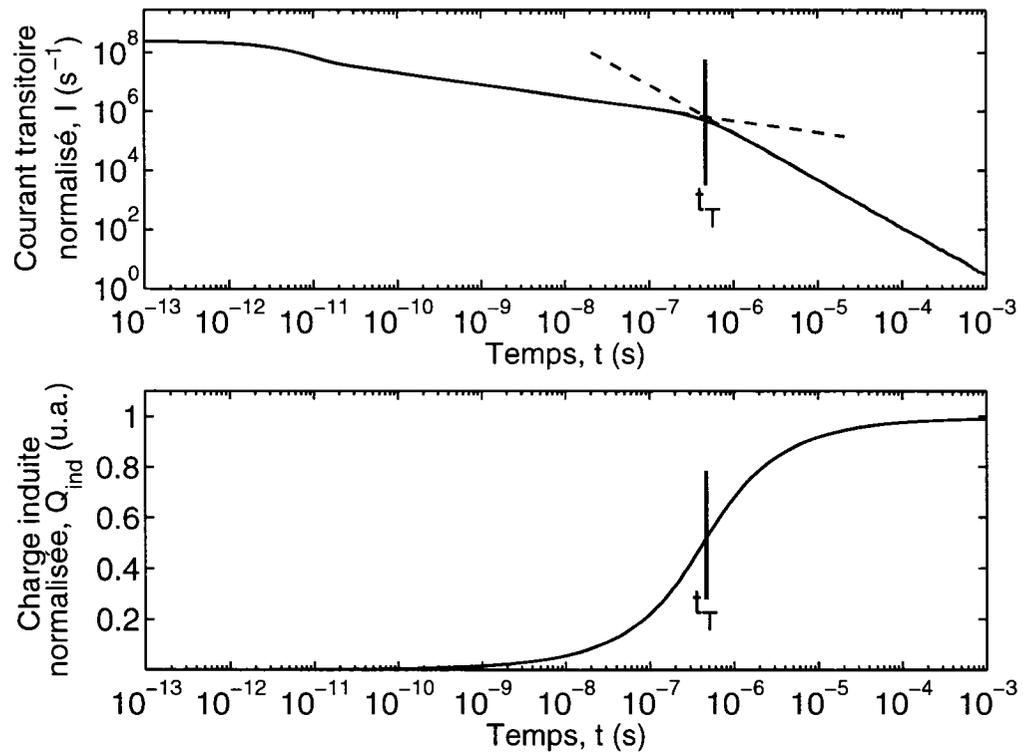


Figure 1.2 Courant transitoire normalisé et charge induite normalisé versus le temps pour $T = 150$ K et $F = 50$ kV/cm. Les lignes pointillées possèdent des pentes de $-1 + \alpha_1$ et $-1 - \alpha_2$, où l'intersection correspond à t_T .

définitions alternatives de μ_D et de t_T .

1.3 Transport électronique dans les semi-conducteurs amorphes

Pour expliquer le comportement dispersif observé du transport (courant possédant une forme similaire à l'éq.(1.2)) dans les semi-conducteurs amorphes, deux modèles de transport fondamentaux ont été développés. Dans le modèle de conduction par sauts (modèle « Hopping »), le transport des porteurs se fait par des sauts entre les états localisés. Le mouvement net des porteurs est orienté, pour les trous (électrons), dans la direction (opposée) du champ électrique appliqué. Le modèle de piégeage multiple (MT, « Multiple trapping »), décrit le transport des porteurs par une série de sauts entre la bande de conduction (BC) et les états localisés. Le porteur avance, sous l'influence du champ, lorsqu'il se situe au-dessus du seuil de mobilité. Il y a eu consensus que le transport est dominé par le modèle MT pour $T > 100$ K, tandis que le modèle de conduction par sauts est dominant lorsque $T < 100$ K (Spear, 1989). De plus, il a été démontré par Schmidlin (Schmidlin, 1977) et Noolandi (Noolandi, 1977), que le comportement du courant transitoire dans le domaine de Laplace est équivalent pour le transport par MT et par sauts. Nous allons maintenant aborder les formulations mathématiques de ces deux modèles.

1.3.1 Modèle de conduction par sauts (« hopping »)

Dans le modèle de conduction par sauts, le transport se fait par des sauts entre les états localisés. Nous pouvons définir une fréquence (ou taux) de sauts ν_{ij} , qui représente le nombre de sauts effectués par seconde du site i vers le site j (voir fig. 1.3). Entre les deux états i et j , il y a une distance $\Delta\vec{r}_{ij} = \vec{r}_j - \vec{r}_i$ et une différence d'énergie $\Delta E_{ij} = E_j - E_i - q\vec{F} \cdot \vec{r}_{ij}$, où \vec{r}_μ et E_μ sont la position et l'énergie du site μ , F est le champ électrique et $q = \pm|e|$ est la charge élémentaire avec le signe $+$ ($-$) pour les trous (électrons). Pour

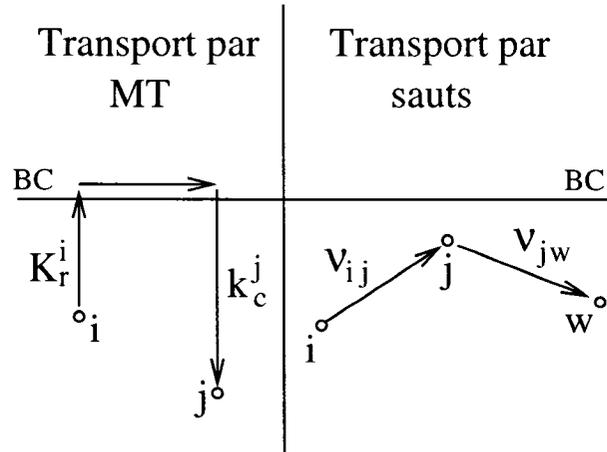


Figure 1.3 Transport par MT et par sauts.

le modèle « hopping » standard, ν_{ij} est donné par:

$$\nu_{ij} = \nu_0 \begin{cases} \exp(-2|\Delta r_{ij}|/a) \exp(-\Delta E_{ij}/k_B T) & : \Delta E_{ij} > 0, \\ \exp(-2|\Delta r_{ij}|/a) & : \Delta E_{ij} \leq 0, \end{cases} \quad (1.4)$$

où a est la longueur de localisation et T est la température. L'éq.(1.4) est composée d'un produit de deux termes, un pour l'effet tunnel (contenant la distance $|\Delta r_{ij}|$) et l'autre pour l'activation thermique qui est nécessaire lorsque $\Delta E_{ij} > 0$ (pour un saut vers le haut). Le transport « hopping » est décrit par l'équation suivante (Grunewald, 1989):

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = \sum_j (\nu_{ji} n_j - \nu_{ij} n_i), \quad (1.5)$$

où n_μ est la densité de porteurs à l'état μ . Malgré que ce modèle est capable de reproduire le comportement du courant en fonction du temps (éq.(1.2)), puisque que nous croyons que celui-ci est dominant seulement lorsque $T < 100$ K, nous choisissons d'utiliser le modèle de piégeage multiple pour décrire le transport des porteurs (pour la suite de ce travail).

1.3.2 Modèle de piégeage multiple (MT)

Le modèle MT est différent du modèle « hopping » par le fait que les porteurs avancent dans l'échantillon, sous l'influence du champ électrique appliqué, lorsqu'ils se trouvent au-dessus du seuil de mobilité. Comme nous avons le voir au prochain chapitre, un porteur peut dépiéger par effet tunnel contribuant un certain déplacement (et courant), mais ce phénomène est négligeable par rapport à la distance moyenne parcourue par un porteur dans la bande. La mobilité de dérive est environ un ordre de grandeur plus élevée dans le cas du transport par MT comparativement du modèle « hopping ». Donc, si ces deux mécanismes de transport sont présents simultanément, le transport par MT serait dominant (sauf à faible température).

En se basant sur les travaux de Tefft (Tefft, 1967) et de Zanio et al. (Zanio, 1967), le modèle MT a été développé indépendamment par Schmidlin (Schmidlin, 1977; Schmidlin, 1980) et Noolandi (Noolandi, 1977). Par après, les calculs de ces derniers ont été repris par Tiedje (Tiedje, 1984) afin de les appliquer au a-Si:H. Les porteurs qui se situent dans la bande de conduction se déplacent à une vitesse constante donnée par $\vec{v} = \mu_0 \vec{F}$, où μ_0 est la mobilité microscopique avec $\mu_0 > 0$ ($\mu_0 < 0$) pour les trous (électrons). Les porteurs piégés sont immobiles. En utilisant ces hypothèses, les équations de transport en une dimension (en supposant un champ électrique uniforme appliqué selon x) sont:

$$\frac{\partial n_f}{\partial t} = \sum_{i=1}^{\infty} (K_r^i n_t^i - K_c^i n_f) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_0 F n_f - D \frac{\partial n_f}{\partial x} \right) + g(x, t) \quad (\text{s}^{-1} \text{cm}^{-3}) \quad (1.6)$$

$$\frac{\partial n_t^i}{\partial t} = K_c^i n_f - K_r^i n_t^i \quad (\text{s}^{-1} \text{cm}^{-3}) \quad (1.7)$$

où $n_f(x, t)$ et $n_t^i(x, t)$ sont les densités de porteurs dans la bande et dans l'état localisé i , D est la constante de diffusion, K_r^i et K_c^i sont les taux d'émission et de piégeage pour l'état localisé i et $g(x, t)$ est une fonction de génération-recombinaison. Nous allons négliger l'influence de la diffusion ($|\mu_0 F \partial n_f / \partial x| \gg |D \partial^2 n_f / \partial x^2|$), car ce phénomène résulte en

une dispersion qui est faible comparativement à celle due à l'interaction entre les porteurs et la DOS localisés. Expérimentalement, la génération des porteurs prend une forme exponentielle décroissante en x . Si la distance moyenne de pénétration de l'impulsion laser est petite par rapport à la longueur de l'échantillon, alors nous pouvons représenter la fonction génération par $g(x, t) = N_0 \delta(x) \delta(t - 0^+)$ où N_0 est le nombre de porteurs par unité de surface initialement générés en $x = 0$. Notons que nous avons négligé la recombinaison et que nous supposons que tous les porteurs injectés se situent initialement dans la bande de conduction (car $E_{photon} > E_{gap}$). Toute la physique du transport des charges est incluse dans les expressions des taux de piégeage et de dépiégeage.

Afin d'éviter de travailler avec des sommations contenant une infinité de termes, nous transformons les sommations en intégrales. Ceci implique $\sum_i \rightarrow \int dE$, $K_r^i \rightarrow K_r(E)$, $K_c^i \rightarrow k_c(E)$ et $n_t^i(x, t) \rightarrow n_t(E, x, t)$ où $[K_r(E)] = s^{-1}$, $[k_c(E)] = s^{-1}eV^{-1}$ et $[n_t(E, x, t)] = cm^{-3}eV^{-1}$.

Le taux de dépiégeage $K_r(E)$, dans le modèle MT standard, est donné par la relation suivante:

$$K_r(E) = \nu_0 \exp(-E/k_B T). \quad (1.8)$$

Selon cette équation, les porteurs sont activés thermiquement au-dessus du seuil de mobilité. Nous pouvons définir le taux de piégeage k_c comme étant (Schmidlin, 1977) $k_c(E) = g(E) \sigma \langle v \rangle$, où $\sigma \sim 10^{-15} cm^{-2}$ est la section efficace et $\langle v \rangle \sim 10^7 cm s^{-1}$ est la vitesse thermique des porteurs dans la bande. En appliquant le bilan détaillé et en utilisant la DOS localisés donnée par l'éq.(1.1), nous obtenons

$$k_c(E) = (\nu_0/k_B T) \exp(-E/k_B T_0). \quad (1.9)$$

En utilisant les éqns.(1.8),(1.9), une solution analytique approximative (exacte pour $\alpha_1 = 1/2$) des équations de transport (éqns.(1.6),(1.7)) a été obtenue par Chen et Hamel (Chen,

1995). Chen et Hamel ainsi que Tiedje (Tiedje, 1984), en étudiant le comportement asymptotique du courant, ont démontré que ce modèle prédit une loi de puissance pour le courant qui est en accord avec l'éq.(1.2). Des méthodes numériques (Chen, 1996) ont démontré que le modèle MT reproduit les tendances des données expérimentales, mais de manière insatisfaisante.

Chen et al. (Chen, 1997) ont inclus l'effet Meyer-Neldel (MN), ce qui résulte en une augmentation du taux de dépiégeage pour les états profonds, dans le modèle MT standard. Leurs résultats montrent que cet effet améliore l'accord entre les données calculées et expérimentales, particulièrement pour F faible. Par après, Chen et al. (Chen, 1999) ont aussi inclus un effet de dépiégeage par effet tunnel dans le modèle MT standard. Dans ce cas, le modèle donne des résultats satisfaisants lorsque $T > 150$ K. À la fig. 1.4, nous comparons les modèles MN et DJM, en utilisant les paramètres optimaux (voir (Chen, 1997) et (Chen, 1999)), aux données expérimentales mesurées à champ élevé et faible respectivement pour montrer les lacunes de ces modèles. Nous voyons que le modèle MN ne reproduit pas correctement les résultats empiriques à $F = 175$ kV/cm. Pour $T < 140$ K, l'écart entre les données du modèle et de l'expérience augmente avec $1000/T$. À faible champ, le modèle DJM surestime μ_D lorsque $T < 150$ K. De plus, inclure l'effet MN dans le modèle MT (le modèle DJM est équivalent au modèle MT lorsque $F \rightarrow 0$) améliore particulièrement le comportement du paramètre de dispersion pré-transit, α_1 , en fonction de T (Chen, 1997).

L'effet tunnel et l'effet MN seront revus en détail au chapitre 3, car nous allons inclure simultanément ces effets dans les expressions de $K_r(E)$ et $k_c(E)$, afin de développer un modèle de transport qui reproduit correctement les données expérimentales dans tous les régimes. Puisque nous ne possédons pas de solution analytique, nous employons une méthode numérique afin de simuler les expériences de TOF avec une grande précision, plus spécifiquement nous utilisons la technique de Monte Carlo.

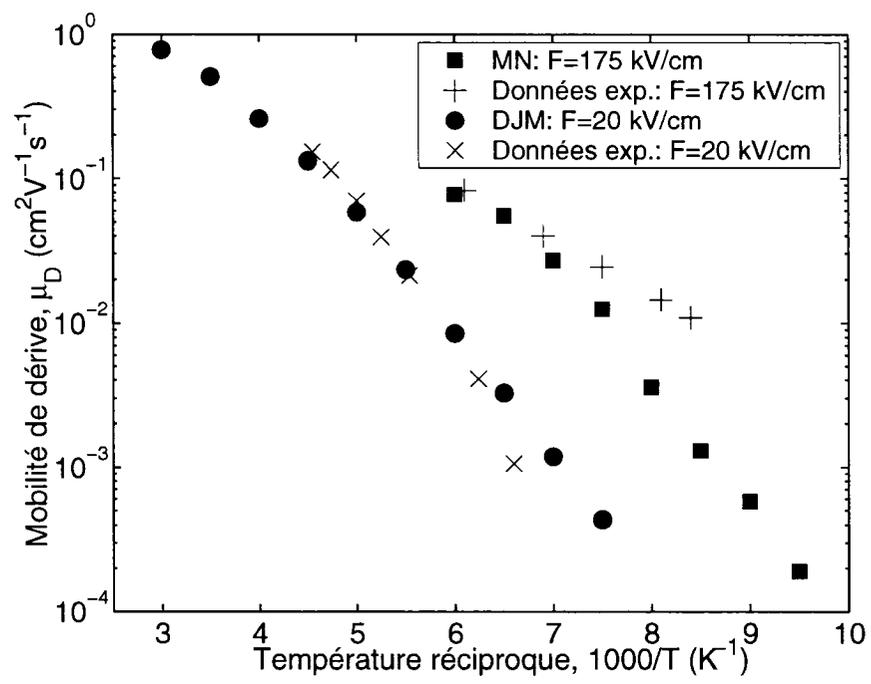


Figure 1.4 Mobilité de dérive, μ_D , versus $1000/T$ à $F = 20, 175 \text{ kV/cm}$. Les données expérimentales proviennent de Tiedje (Tiedje, 1984) ($F = 20 \text{ kV/cm}$ et $L = 3.8 \mu\text{m}$) et de Nebel et Bauer (Nebel, 1989) ($F = 175 \text{ kV/cm}$ et $L = 4 \mu\text{m}$).

1.4 Méthode de simulation Monte Carlo (MC)

1.4.1 Introduction

La méthode MC est une technique numérique employée pour simuler divers problèmes physiques et mathématiques avec une excellente précision. Cette méthode est stochastique, c'est-à-dire non-déterministe, puisque les calculs sont effectués avec des nombres choisis aléatoirement. Les calculs MC sont efficaces afin de résoudre des équations intégrales, des équations différentielles et des équations aux dérivées partielles. Naturellement, cette méthode est communément utilisée dans tous les domaines des sciences, tels que la physique, la chimie, la biologie, les mathématiques (pour plus d'information, voir (Kalos, 1986)).

Pour employer la méthode MC, il s'agit d'exprimer le problème considéré sous une forme probabiliste, c'est-à-dire connaître la distribution de probabilité des quantités d'intérêt. Avec ces équations, en choisissant aléatoirement un nombre entre 0 et 1 nous déterminons la valeur de la variable, tout en respectant la dynamique du problème. Au lieu de calculer la probabilité associée à un événement choisi, nous faisons le contraire. En utilisant un générateur de nombres aléatoires uniformément distribués entre 0 et 1, et en recommençant cette procédure un grand nombre de fois, les résultats moyens tenderont vers les valeurs exactes. Voyons comment cette procédure est appliquée dans le cas du transport de charge dans les semi-conducteurs amorphes (éqns.(1.6),(1.7)).

1.4.2 Méthode MC appliquée aux expériences de TOF avec le modèle MT

Nous allons maintenant montrer comment adapter le problème de transport de charges par piégeage multiple dans les semi-conducteurs amorphes (éqns.(1.6),(1.7)), afin d'exploiter

la méthode MC. Comme nous avons expliqué auparavant, le modèle MT prédit la routine suivante pour les porteurs injectés: (i) Initialement un porteur se déplace au-dessus du seuil de mobilité durant un certain temps, t_c , à une vitesse $\mu_0 F$ et parcourt une distance $\mu_0 F t_c$. (ii) Le porteur est piégé par un état localisé d'énergie E et demeure immobile durant un temps, t_r . Par après, il est réémis vers la bande de conduction et il répète l'étape (i). La dynamique d'un paquet de porteurs respectant le transport décrit ci-dessus est représentée par les solutions des éqns.(1.6),(1.7). Nous voyons que pour décrire le transport d'un porteur, il faut déterminer t_c , E et t_r pour chaque évènement de piégeage-dépiégeage.

Avec l'éq.(1.6), nous observons que le nombre de porteurs qui piègent par unité de temps est

$$\left(\frac{\partial n_f}{\partial t} \right)_{\text{BC} \rightarrow \text{DOS}} = - \int_0^\infty k_c(E) n_f dE = -K_c n_f, \quad (1.10)$$

où $K_c = \int_0^\infty k_c(E) dE$ et BC→DOS indique une transition de la bande de conduction vers la DOS localisés. En solutionnant l'éq.(1.10), nous trouvons,

$$n'_f(t) = n_0 \exp(-K_c t), \quad (1.11)$$

où n_0 est une constante et n'_f (éq.(1.11)) décrit l'évolution temporelle de la densité des porteurs libres en considérant seulement le piégeage. Notons que $n'_f(t)$ est indépendant de x , puisque la résolution de l'éq.(1.10) exclut le déplacement spatial des porteurs. En supposant que tous les porteurs sont indépendants et que la DOS est beaucoup plus grande que la densité des porteurs localisés, la distribution de probabilité de piégeage est proportionnelle à $n'_f(t)$ (éq.(1.11)). En normalisant l'éq.(1.11), nous obtenons,

$$P(t_c) = \frac{n'_f(t_c)}{\int_0^\infty n'_f(t') dt'} = K_c \exp(-K_c t_c). \quad (\text{s}^{-1}) \quad (1.12)$$

$P(t_c) dt_c$ représente la probabilité pour un porteur de ne pas piéger durant un temps t_c et

de piéger dans l'intervalle $[t_c, t_c + dt_c]$. En intégrant $P(t_c)$, nous pouvons écrire $R_1 = \int_0^{t_c} K_c \exp(-K_c t') dt' = 1 - \exp(-K_c t_c)$ et par la suite isoler t_c ,

$$t_c = -K_c^{-1} \ln(1 - R_1), \quad (1.13)$$

où R_1 est un nombre réel entre 0 et 1. Donc, en choisissant m nombres aléatoires uniformément générés dans l'intervalle $[0, 1]$, nous trouvons m valeurs de t_c pour un évènement de piégeage. Lorsque $m \rightarrow \infty$, la distribution des t_c est parfaitement en accord avec celle donnée par la solution des éqns.(1.6),(1.7). Ensuite, il s'agit de déterminer l'énergie E du piège. En regardant l'éq.(1.10), nous voyons que la distribution de piégeage en fonction de E est proportionnelle à $k_c(E)$. En normalisant $k_c(E)$, nous obtenons,

$$P(E) = \frac{k_c(E)}{K_c}, \quad (\text{eV}^{-1}) \quad (1.14)$$

Encore une fois, nous pouvons écrire, $R_2 = (1/K_c) \int_0^E k_c(E') dE'$, où R_2 est un nombre réel entre 0 et 1. Dans ce cas, pour isoler E , il faut connaître la forme de $k_c(E)$. Posons la forme la plus générale (voir section 1.3.2), $k_c(E) = g(E) \sigma < v >$. En utilisant cette relation avec la DOS localisés donnée par l'éq.(1.1), nous trouvons que $P(E) = (k_B T_0)^{-1} \exp(-E/k_B T_0)$ et $R_2 = 1 - \exp(-E/k_B T_0)$. Cette dernière équation nous permet d'écrire,

$$E = -k_B T_0 \ln(1 - R_2). \quad (1.15)$$

Il est intéressant de noter que l'éq.(1.15) ainsi que $P(E)$ dépendent seulement de la distribution de la DOS localisés (seulement vrai pour le modèle MT standard). Finalement, en suivant les mêmes idées qui ont mené à éq.(1.13) pour t_c , nous trouvons pour t_r ,

$$P(t_r) = K_r(E) \exp(-K_r(E) t_r), \quad (\text{s}^{-1}) \quad (1.16)$$

et

$$t_r = -[K_r(E)]^{-1} \ln(1 - R_3). \quad (1.17)$$

Contrairement à t_c , il faut connaître l'énergie du piège pour calculer t_r .

Pour simuler le transport par piégeage multiple dans l'expérience de TOF, nous suivons l'algorithme suivant: (i) Nous choisissons R_1 pour calculer le temps de vol libre t_c (éq.(1.13)). Durant ce temps, le porteur se déplace à une vitesse $\mu_0 F$, il avance d'une distance $\mu_0 F t_c$ et il contribue un courant $I = e\mu_0 F/L$. (ii) Ensuite, nous choisissons R_2 pour déterminer l'énergie du piège E (éq.(1.15)). (iii) Finalement, nous utilisons R_3 avec E (calculée à l'étape (ii)) afin de trouver le temps de dépiégeage t_r (éq.(1.17)). Pendant ce temps, le porteur est immobile et ne contribue pas au courant.

Cette procédure est répétée jusqu'au moment où le porteur est collecté ($x = L$). Nous simulons un porteur à la fois et les résultats sont obtenus en sommant les contributions d'un grand nombre de porteurs (10^5 - 10^6).

1.5 Conclusion

Les semi-conducteurs amorphes possèdent une DOS localisés située dans la bande interdite. Le transport des porteurs électroniques dans ces matériaux est dominé par l'interaction entre les états localisés et les porteurs. L'expérience de temps de vol est une technique puissante pour extraire de l'information sur les mécanismes fondamentaux du transport à partir des courbes de courant (qui démontrent un comportement dispersif donné par l'éq.(1.2)). Il existe deux modèles qui reproduisent le comportement observé du courant transitoire: le modèle de piégeage multiple et le modèle « hopping ». Pour la suite de ce travail, nous utilisons le transport par MT, étant donné que celui-ci est dominant pour $T > 100$ K ainsi que l'algorithme présenté à la section 1.4.2 pour simuler les expériences

de TOF dans les chapitres 3 et 4.

Chapitre 2

Révision de l'interaction par effet de champ (tunnel) entre les porteurs et la DOS localisés

Dans cette partie du travail, nous abordons le piégeage et le dépiégeage des porteurs par effet tunnel. Nous expliquons en détail le modèle DJM (« Diagonal Jump Model ») et nous justifions ou modifions certaines hypothèses incluses dans celui-ci. Nous souhaitons établir une méthode rigoureuse afin d'inclure l'influence de l'effet tunnel dans le transport par piégeage multiple (MT).

2.1 Dépiégeage des états localisés : Effet tunnel et chemin de sortie (Δx)

Dans le modèle standard MT, l'activation thermique est le seul processus par lequel les porteurs piégés dans les états localisés peuvent accéder aux états étendus. L'absorption d'un phonon par un porteur localisé fournit l'énergie nécessaire afin de surmonter la barrière énergétique et de se retrouver au-dessus du seuil de mobilité. Physiquement, il est aussi plausible qu'un porteur dépiège par effet tunnel (voir fig. 2.1). Dans ce cas, le porteur qui se trouve initialement à E_i traverse la barrière énergétique (sans la surmonter) pour accéder à la bande de conduction où $E_f = E_i$. La probabilité de dépiéger par effet tunnel, P_{tunnel} , dépend de la distance entre les états initial et final, Δx . Cette fonction prend la forme suivante: $P_{tunnel}(\Delta x) \propto \exp(-2\Delta x/a)$ où a est la longueur de localisation (étendue spatiale moyenne de la fonction d'onde du porteur piégé ~ 1 nm). En supposant un champ électrique appliqué F constant, la distance spatiale entre l'état localisé et la bande de conduction (BC) est $\Delta x = E/eF$, où E est l'énergie du piège. Nous observons que Δx (P_{tunnel}) augmente (diminue) avec une augmentation de F . Ce type de

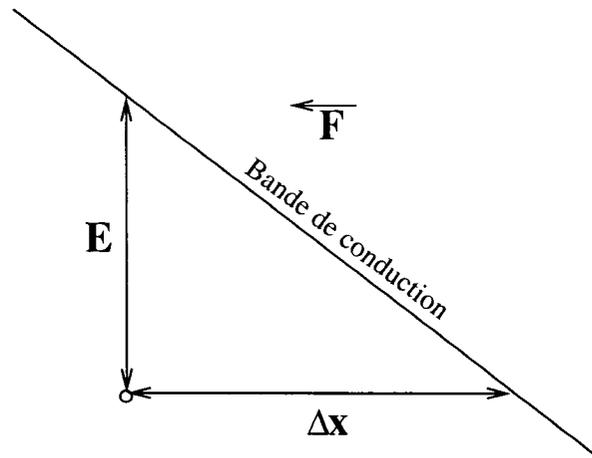


Figure 2.1 Diagramme d'énergie montrant le piégeage par effet tunnel pour un électron lorsque $F \neq 0$.

dépiégeage devient favorable lorsque F est assez grand de manière à ce que $\Delta x \sim a$.

2.2 Le modèle DJM (« Diagonal Jump Model »)

Le dépiégeage par effet tunnel a été inclus dans le modèle MT standard, initialement par Esipov (Esipov, 1991). Ce modèle nommé « Elastic tunnelling model » (ETM), permet à un porteur de dépiéger soit thermiquement ou par effet de champ (tunnel), ces processus sont considérés indépendants. Une conséquence de cette hypothèse est que les porteurs doivent piéger par effet tunnel dans le sens contraire de la force électrique, ce qui n'est pas physiquement satisfaisant. En raison de cette incohérence et du traitement séparé des mécanismes de dépiégeage, Chen et al. ont proposé un modèle amélioré nommé « Diagonal Jump Model » (DJM) (Chen, 1999). DJM décrit l'émission d'un porteur comme étant un seul processus composé de deux contributions simultanées: une thermique (saut vertical: $E_f \neq E_i$ et $\Delta x = 0$) et une par effet tunnel (saut horizontal: $E_f = E_i$ et $\Delta x \neq 0$). Le résultat net est un saut diagonal où $E_f \neq E_i$, $\Delta x \neq 0$ et $E_f = E_i + e\Delta x F$ (voir la fig. 2.2). Pour déterminer l'énergie de l'état final, connaissant l'énergie du piège, il faut

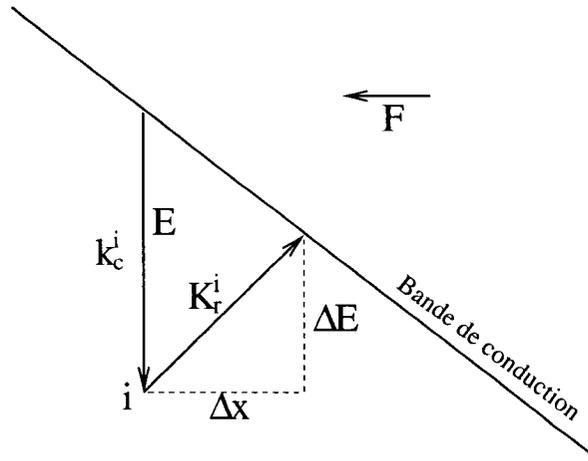


Figure 2.2 Diagramme d'énergie montrant le piègeage thermique et le dépiégeage assisté par champ pour un électron lorsque $F \neq 0$ (modèle DJM).

spécifier Δx . Chen et al. ont supposé la forme suivante pour le taux d'émission,

$$K_r(E, \Delta x) = \nu_0 \exp \left(-\sqrt{(2\Delta x/a)^2 + (\Delta E/k_B T)^2} \right), \quad (\text{s}^{-1}) \quad (2.1)$$

où $\Delta E = E - e\Delta x F$ est la différence d'énergie entre les états initial (localisé) et final (étendu). Lorsque $F \rightarrow 0$, la distribution donnée par l'éq.(2.1) est symétrique et localisée autour de $\Delta x = 0$ (effet de champ faible et dépiégeage thermique favorable). Si F est très grand, l'éq.(2.1) est fortement non-symétrique et localisée autour d'un point $\Delta x_{opt} > 0$ (effet de champ favorable et dépiégeage thermique faible). Notons que l'éq.(2.1) ne découle pas d'un calcul basé sur les premiers principes, la dépendance en E et en Δx est posée. À la fig. 2.3, nous avons tracé $K_r(E, \Delta x)$ (éq.(2.1)) en fonction de Δx pour $E = 0.001, 0.02 \text{ eV}$ et $F = 25, 250 \text{ kV/cm}$.

L'éq.(2.1) donne le taux d'émission lorsque les valeurs de E et Δx sont spécifiées. Il est souhaitable d'éliminer la variable Δx de l'expression de K_r , car les équations de transport n'en tiennent pas compte et parce que la valeur de Δx n'est pas connue (seulement la distribution de probabilité $P(\Delta x)$). En observant que $K_r(E, \Delta x)$ est souvent fortement dominé par la valeur de Δx qui optimise cette fonction, Chen et al. ont choisi d'exprimer

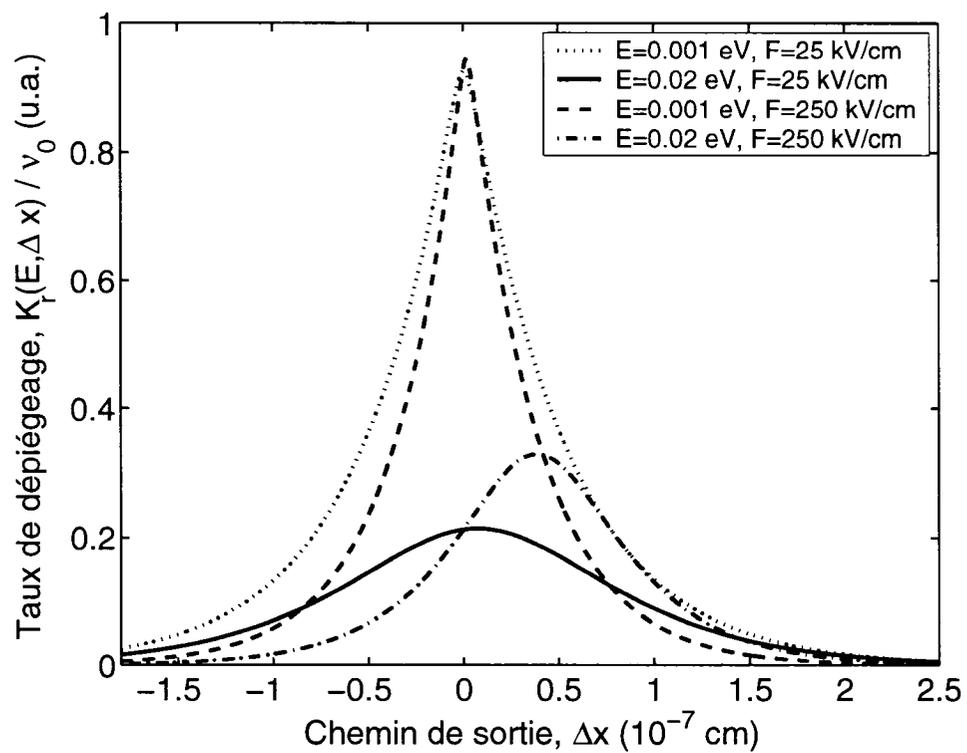


Figure 2.3 Taux de dépiégeage $K_r(E, \Delta x)$ versus Δx pour $E = 0.001, 0.02$ eV et $F = 25, 250$ kV/cm.

le taux de dépiégeage de la manière suivante:

$$K_r(E) = K_r(E, \Delta x)|_{\Delta x_{opt}}, \quad (2.2)$$

où Δx_{opt} est défini comme,

$$\left. \frac{\partial K_r(E, \Delta x)}{\partial(\Delta x)} \right|_{\Delta x_{opt}} = 0 \quad (2.3)$$

et $K_r(E, \Delta x)$ est donné par l'éq.(2.1). En utilisant l'éq.(2.3), nous obtenons Δx_{opt} ,

$$\Delta x_{opt} = \frac{a^2 e F E}{4 [(k_B T)^2 + (eaF/2)^2]}. \quad (2.4)$$

En remplaçant l'éq.(2.4) dans l'éq.(2.2), nous trouvons,

$$K_r(E) = \nu_0 \exp \left(\frac{-E}{\sqrt{(k_B T)^2 + (eaF/2)^2}} \right). \quad (2.5)$$

Cette équation est le taux de dépiégeage employé dans le modèle DJM. Lorsque $F \rightarrow 0$, le dépiégeage par effet de champ s'annule et nous retrouvons le modèle standard MT (saut vertical). Contrairement, quand F est très grand la contribution thermique devient négligeable et l'émission est dominée par l'effet tunnel (saut horizontal). Notons qu'il serait possible d'inclure une étape supplémentaire dans l'algorithme de simulation MC élaboré à la section 1.4.2, afin d'inclure un choix de Δx pour chaque évènement de piégeage suivant $P(\Delta x)$. Par contre, l'effet de dépiégeage par effet de champ est, dans la majorité des cas, faible et peut être inclus de manière satisfaisante avec l'approximation donnée par l'éq.(2.2) sans augmenter significativement le temps de calcul du programme de simulation.

Dans les sections à suivre, nous allons présenter certaines hypothèses et conséquences du modèle DJM, qui ont demeuré jusqu'à présent inaperçues, que notre analyse a fait

ressortir.

2.2.1 Probabilité de dépiéger par un chemin de sortie $P(\Delta x)$

Selon le modèle DJM, la probabilité de choisir un chemin de sortie Δx s'écrit,

$$\begin{aligned}
 P(\Delta x) &= \frac{K_r(E, \Delta x)}{\int_{-\infty}^{\infty} K_r(E, \Delta x) d(\Delta x)} \\
 &= \frac{[(k_B T)^2 + (eaF/2)^2] \exp\left(-\sqrt{(2\Delta x/a)^2 + (\Delta E/k_B T)^2}\right)}{ak_B T E K_1\left(E/\sqrt{(k_B T)^2 + (eaF/2)^2}\right)} \quad (2.6)
 \end{aligned}$$

où $[P(\Delta x)] = \text{cm}^{-1}$ et $K_1(z)$ est la fonction de Bessel modifiée de second ordre. Les détails du calcul menant à l'éq.(2.6) se trouvent à l'annexe I. Il est intéressant de noter que le chemin de sortie moyen, défini comme

$$\langle \Delta x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Delta x P(\Delta x) d(\Delta x), \quad (2.7)$$

est équivalent à la valeur de Δx qui optimise $P(\Delta x)$, c'est-à-dire

$$\langle \Delta x \rangle = \Delta x_{opt}, \quad (2.8)$$

où Δx_{opt} est donné par l'éq.(2.4). L'intégrale dans l'éq.(2.7) est résolue à l'annexe II. Ce résultat est surprenant en considérant que $P(\Delta x)$ n'est pas une fonction symétrique. Donc, dans le modèle DJM, le porteur dépiège toujours par le chemin de sortie moyen et optimal.

2.2.2 Comparaison entre $K_r(E, \langle \Delta x \rangle)$ et le taux d'émission moyen $\langle K_r(E) \rangle$

Le fait d'évaluer $K_r(E, \Delta x)$ au point $\langle \Delta x \rangle$, au lieu de Δx_{opt} , est physiquement plus satisfaisant. Ceci indique que nous considérons, dans une certaine mesure, l'influence de tous les chemins de sortie. Par contre, $K_r(E, \langle \Delta x \rangle)$ n'est pas équivalent au taux d'émission moyen défini comme (voir éqns.(2.1),(2.6) et annexe I)

$$\begin{aligned}
 \langle K_r(E) \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} K_r(E, \Delta x) P(\Delta x) d(\Delta x) \\
 &= \nu_0 \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-2\sqrt{(2\Delta x/a)^2 + (\Delta E/k_B T)^2}\right) d(\Delta x)}{\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\sqrt{(2\Delta x/a)^2 + (\Delta E/k_B T)^2}\right) d(\Delta x)} \\
 &= \nu_0 \frac{K_1(2E/k_B T_{eff})}{K_1(E/k_B T_{eff})} \tag{2.9}
 \end{aligned}$$

où $T_{eff}^2 = T^2 + (eaF/2k_B)^2$. La fig. 2.4 montre $K_r(E, \Delta x_{opt})$ (éq.(2.5)) et $\langle K_r(E) \rangle$ (éq.(2.9)) en fonction de E pour $T = 75, 250$ K. Nous varions seulement T , puisque la température et le champ agissent de manière équivalente dans les éqns.(2.5),(2.9). $\langle K_r(E) \rangle$ est toujours inférieur à $K_r(E, \Delta x_{opt})$. Lorsque $E \rightarrow 0$, le taux d'émission moyen (optimal) ainsi que sa dérivée tendent vers 0.5 (1) et 0 ($-1/k_B T_{eff}$) respectivement. Donc, pour E faible, la différence entre ces deux expressions est notable.

2.3 Taux d'émission $K_r(E)$: Sommation sur les chemins de sortie (Δx)

Dans le modèle DJM, la dépendance explicite du chemin de sortie Δx dans le taux de dépiégeage $K_r(E, \Delta x)$ a été éliminée en considérant uniquement la contribution maximale de celui-ci. Le porteur piégé à l'énergie E peut dépiéger en choisissant n'importe quel chemin de sortie. Donc, nous trouvons qu'une formulation plus rigoureuse de $K_r(E)$ est,

$$K_r(E) = \sum_{\Delta x_i} K_r(E, \Delta x_i), \tag{2.10}$$

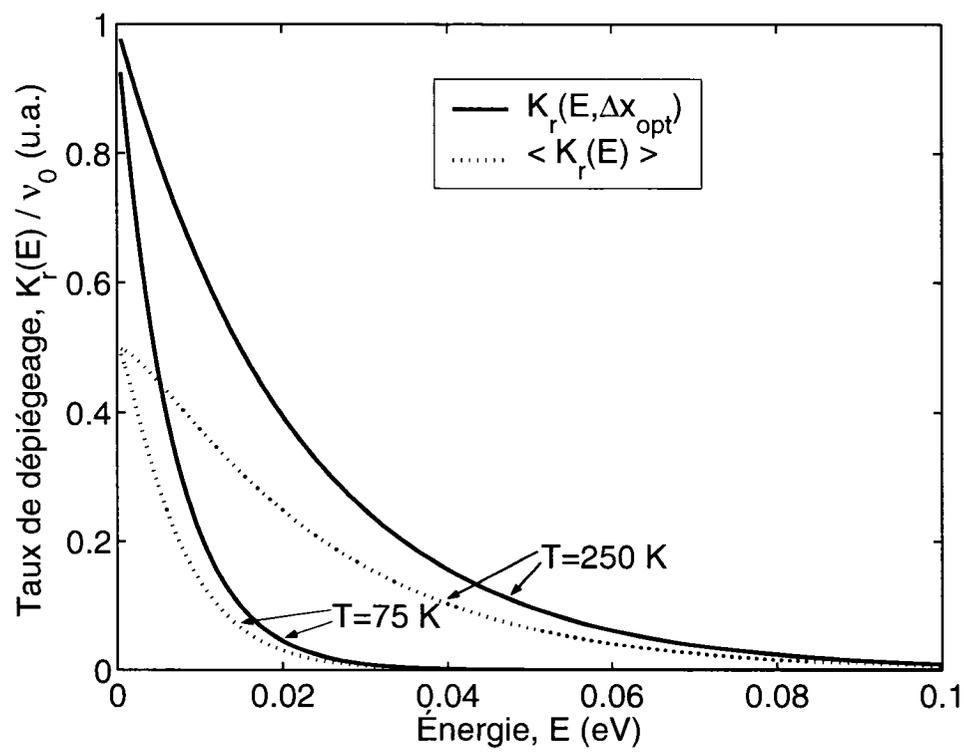


Figure 2.4 Comparaison entre $K_r(E, \Delta x_{opt})$ et $\langle K_r(E) \rangle$ versus E pour $T = 75, 250\text{ K}$.

où nous additionnons les contributions de tous les Δx_i possibles. Puisque Δx est une variable continue, l'éq.(2.10) tend vers ∞ . Nous devons plutôt écrire,

$$K_r(E) = \int_{-\infty}^{\infty} k_r(E, \Delta x) d(\Delta x), \quad (2.11)$$

où $[k_r(E, \Delta x)] = \text{s}^{-1}\text{cm}^{-1}$. Afin de rigoureusement inclure l'effet des différents chemins de sortie, il faut connaître le taux de dépiégeage par unité de distance $k_r(E, \Delta x)$. Idéalement, ce dernier est obtenu en effectuant un calcul de type premiers principes. Malheureusement, nous ne possédons pas de solution pour ce type de calcul, de plus il n'est pas évident comment formuler ce problème.

2.4 Formulation du taux d'émission $K_r(E)$ dans le modèle DJM

Dans cette section, nous allons utiliser l'éq.(2.11) et les hypothèses incluses dans le modèle DJM (abordées en détail à la section 2.2) afin de formuler une expression du taux de dépiégeage $K_r(E)$ qui tient compte rigoureusement de l'influence des chemins de sortie. Comme nous souhaitons remanier le modèle DJM de manière à en solidifier les fondements, nous devons déterminer le taux de dépiégeage par unité de distance $k_r(E, \Delta x)$. Notons que les éqns.(2.1),(2.5) pour $K_r(E, \Delta x)$ et $K_r(E, \Delta x_{opt})$ respectivement ne sont plus applicables. Afin d'obtenir une expression de $k_r(E, \Delta x)$, il faut postuler une hypothèse et deux conditions. Car, comme nous allons le montrer, le choix de cette fonction n'est pas unique. Nous débutons en posant l'hypothèse suivante:

Hypothèse #1 : Le taux de dépiégeage par unité de distance, s'écrit

$$k_r(E, \Delta x) = k_0 \exp\left(-\sqrt{(2\Delta x/a)^2 + (\Delta E/k_B T)^2}\right), \quad (\text{s}^{-1}\text{cm}^{-1}) \quad (2.12)$$

où $-\infty < \Delta x < \infty$, k_0 est une quantité à déterminer et $\Delta E = E - e\Delta xF$.

Le choix non-unique de k_0 détermine la forme particulière de l'éq.(2.12) et de $K_r(E)$. Cette relation possède la même dépendance que $K_r(E, \Delta x)$ (éq.(2.1)), sauf que les unités sont différentes. La probabilité de dépiégeage $P(\Delta x)$, décrite par l'éq.(2.6), est toujours valide. C'est en imposant certaines conditions que nous obtenons des solutions de k_0 qui sont physiquement raisonnables. $k_r(E, \Delta x)$ doit respecter les conditions suivantes:

Condition #1 : Le taux d'émission total dans la limite $F \rightarrow 0$ doit tendre vers celui donné par le modèle MT standard,

$$K_r(E)|_{F \rightarrow 0} = \int_{-\infty}^{\infty} k_r(E, \Delta x) d(\Delta x) \Big|_{F \rightarrow 0} = K_r^{MT}(E) = \nu_0 \exp(-E/k_B T). \quad (2.13)$$

Condition #2 : Le taux d'émission total doit être égal à la fréquence d'essai de sortie lorsque $E \rightarrow 0$, et ce pour n'importe quelle valeur de T et F ,

$$K_r(E \rightarrow 0) = \int_{-\infty}^{\infty} k_r(E \rightarrow 0, \Delta x) d(\Delta x) = \nu_0. \quad (2.14)$$

Ces conditions physiques sont imposées, car (i) dans la limite $F \rightarrow 0$ nous savons quelle forme le dépiégeage par activation thermique doit prendre et (ii) parce qu'un porteur piégé à une énergie infinitésimalement sous le seuil de mobilité est émis par la moindre perturbation. Le fait de varier T ou F ne doit pas changer le taux d'émission à $E \rightarrow 0$. Nous allons maintenant présenter deux exemples de solutions possibles qui sont basées sur l'hypothèse #1 et qui respectent les conditions #1-2:

1. Nous utilisons l'hypothèse #1, pour évaluer directement la condition #1.

$$\begin{aligned} K_r(E) &= \int_{-\infty}^{\infty} k_r(E, \Delta x) d(\Delta x) \\ &= k_0 \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\sqrt{(2\Delta x/a)^2 + (\Delta E/k_B T)^2}\right) d(\Delta x) \end{aligned}$$

$$= k_0 \frac{ak_B T E}{[(k_B T)^2 + (eaF/2)^2]} \cdot K_1 \left(\frac{E}{\sqrt{(k_B T)^2 + (eaF/2)^2}} \right). \quad (2.15)$$

Il s'agit d'évaluer cette expression dans la limite $F \rightarrow 0$ et de choisir k_0 afin que $K_r(E)|_{F \rightarrow 0} = K_r^{MT}(E)$ (condition #1). En faisant ceci, nous trouvons,

$$k_0 = \frac{\nu_0 \exp(-\phi)}{a \phi K_1(\phi)}, \quad (2.16)$$

où $\phi = E/k_B T$. Notons que k_0 est indépendant de F (parce que nous avons déterminé k_0 dans la limite $F \rightarrow 0$). En remplaçant l'éq.(2.16) dans l'éq.(2.15), nous obtenons,

$$K_r(E) = \frac{\nu_0}{\left[1 + \left(\frac{eaF}{2k_B T}\right)^2\right]} \frac{K_1(E/k_B T_{eff})}{K_1(E/k_B T)} \exp\left(\frac{-E}{k_B T}\right) \quad (2.17)$$

où $T_{eff}^2 = T^2 + (eaF/2k_B)^2$. Vérifions si l'éq.(2.17) respecte la condition #2, $K_r(E \rightarrow 0) = \nu_0$. Étant donné que $K_1(z \rightarrow 0) \rightarrow \infty$, utilisons l'équation suivante qui décrit le comportement asymptotique de $K_\alpha(z)$ pour $0 < z \ll \sqrt{\alpha + 1}$,

$$K_\alpha(z) \rightarrow \frac{\Gamma(\alpha)}{2} \left(\frac{2}{z}\right)^\alpha \quad \text{si } \alpha > 0. \quad (2.18)$$

L'éq.(2.18) nous permet d'évaluer le rapport des fonctions de Bessel modifiées dans l'éq.(2.17) lorsque $E \rightarrow 0$,

$$\lim_{E \rightarrow 0} \frac{K_1(E/k_B T_{eff})}{K_1(E/k_B T)} \rightarrow \frac{T_{eff}}{T}. \quad (2.19)$$

En évaluant l'expression de $K_r(E)$ dans la limite $E \rightarrow 0$ avec l'éq.(2.19), nous remarquons que l'éq.(2.17) n'obéit pas à la condition #2. En normalisant nous trouvons,

$$K_r(E) = \frac{\nu_0 T}{T_{eff}} \frac{K_1(E/k_B T_{eff})}{K_1(E/k_B T)} \exp\left(\frac{-E}{k_B T}\right). \quad (2.20)$$

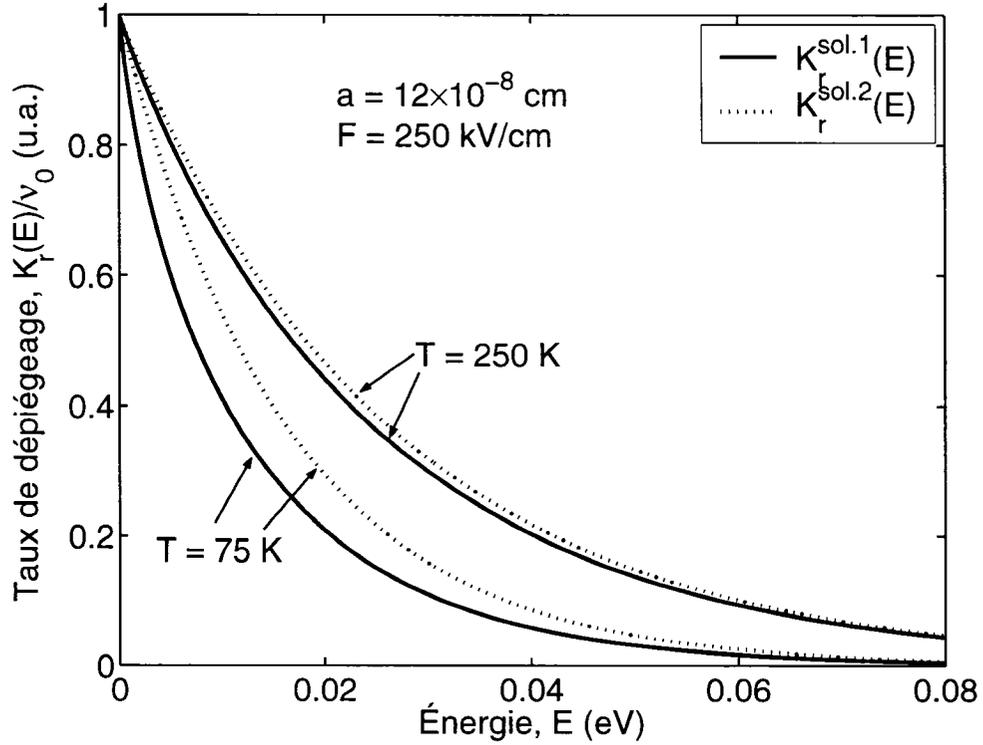


Figure 2.5 Comparaison entre les deux solutions possibles de $K_r(E)$ versus E pour $T = 75, 250$ K.

L'éq.(2.20) représente une solution possible. Notons que cette façon de procéder a éliminé la dépendance en champ de k_0 , puisque celui-ci a été obtenu dans la limite $F \rightarrow 0$. La fig. 2.5 montre $K_r(E)$ en fonction de E pour différents F .

2. Une autre solution est d'employer l'hypothèse #1 de manière à ce que le taux de dépiégeage total soit égal à celui utilisé précédemment dans le modèle DJM,

$$\int_{-\infty}^{\infty} k_r(E, \Delta x) d(\Delta x) = K_r^{DJM}(E) = \nu_0 \exp\left(\frac{-E}{\sqrt{(k_B T)^2 + (eaF/2)^2}}\right). \quad (2.21)$$

Notons que dans ce cas, les conditions #1-2 sont automatiquement respectées et que ce taux d'émission s'est montré capable de bien reproduire le comportement en F des données expérimentales (Chen, 1999). En utilisant les éqns.(2.15),(2.21), nous

obtenons l'expression suivante pour k_0 :

$$k_0 = \frac{\nu_0 k_B T_{eff}^2}{a T E K_1(E/k_B T_{eff})} \exp\left(\frac{-E}{k_B T_{eff}}\right), \quad (2.22)$$

où $T_{eff}^2 = T^2 + (eaF/2k_B)^2$. k_0 dépend de F et nous retrouvons l'éq.(2.16) lorsque $F \rightarrow 0$.

La fig. 2.5 montre $K_r(E)$ pour les solutions #1-2 (éqns.(2.20),(2.21) respectivement) versus E pour $T = 75, 250$ K. Nous voyons que les deux solutions sont similaires, particulièrement lorsque T augmente. Le choix de $k_r(E, \Delta x)$, et par conséquent $K_r(E)$, n'est pas unique. Une solution qui produit des données en accord avec les résultats empiriques sera retenue. Un calcul de $k_r(E, \Delta x)$ basé sur les premiers principes éliminerait toute ambiguïté quant à la formulation du taux de dépiégeage.

2.4.1 Approximation dans la distribution de dépiégeage $k_r(E, \Delta x)$

À la section 2.4, nous avons défini le taux de dépiégeage par unité de distance avec l'éq. (2.12) qui est valide pour $-\infty < \Delta x < \infty$. Ceci est une approximation, puisque les chemins de sortie pour lesquels $\Delta E \leq 0$, c'est-à-dire $E/eF \leq \Delta x < \infty$, ne sont pas thermiquement activés. Nous devons plutôt écrire,

$$k_r(E, \Delta x) = \begin{cases} k_0 \exp\left(-\sqrt{\left(\frac{2\Delta x}{a}\right)^2 + \left(\frac{\Delta E}{k_B T}\right)^2}\right) & : -\infty < \Delta x < E/eF, \\ k_0 \exp\left(-\frac{2\Delta x}{a}\right) & : E/eF \leq \Delta x < \infty. \end{cases} \quad (2.23)$$

La fig. 2.6 montre que l'expression approximative de $k_r(E, \Delta x)$ sous-estime la probabilité de dépiéger lorsque $E/eF \leq \Delta x < \infty$. Afin de connaître les conséquences d'utiliser cette approximation, nous calculons l'erreur relative introduite par la fonction approximative (voir annexe III). Nous varions $E = 0.01 \rightarrow 0.3$ eV ($\Delta E = 0.01$ eV),

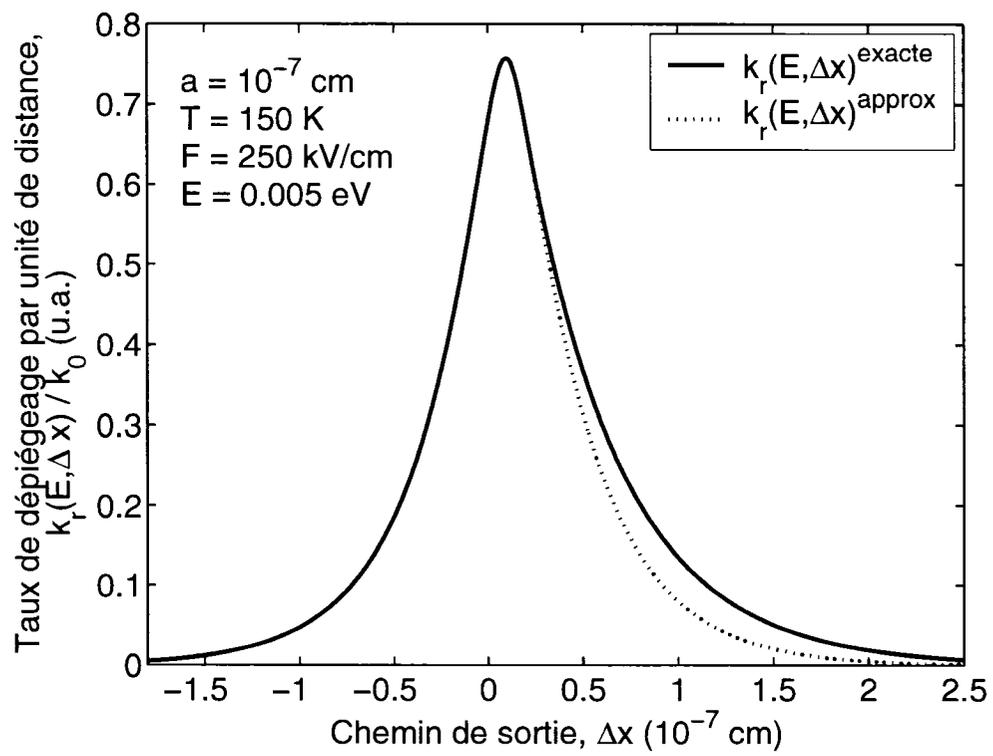


Figure 2.6 Comparaison entre $k_r^{exacte}(E, \Delta x)$ et $k_r^{approx}(E, \Delta x)$ versus Δx .

$F = 50 \rightarrow 500$ kV/cm ($\Delta F = 50$ kV/cm) et $T = 50 \rightarrow 400$ K ($\Delta T = 50$ K), totalisant 2400 combinaisons, pour vérifier l'erreur relative dans tous les régimes. Nous trouvons que l'erreur relative (Err) maximale est de 67.4% (pour $E = 0.01$ eV, $F = 500$ kV/cm et $T = 50$ K). De plus, nous trouvons que,

$$Err > \begin{cases} 1\% \text{ dans } 11.9\% \text{ des cas,} \\ 5\% \text{ dans } 5.4\% \text{ des cas,} \\ 10\% \text{ dans } 3.4\% \text{ des cas.} \end{cases} \quad (2.24)$$

Finalement, utiliser la version approximative de $k_r(E, \Delta x)$ (éq.(2.12)) introduit, dans certains cas, une erreur relative non-négligeable mais raisonnable. Nous qualifions cette erreur comme acceptable, puisque la forme « exacte » de $k_r(E, \Delta x)$ donnée par l'éq.(2.23) est posée et donc elle-même une approximation.

2.5 Piégeage par effet tunnel

Jusqu'à présent, ce chapitre a couvert le sujet du dépiégeage par effet tunnel pour les porteurs situés dans les états localisés. Si un porteur peut dépiéger par effet de champ, alors il est raisonnable de croire qu'un porteur peut aussi piéger par ce phénomène. Ceci implique que nous devons réécrire le taux de piégeage $k_c(E)$ de manière à ce qu'il dépende de Δx et par conséquent F , tout comme $k_r(E, \Delta x)$. En s'inspirant de la section 2.3, nous définissons,

$$k_c(E) = \int_{-\infty}^{\infty} \bar{k}_c(E, \Delta x) d(\Delta x). \quad (2.25)$$

Dans ce cas, nous pouvons reformuler les équations de transport (éqns.(1.6),(1.7)) afin d'inclure une dépendance en Δx (en négligeant la diffusion et le déplacement dû à l'effet

tunnel):

$$\frac{\partial n_f}{\partial t} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} [k_r(E, \Delta x)n_t - \tilde{k}_c(E, \Delta x)n_f] dE d(\Delta x) - \mu_0 F \frac{\partial n_f}{\partial x} + g(x, t) \quad (2.26)$$

$$\frac{\partial n_t}{\partial t} = \int_{-\infty}^{\infty} [\tilde{k}_c(E, \Delta x)n_f - k_r(E, \Delta x)n_t] d(\Delta x) \quad (2.27)$$

où $[n_f(x, t)] = \text{cm}^{-3}$, $[n_t(E, x, t)] = \text{cm}^{-3}\text{eV}^{-1}$, $[k_r(E, \Delta x)] = \text{s}^{-1}\text{cm}^{-1}$ et $[\tilde{k}_c(E, \Delta x)] = \text{s}^{-1}\text{eV}^{-1}\text{cm}^{-1}$. La raison pour laquelle nous réécrivons ces équations est parce qu'elles nous permettent d'obtenir $\tilde{k}_c(E, \Delta x)$ lorsque nous connaissons $k_r(E, \Delta x)$. Nous faisons ceci en résolvant l'éq.(2.27) en régime permanent, c'est-à-dire en appliquant le bilan détaillé.

2.5.1 Bilan détaillé

En solutionnant les éqns.(2.26),(2.27) pour $n_f(x, t)$ et $n_t(E, x, t)$, nous obtenons des expressions qui varient dans le temps. Éventuellement, en laissant évoluer les densités de porteurs, celles-ci tendent vers 0. Par contre, à des temps assez longs, le nombre de porteurs entrant et sortant de la DOS localisés et de la BC s'égalisent et demeurent stables. La stabilité est assurée, en régime permanent, par la condition suivante:

$$\frac{\partial n_t}{\partial t} = \frac{\partial n_f}{\partial t} = 0, \quad (2.28)$$

qui produit des solutions indépendantes du temps. La dynamique des porteurs dans ce régime nous permet d'écrire une condition supplémentaire, qui est utilisée afin de réduire le nombre de degrés de liberté (par exemple, le nombre de paramètres ajustables). Appliquer le bilan détaillé consiste à formuler cette condition supplémentaire. Notons que, l'éq.(2.28) est équivalent à évaluer $N_t(t)$ et $N_f(t)$ (le nombre de porteurs dans la BC et

dans les états localisés respectivement) dans la limite $t \rightarrow \infty$, car

$$\begin{aligned} \frac{\partial N_t(t)}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t} \left[\int_0^\infty \int_0^\infty n_t(E, x, t) dE dx \right] \\ &= \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{\partial n_t(E, x, t)}{\partial t} dE dx \\ &= 0. \end{aligned}$$

Nous obtenons le même résultat pour $\partial N_f(t)/\partial t$.

2.5.2 Obtention de $\tilde{k}_c(E, \Delta x)$ par le bilan détaillé

En appliquant le bilan détaillé (éq.(2.28)) à l'éq.(2.27), nous obtenons directement la relation,

$$\tilde{k}_c(E, \Delta x) = \frac{k_r(E, \Delta x)n_t(E)}{n_f}. \quad (2.29)$$

Notons que les dépendances en x et en t dans n_t et n_f sont égales en régime permanent et s'annulent dans l'éq.(2.29). Nous pouvons écrire $n_t(E)$ et n_f comme $n(E) = f(E) g(E)$, où $f(E)$ est la fonction d'occupation en quasi-équilibre et $g(E)$ est la DOS localisés. Nous faisons l'approximation que $f(E) \approx \exp[(E - E_c + E_F)/k_B T]$ où E_c et E_F sont l'énergie du seuil de mobilité (énergie qui sépare les états étendus et localisés) et l'énergie de Fermi respectivement. Nous utilisons la distribution de Boltzmann et non celle de Fermi-Dirac, car $E_c - E_F \approx 0.925 \text{ eV}$ est grand par rapport à $k_B T \approx 0.025 \text{ eV}$ (pour toutes les équations, l'énergie est toujours définie par rapport à E_c avec E croissant vers la bande de valence). Nous supposons une DOS de la forme:

$$g(E) = \begin{cases} g_0 & : E < 0, \\ g_0 \exp(-E/k_B T_0) & : E \geq 0, \end{cases} \quad (2.30)$$

où $g_0 \sim 10^{21} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$ est une constante et $T_0 \approx 250 \text{ K}$ est la température caractéristique de la DOS localisés. En utilisant l'éq.(2.30) avec $f(E)$, nous trouvons

$$n_t(E) = g_0 \exp\left(\frac{-E}{k_B T_0}\right) \exp\left(\frac{E - E_c + E_F}{k_B T}\right), \quad (2.31)$$

$$\begin{aligned} n_f &= \int_{-\infty}^0 f(E) g(E) dE \\ &= g_0 k_B T \exp\left(\frac{E_F - E_c}{k_B T}\right). \end{aligned} \quad (2.32)$$

En remplaçant, les éqns.(2.12),(2.31),(2.32) dans l'éq.(2.29), nous obtenons,

$$\tilde{k}_c(E, \Delta x) = \frac{k_0}{k_B T} \exp\left(\frac{E(T_0 - T)}{k_B T_0 T}\right) \exp\left(-\sqrt{(2\Delta x/a)^2 + (\Delta/k_B T)^2}\right). \quad (2.33)$$

Le choix de k_0 détermine la forme spécifique de $k_r(E, \Delta x)$ et de $\tilde{k}_c(E, \Delta x)$. Notons que, contrairement à $k_r(E, \Delta x)$, nous n'avons pas besoin de faire d'hypothèse quant à la forme de $\tilde{k}_c(E, \Delta x)$. Afin de montrer la validité de l'éq.(2.33), remplaçons l'expression de k_0 , donnée par l'éq.(2.22), dans celle-ci. Nous trouvons,

$$\begin{aligned} \tilde{k}_c(E, \Delta x) &= \frac{\nu_0 T_{eff}^2}{a T^2 E K_1(E/k_B T_{eff})} \exp\left(\frac{-E}{k_B T_{eff}}\right) \exp\left(\frac{E(T_0 - T)}{k_B T_0 T}\right) \\ &\cdot \exp\left(-\sqrt{(2\Delta x/a)^2 + (\Delta/k_B T)^2}\right). \end{aligned} \quad (2.34)$$

Le taux de piégeage s'écrit,

$$\begin{aligned} k_c(E) &= \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{k}_c(E, \Delta x) d(\Delta x) \\ &= \frac{\nu_0}{k_B T} \exp\left(\frac{E(T_0 - T)}{k_B T_0 T}\right) \exp\left(\frac{-E}{k_B T_{eff}}\right). \end{aligned} \quad (2.35)$$

Dans la limite $F \rightarrow 0$, l'éq.(2.35) est égale au taux de piégeage dans le modèle MT standard,

$$k_c(E)|_{F \rightarrow 0} = k_c^{MT}(E) = \frac{\nu_0}{k_B T} \exp\left(\frac{-E}{k_B T_0}\right). \quad (2.36)$$

Ceci n'est pas étonnant, car nous avons forcé $k_r(E, \Delta x)$ à respecter cette condition. Finalement, nous voyons que cette méthode, pour déterminer $\tilde{k}_c(E, \Delta x)$, est valide.

2.6 Conclusion

Après avoir revu le modèle DJM, nous avons trouvé que Δx_{opt} , qui est utilisé pour évaluer le taux de dépiégeage $K_r(E, \Delta x)$, est égal à $\langle \Delta x \rangle$. Nous avons montré que $K_r(E, \langle \Delta x \rangle)$ n'est pas équivalent à la valeur moyenne du taux d'émission $\langle K_r(E) \rangle$ et que cette différence augmente lorsque $E \rightarrow 0$. Ensuite, nous avons établi qu'afin d'inclure l'effet de tous les chemins de sortie sur le dépiégeage, il faut additionner les contributions de tous les Δx . Pour ce faire, il s'agit de connaître le taux de dépiégeage par unité de distance $k_r(E, \Delta x)$. Idéalement, ce dernier est obtenu par un calcul basé sur les premiers principes. Malheureusement, une telle solution n'est pas connue et par conséquent le choix de $k_r(E, \Delta x)$ n'est pas unique. Finalement, en s'appuyant sur la condition du bilan détaillé, nous avons développé une méthode qui nous permet d'introduire le piégeage par effet tunnel dans $k_c(E)$. Celui-ci est entièrement défini pour un $k_r(E, \Delta x)$ donné.

Chapitre 3

Transport contrôlé par piégeage multiple avec effet Meyer-Neldel et dépiégeage par effet tunnel : Simulations de l'expérience de temps de vol dans le a-Si:H

3.1 Introduction

Jusqu'à récemment, un problème majeur relié au transport des charges dans le a-Si:H était qu'il n'existait pas de modèle pouvant expliquer et reproduire le comportement en champ et en température des données expérimentales. Il existe différents modèles qui sont applicables dans différents régimes, tels que le modèle Meyer-Neldel (Chen, 1997) (MN) et le modèle à sauts diagonaux (Chen, 1999) (DJM: « Diagonal jump model ») qui sont particulièrement précis lorsque $F \rightarrow 0$ et $T > 150$ K respectivement. Le développement d'un modèle unifié du transport électronique dans le a-Si:H et dans les semi-conducteurs amorphes en général représenterait un avancement majeur pour ce domaine. Il s'agit là du sujet de ce chapitre.

Nous croyons que le cadre théorique recherché doit être basé sur le transport par piégeage multiple (MT). Le modèle MT standard ne reproduit pas les données expérimentales de manière satisfaisante, mais les tendances sont bonnes. Nous nous préoccupons essentiellement des dépendances en T et en F puisque ceux-ci sont les principales variables de l'expérience de TOF. Nous incluons deux effets dans le modèle MT qui se sont montrés, chacun dans son propre régime, nécessaires afin de correctement reproduire les comportements observés en champ et en température: l'effet Meyer-Neldel (MNR: « Meyer-Neldel Rule ») et le dépiégeage par effet tunnel.

3.1.1 Effet Meyer-Neldel

Le MNR a déjà été introduit dans le modèle MT par Chen et al. (Chen, 1997), ses résultats ont démontré que le MNR améliore le comportement en T (particulièrement lorsque $F \rightarrow 0$ kV/cm) de la mobilité de dérive μ_D et des paramètres de dispersion pré-transit α_1 et post-transit α_2 en comparaison avec le modèle MT standard.

Lorsqu'un processus cinétique X est limité par activation thermique, tel que l'émission d'un porteur piégé dans un état localisé, nous pouvons écrire,

$$X = X_0 \exp(-E/k_B T). \quad (3.1)$$

Dans ce cas, le MNR dit que le préfacteur X_0 doit obéir la relation suivante,

$$X_0 = X_{00} \exp(E/E_{MN}), \quad (3.2)$$

où X_{00} est une constante et $E_{MN}(= k_B T_{MN})$ est une énergie (température) caractéristique. La relation (3.2) a été observée originalement par Constable (Constable, 1926), un chimiste. Par la suite, l'éq.(3.2) a été rapportée par Meyer et Neldel (Meyer, 1937) pour expliquer les processus de conduction dans les matériaux amorphes. Une explication théorique de l'effet MN a été avancée par Yelon et al. (Yelon, 2006). Dans le contexte du dépiégeage des porteurs de la DOS localisés, l'éq.(3.1) (où X_0 est une constante) décrit la fréquence d'émission dont le mécanisme est l'absorption d'un phonon par un porteur permettant à celui-ci d'acquérir l'énergie nécessaire afin de surmonter la barrière énergétique. En tenant compte de l'absorption simultanée de plusieurs phonons, nous arrivons au MNR qui est décrit par l'éq.(3.2). Celle-ci est l'origine microscopique de la MNR. Le fait d'utiliser l'éq.(3.2), au lieu de prendre X_0 constant, augmente, pour une température donnée, la probabilité d'émission des porteurs piégés dans des états localisés plus profonds. Le MNR doit être inclus dans notre modèle global afin de correctement reproduire

le comportement en température des données expérimentales.

3.1.2 Dépiégeage par effet tunnel

Dans le chapitre précédent, nous avons abordé en détail le modèle DJM développé par Chen et al. (Chen, 1999) qui est une version modifiée du modèle MT afin d'inclure le dépiégeage par effet de champ (nous retrouvons le modèle MT dans la limite $F \rightarrow 0$). Avec le modèle DJM, un porteur est émis de l'état localisé par deux contributions simultanées: l'activation thermique et par effet tunnel. En raison de la variation en x du seuil de mobilité ($dE_c/dx = eF$), causée par la présence d'un champ électrique appliqué (supposé constant pour l'expérience de TOF), un porteur piégé à une énergie E peut dépiéger thermiquement en surmontant une barrière énergétique $\Delta E < E$ si ce processus est simultanément couplé avec une contribution de l'effet tunnel sur une distance Δx , où $\Delta x = (E - \Delta E)/eF$ (voir fig.3.1). Pour un F et un E donnés, il y a une distribution $P_r(\Delta x)$ qui décrit la probabilité de choisir un certain chemin Δx et par conséquent ΔE . La forme supposée de cette fonction de probabilité est

$$P_r(\Delta x) \propto \exp \left(-\sqrt{\left(\frac{2\Delta x}{a}\right)^2 + \left(\frac{\Delta E}{k_B T}\right)^2} \right), \quad (3.3)$$

où a est la longueur de localisation et $\Delta E = E - e\Delta x F$.

Un autre modèle semblable au DJM a été développé auparavant par Esipov (Esipov, 1991) nommé « elastic tunnelling model » (ETM). Celui-ci inclut l'activation thermique et l'effet tunnel. Par contre, ces processus sont traités de manière complètement indépendents. Un porteur peut dépiéger soit thermiquement (saut vertical) ou par effet tunnel (saut horizontal), c'est-à-dire que les deux termes sous la racine carrée dans l'éq.(3.3) sont traités séparément. Cette hypothèse nous semble physiquement non raisonnable. Ce désaccord au niveau de la physique du phénomène de dépiégeage a mené au développement du

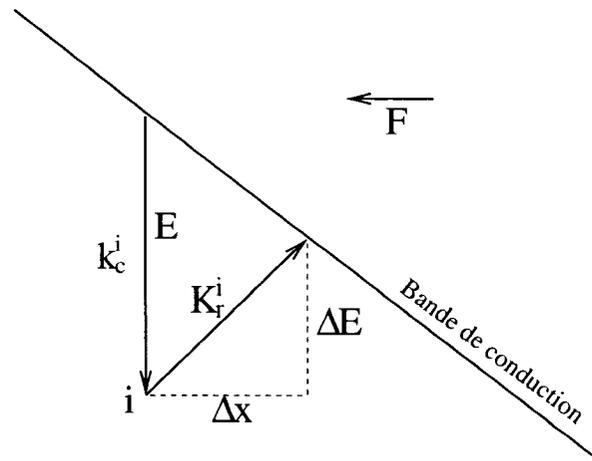


Figure 3.1 Diagramme d'énergie montrant le piégeage thermique et le dépiégeage assisté par champ pour un électron lorsque $F \neq 0$ (modèle DJM).

modèle DJM. Gu et al. (Gu, 1996) ont développé un modèle à haut champ dans lequel le préfacteur d'émission dépend du champ, c'est-à-dire $\nu_0(F) = \nu_{00} \exp(-\beta F)$ où β est un paramètre ajustable. Encore une fois, le modèle DJM demeure intuitivement plus satisfaisant.

Les modèles ETM, DJM et de conduction par sauts sont tous des modèles de type *température effective* (Gu, 1995). Ceci veut dire que l'influence d'une variation du champ électrique sur les données mesurables est équivalente à une certaine variation de la température. Pour les modèles basés sur le transport par piégeage multiple, la seule similitude entre les effets de la température et du champ électrique est le fait qu'une augmentation (diminution) de ceux-ci résulte en une augmentation (diminution) du taux de dépiégeage. De plus, la vitesse d'un porteur se déplaçant au-dessus du seuil de mobilité est supposée obéir la relation $v = \mu_0 F$, donc à moins que μ_0 possède une dépendance linéaire en T résultant en $v \propto T$ (tout comme F), dont il n'existe pas d'évidence expérimentale, la température et le champ n'agissent pas identiquement sur les porteurs. Le concept de *température effective* est, dans le contexte du transport par piégeage multiple, une approximation employable sous certaines conditions et ne représente pas une équivalence

physique.

Le modèle DJM a montré (Chen, 1999) que le dépiégeage par effet de champ doit être inclus dans le modèle MT afin de bien reproduire le comportement en champ des données expérimentales et plus précisément pour μ_D , puisque α_1 et α_2 dépendent très faiblement du champ (Antoniadis, 1991).

3.2 Modèle et Algorithme

3.2.1 Développement du modèle MN-DJM

Maintenant que nous avons abordé tous les mécanismes de transport qui doivent être inclus dans le cadre théorique recherché, nous pouvons procéder au développement du modèle unifié. Le but est d'intégrer l'effet Meyer-Neldel et le dépiégeage par effet de champ dans le modèle de transport par piégeage multiple.

Débutons en analysant l'effet de champ dans l'expression du taux de dépiégeage par unité de distance $k_r(E, \Delta x)$, où $[k_r(E, \Delta x)] = \text{s}^{-1}\text{cm}^{-1}$. Physiquement, il n'y a pas de raison pour laquelle la forme mathématique du dépiégeage assisté par effet tunnel serait différente de celle dans le modèle DJM. Donc, nous posons que,

$$k_r(E, \Delta x) = \omega_0 \exp \left(-\sqrt{\left(\frac{2\Delta x}{a}\right)^2 + \left(\frac{\Delta E}{k_B T}\right)^2} \right), \quad (3.4)$$

où ω_0 peut être une fonction de E , F et Δx . Ensuite, nous allons inclure l'effet MN dans l'éq.(3.4). En suivant les explications données à la section 3.1.1, nous sommes portés à écrire,

$$\omega_0 = \omega_{00} \exp \left(\frac{\Delta E}{E_{MN}} \right), \quad (3.5)$$

où ω_{00} est une constante. La raison pour laquelle nous avons introduit ΔE dans l'exponentielle de l'éq.(3.5) est parce que la contribution thermique (effet MN augmente la probabilité d'émission thermique) au dépiégeage est ΔE (voir fig. 3.1). Par la suite, il faudrait éliminer la dépendance explicite sur la variable Δx dans les éqns.(3.4),(3.5). Idéalement, nous ferions ceci en intégrant sur toutes les contributions associées à chaque chemin de sortie (Δx):

$$K_r(E) = \int_{-\infty}^{\infty} k_r(E, \Delta x) d(\Delta x). \quad (3.6)$$

Malheureusement, la solution analytique de cette intégrale n'est pas connue. Nous pourrions résoudre l'éq.(3.6) numériquement, par contre il faudrait recommencer ce calcul pour toutes les valeurs de E , T , F , a et T_{MN} . De plus, nous préférons obtenir une expression analytique, car celle-ci peut faciliter la compréhension de la physique du transport. Donc, pour contourner ce problème nous allons utiliser l'approximation suivante,

$$K_r(E) = \nu_{00} \exp\left(\frac{\Delta E}{E_{MN}}\right) \exp\left(-\sqrt{\left(\frac{2\Delta x}{a}\right)^2 + \left(\frac{\Delta E}{k_B T}\right)^2}\right) \Big|_{\Delta x = \Delta x_{opt}}, \quad (3.7)$$

où ν_{00} est la fréquence d'essai de sortie ($[\nu_{00}] = s^{-1}$) et Δx_{opt} est défini comme,

$$\frac{\partial K_r(E, \Delta x)}{\partial(\Delta x)} \Big|_{\Delta x_{opt}} = 0. \quad (3.8)$$

L'approximation dans l'éq.(3.7) est que nous supposons que la fonction $k_r(E, \Delta x)$ est fortement dominée par la valeur de Δx qui optimise le taux d'émission. En résolvant l'éq.(3.8) pour Δx_{opt} et en remplaçant ce résultat dans l'éq.(3.7), dont les détails se trou-

vent à l'annexe IV, nous trouvons le taux de dépiégeage,

$$K_r(E) = \nu_{00} \exp\left(\frac{E/E_{MN}}{1 + \left(\frac{eaF}{2k_B T}\right)^2}\right) \exp\left(\frac{-E \sqrt{(k_B T)^2 + \left(\frac{eaF}{2}\right)^2 \left(1 - \frac{T^2}{T_{MN}^2}\right)}}{(k_B T)^2 + (eaF/2)^2}\right). \quad (3.9)$$

Comme dans les calculs précédents de Chen et al. (Chen, 1997; Chen, 1999), nous observons une température effective qui possède la forme suivante:

$$T_{eff}(T, T_{MN}, F) = \frac{T T_{MN}(1 + \phi)}{\sqrt{(1 + \phi)T_{MN}^2 - \phi T^2 - T}}, \quad (3.10)$$

où $\phi \equiv (eaF/(2k_B T))^2$. En principe, nous devrions analyser l'impact de l'approximation donné par l'éq.(3.7) (un seul chemin de sortie, Δx_{opt}) en intégrant les éqns.(3.4),(3.5) numériquement. En raison de l'importante charge de travail associé à cette analyse et du fait que le modèle DJM, qui est basé sur cette approximation (voir la section 2.2), produit des résultats en accord avec les données expérimentales à haut champ, nous trouvons que cette étude particulière n'est pas nécessaire. De plus, il s'agit de noter que l'expression de $k_r(E, \Delta x)$ est elle-même une approximation, car elle est posée.

Maintenant que nous avons défini le taux de dépiégeage $K_r(E)$, il reste à déterminer l'expression du taux de piégeage K_c . Le taux de piégeage par unité d'énergie s'écrit comme (Schmidlin, 1977),

$$k_c(E) = g(E) \sigma \langle v \rangle \quad (3.11)$$

où $g(E)$ est la densité des états localisés, $\sigma \sim 10^{-15} \text{ cm}^{-2}$ est la section efficace des états localisés et $\langle v \rangle \sim 10^7 \text{ cm s}^{-1}$ est la vitesse moyenne du porteur libre (notons que $[k_c(E)] = \text{s}^{-1} \text{ eV}^{-1}$). Nous pouvons réduire le nombre de paramètres présents dans les expressions de $K_r(E)$ et de $k_c(E)$ en appliquant le bilan détaillé. Le bilan détaillé nous informe sur la dynamique des porteurs lorsque $t \rightarrow \infty$ et le nombre de porteurs entrant et

sortant des états localisés par unité de temps sont égaux:

$$K_r(E) n_t(E) = k_c(E) (1 - f(E)) n_f, \quad (3.12)$$

où $n_t(E)$ est la distribution des porteurs localisés ($[n_t(E)] = \text{cm}^{-3}\text{eV}^{-1}$), n_f est la densité de porteurs situés dans la bande ($[n_f] = \text{cm}^{-3}$), $f(E)$ est la fonction d'occupation et $(1 - f(E))$ est la fraction des états discrets qui ne sont pas occupés (que nous allons négliger, car cette valeur est très petite). En suivant les idées présentées à la section 2.5.2, nous écrivons $n_t(E)$ et n_f comme,

$$n_t(E) = g_0 \exp\left(\frac{-E}{k_B T_0}\right) \exp\left(\frac{E - E_c + E_F}{k_B T}\right), \quad (3.13)$$

$$n_f = g_0 k_B T \exp\left(\frac{E_F - E_c}{k_B T}\right). \quad (3.14)$$

Comme dans le cas du modèle DJM, nous allons négliger l'effet de champ afin de simplifier la forme de $k_c(E)$ et parce que dans la majorité des cas (sauf pour F très grand et T faible) cet effet est faible. Donc, dans ce cas, nous allons utiliser l'éq.(3.9) dans la limite $F \rightarrow 0$, ce qui est équivalent au taux de dépiégeage dans le modèle MN qui est,

$$K_r^{MN}(E) = \nu_{00} \exp(E/k_B T_{MN}) \exp(-E/k_B T). \quad (3.15)$$

En insérant les éqns.(3.11),(3.13),(3.14),(3.15) dans l'éq.(3.12), nous obtenons,

$$g_0 \sigma \langle v \rangle = \frac{\nu_{00}}{k_B T} \exp(E/k_B T_{MN}). \quad (3.16)$$

En remplaçant ce résultat dans l'éq.(3.11) pour $k_c(E)$, nous trouvons,

$$k_c(E) = \frac{\nu_{00}}{k_B T} \exp\left(\frac{E}{k_B T_{MN}}\right) \exp\left(\frac{-E}{k_B T_0}\right). \quad (3.17)$$

Les taux de piégeage et d'émission que nous utilisons pour reproduire les expériences de

TOF sont donnés par les éqns.(3.9),(3.17). Pour $F \rightarrow 0$ et $T_{MN} \rightarrow \infty$, le modèle MN-DJM (le modèle présent) se réduit aux modèles MN et DJM respectivement. Lorsque ces deux conditions sont remplies, nous retrouvons le modèle MT standard.

3.2.2 Paramètres du modèle MN-DJM

Le modèle MN-DJM contient cinq paramètres ajustables: la mobilité microscopique μ_0 , la fréquence d'essai de sortie ν_{00} , la température caractéristique T_0 , la température Meyer-Neldel T_{MN} et la longueur de localisation a . Les trois premiers paramètres sont dus au transport par MT et les deux derniers sont propres aux modèles MN et DJM respectivement. Nous souhaitons obtenir une seule série de valeurs fixes pour les cinq paramètres afin de déterminer les propriétés intrinsèques du transport dans le a-Si:H dans tous les régimes.

3.2.3 Effet de négliger le courant et la charge induite tunnel

Lorsqu'un porteur dépiège par effet tunnel, il se déplace sur une distance Δx avant d'accéder à la bande. Ce déplacement induit un courant tunnel I_{tunnel} qui doit être additionné au courant produit par un porteur situé au-dessus du seuil de mobilité $I_{bande} = e\mu_0 F/L$. Nous pouvons écrire, $I_{tunnel} = (e/L)(\Delta x/\Delta t_{tunnel})$ où Δt_{tunnel} est le temps qu'il a fallu au porteur pour avancer d'une distance Δx . Analysons l'effet du courant tunnel par rapport au courant total. Puisque, à priori, nous ne connaissons pas Δt_{tunnel} , nous allons plutôt étudier la charge induite qui ne dépend pas de Δt_{tunnel} . Imaginons un porteur piégé qui est par la suite réémis vers la bande de conduction sur une distance moyenne $\langle \Delta x \rangle$. Ensuite, il se déplace au-dessus du seuil de mobilité durant un temps moyen $\langle t_c \rangle$ à une vitesse $\mu_0 F$ avant d'être capturé. La charge induite par le mouvement du porteur qui

dépiège et qui se déplace dans la bande est donnée par les relations suivantes,

$$\begin{aligned} Q_{tunnel}^{ind} &= \int_0^{\Delta t_{tunnel}} I_{tunnel}(t') dt' \\ &= \frac{e \langle \Delta x \rangle}{L}, \end{aligned} \quad (3.18)$$

$$\begin{aligned} Q_{bande}^{ind} &= \int_{\Delta t_{tunnel}}^{\Delta t_{tunnel} + \langle t_c \rangle} I_{bande}(t') dt' \\ &= \frac{e \mu_0 F \langle t_c \rangle}{L}. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Ce qui nous intéresse est le rapport $Q_{bande}^{ind}/Q_{tunnel}^{ind}$. Afin de simplifier ce calcul, nous allons utiliser le modèle DJM pour calculer $\langle \Delta x \rangle$ et $\langle t_c \rangle$. Avec DJM, nous obtenons,

$$\langle \Delta x \rangle = \frac{eFE}{(k_B T)^2} \frac{1}{\left[\left(\frac{2}{a} \right)^2 + \left(\frac{eF}{k_B T} \right)^2 \right]}, \quad (3.20)$$

$$\langle t_c \rangle = \frac{T}{\nu_0 T_0}. \quad (3.21)$$

En remplaçant ces équations dans les éqns.(3.18),(3.19), nous trouvons,

$$\begin{aligned} \frac{Q_{bande}^{ind}}{Q_{tunnel}^{ind}} &= \frac{\mu_0 F \langle t_c \rangle}{\langle \Delta x \rangle} \\ &= \frac{4\mu_0 T [(k_B T)^2 + (eaF/2)^2]}{a^2 \nu_0 T_0 E}. \end{aligned} \quad (3.22)$$

En utilisant des valeurs typiques pour les variables, telles que $\mu_0 = 5 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$, $\nu_0 = 10^{10} \text{ s}^{-1}$, $T_0 = 250 \text{ K}$, $a = 10^{-7} \text{ cm}$, $T = 300 \text{ K}$, $F = 100 \text{ kV/cm}$ et $E = 22 \text{ meV}$, le rapport $Q_{bande}^{ind}/Q_{tunnel}^{ind}$ donné par l'éq.(3.22) est approximativement égal à 7564. Ce résultat indique que l'aire sous la courbe de courant en fonction du temps est très fortement dominée par le courant produit par le mouvement des porteurs situés au-dessus du seuil de mobilité. Nous pouvons donc négliger l'effet du courant tunnel.

3.2.4 Algorithme de simulation

Un effort important a été consacré à la résolution analytique des équations de transport (Chen, 1995). Malheureusement, une solution générale exacte n'est toujours pas connue. Pour cette raison, nous nous sommes orientés vers les simulations numériques exploitant la méthode Monte-Carlo (MC) que nous avons introduite à la section 1.4.2. Pour reproduire les expériences de TOF avec les taux de piégeage (éq.(3.9)) et d'émission (éq.(3.17)), nous devons déterminer trois variables dynamiques: le temps de vol libre t_c , l'énergie du piège E et le temps de dépiégeage t_r . Ces quantités sont données par les relations suivantes (voir section 1.4.2):

$$t_c = - \left[\int_0^\infty k_c(E) dE \right]^{-1} \ln(1 - R_1), \quad (3.23)$$

$$E = - \left[\frac{k_B T_0 T_{MN}}{T_{MN} - T_0} \right] \ln(1 - R_2), \quad (3.24)$$

$$t_r = - [K_r(E)]^{-1} \ln(1 - R_3), \quad (3.25)$$

où les R_i sont des nombres aléatoires uniformément générés entre 0 et 1. Premièrement, nous choisissons R_1 pour déterminer le temps passé au-dessus du seuil de mobilité, t_c (éq.(3.23)), durant lequel le porteur se déplace à une vitesse $\mu_0 F$ sur une distance $\mu_0 F t_c$ (contribuant un courant constant $I = e\mu_0 F/L$ durant l'intervalle t_c). Deuxièmement, l'énergie du piège E est trouvée en choisissant R_2 et en utilisant l'éq.(3.24). Finalement, nous utilisons R_3 et E avec l'éq.(3.25) pour obtenir le temps de dépiégeage t_r . Cette procédure est répétée jusqu'au moment où le porteur est collecté, c'est-à-dire lorsque la distance voyagée est égale à L . Nous simulons un porteur à la fois et les résultats sont obtenus en moyennant sur un très grand nombre de porteurs (10^5 - 10^6).

3.3 Résultats et Discussion

3.3.1 Paramètres optimaux

Tous les résultats montrés dans ce chapitre ont été simulés pour des électrons avec une série de paramètres fixes: $|\mu_0| = 4 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ (mobilité microscopique), $\nu_{00} = 5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ (fréquence d'essai de sortie), $T_0 = 250 \text{ K}$ (température caractéristique), $T_{MN} = 435 \text{ K}$ (température Meyer-Neldel) et $a = 12 \text{ \AA}$ (longueur de localisation). Ces paramètres ont été choisis de manière à optimiser l'accord entre les résultats du modèle MN-DJM et toutes les données expérimentales que nous avons trouvées dans la littérature.

3.3.2 Présentation et discussion des résultats

À la fig. 3.2, nous montrons le courant transitoire calculé $I(t)$ en fonction du temps pour deux températures $T = 100, 250 \text{ K}$ et deux champs électriques appliqués $F = 50, 350 \text{ kV/cm}$ avec $L = 10 \mu\text{m}$. Toutes les courbes sont normalisées de manière à ce que $Q_{induite}(t \rightarrow \infty) = \lim_{t \rightarrow \infty} \left(\int_0^t I(t') dt' \right) = 1$, c'est-à-dire le courant est divisé par le nombre de porteurs injectés N_0 multiplié par la charge élémentaire e . À des temps très courts ($t < \nu_{00}^{-1}$), la majorité des porteurs se situent au-dessus du seuil de mobilité (avant le piégeage initial). Augmenter ν_{00} décroît le temps de vol libre initial et augmente t_T . Les paramètres de dispersion, α_1 et α_2 , croissent rapidement avec T , et plus lentement avec F , ce qui est en accord avec les expériences et notre intuition.

Les valeurs calculées de α_1 en fonction de T pour $F = 350 \text{ kV/cm}$ sont montrées à la fig. 3.3. Le modèle MN-DJM est comparé au modèle DJM et aux données expérimentales de Nebel et al. (Nebel, 1992). Les points empiriques croissent plus rapidement avec T que les deux modèles. Cependant, en utilisant les paramètres optimaux dans chaque cas, les données expérimentales sont légèrement en meilleur accord avec MN-DJM qu'avec DJM.

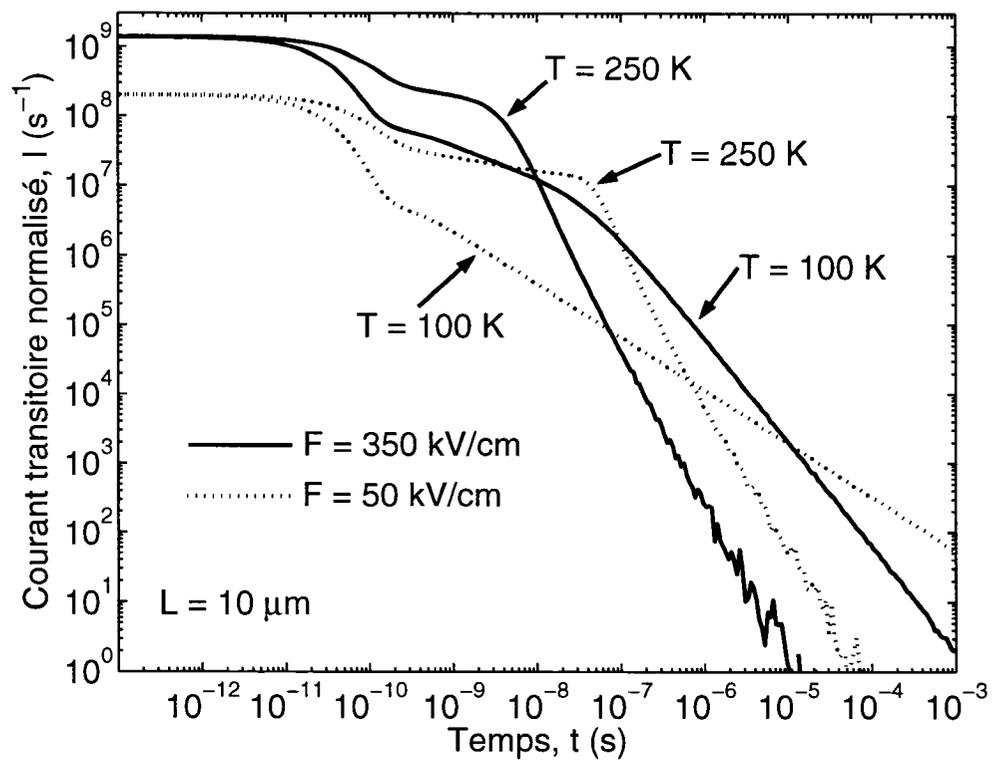


Figure 3.2 Courant transitoire normalisé versus le temps pour $T = 100, 250 \text{ K}$ et $F = 50, 350 \text{ kV/cm}$ avec $L = 10 \mu\text{m}$.

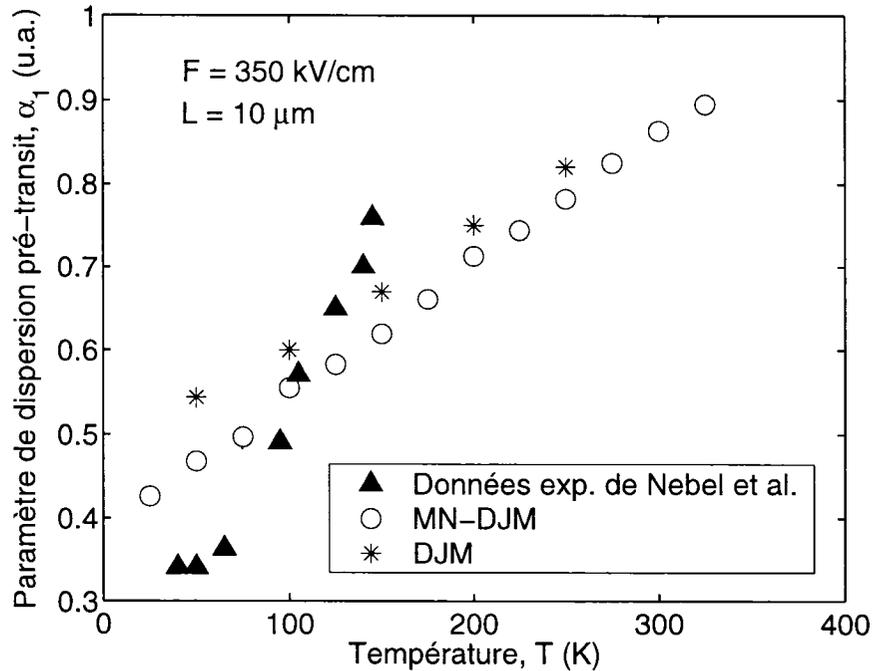


Figure 3.3 Paramètre de dispersion pré-transit α_1 versus T pour $F = 350$ kV/cm avec $L = 10$ μm . Les données expérimentales proviennent de Nebel et al. (Nebel, 1992).

Les résultats du modèle MN-DJM montrent une variation en fonction de T légèrement plus rapide que ceux du modèle DJM. Notons qu'à champ élevé, l'effet de champ domine sur l'effet MN diminuant l'influence de ce dernier. L'importance d'inclure l'effet MN dans le modèle DJM se situe dans le régime faible champ.

Dans la littérature, il existe plusieurs définitions de t_T et de μ_D . Dans les figures qui suivent, nous présenterons des données calculées à partir de trois définitions alternatives. À la fig. 3.4, nous montrons μ_D versus $1000/T$ pour $F = 20, 75, 175$ kV/cm. Nous comparons les calculs de MN-DJM aux données expérimentales de Tiedje (Tiedje, 1984) ($L = 3.8$ μm) et de Nebel et Bauer (Nebel, 1989) ($L = 4$ μm). Tiedje définit t_T comme étant l'intersection de deux droites (tangentes à $-1 + \alpha_1$ et $-1 - \alpha_2$) sur une échelle log-log du courant transitoire en fonction du temps. Tandis que pour Nebel, t_T est le temps où le rapport de la projection de la droite tangente à $-1 + \alpha_1$ (du courant transitoire en fonction du temps sur une échelle log-log) sur le courant mesuré est égal à deux, c'est-

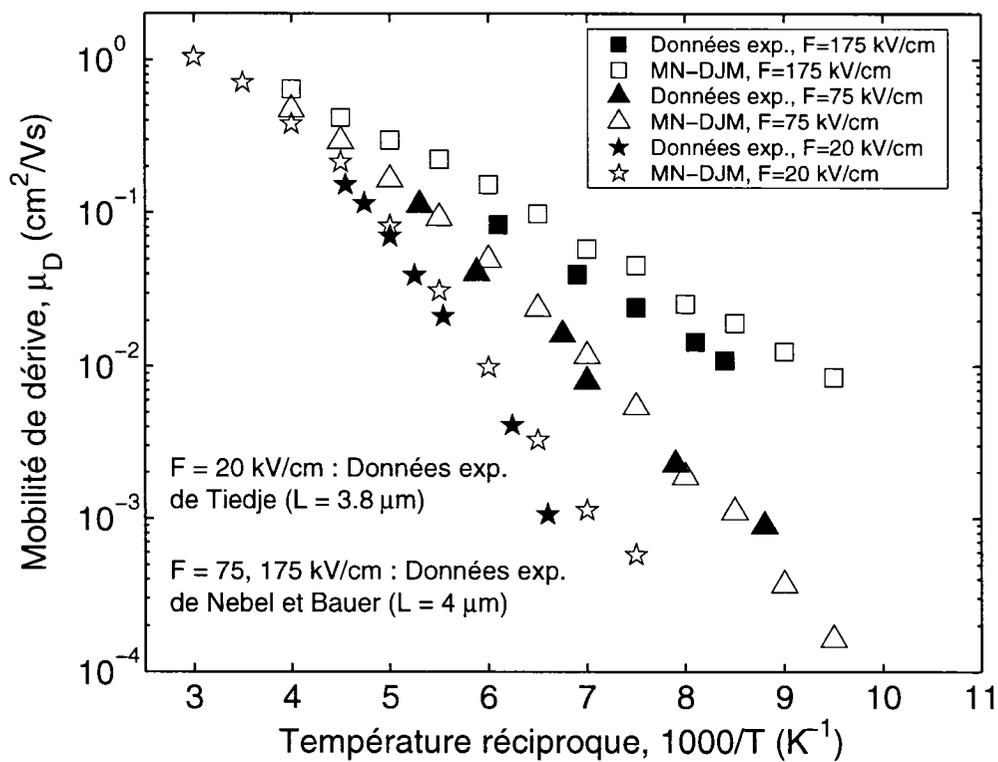


Figure 3.4 Mobilité de dérive μ_D versus la température réciproque pour $F = 20, 75, 175$ kV/cm. Les données expérimentales proviennent de Tiedje (Tiedje, 1984) ($L = 3.8 \mu\text{m}$) ainsi que Nebel et Bauer (Nebel, 1989) ($L = 4 \mu\text{m}$).

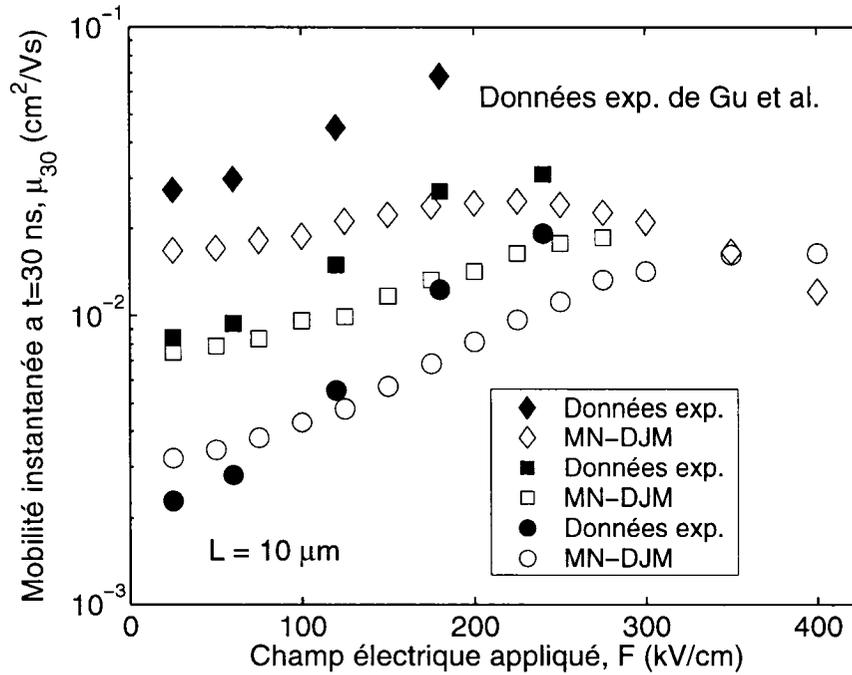


Figure 3.5 Mobilité instantanée à $t = 30$ ns, μ_{30} , versus F pour $T = 100, 125, 150$ K avec $L = 10 \mu\text{m}$. Les points empiriques sont de Gu et al. (Gu, 1995).

à-dire le temps où 50% des porteurs sont collectés. Dans les deux cas, nous utilisons $\mu_D = L/t_T F$. Il y a un bon accord entre les simulations et les points empiriques pour $F = 20, 75$ kV/cm. À $F = 75$ kV/cm, les simulations montrent un comportement légèrement non-linéaire versus la température réciproque. À $F = 175$ kV/cm, toutes les données expérimentales sont inférieures aux calculs de MN-DJM. Cependant, les pentes des deux courbes théorique et expérimentale sont quasiment identiques. Pour alléger les fig. 3.4-3.6, nous avons choisi de ne pas inclure les résultats du modèle DJM. De plus, l'avantage du modèle MN-DJM se situe dans sa capacité à reproduire les données expérimentales dans tous les régimes de T et de F . Donc, il n'est pas garanti que le modèle MN-DJM est supérieur au modèle DJM dans le régime haut champ, mais il est globalement meilleur.

À la fig. 3.5, nous présentons μ_t en fonction de F avec $t = 30$ ns et $T = 100, 125, 150$ K. μ_t est donnée par $\mu_t = I(t)L/Q_0 F$, où $I(t)$ est le courant transitoire au temps t et $Q_0 = \lim_{t \rightarrow \infty} (Q_{\text{induite}}(t)) = eN_0$. Nous pouvons aussi écrire $\mu_t = \mu_0 f_{\text{Bande}}(t)$,

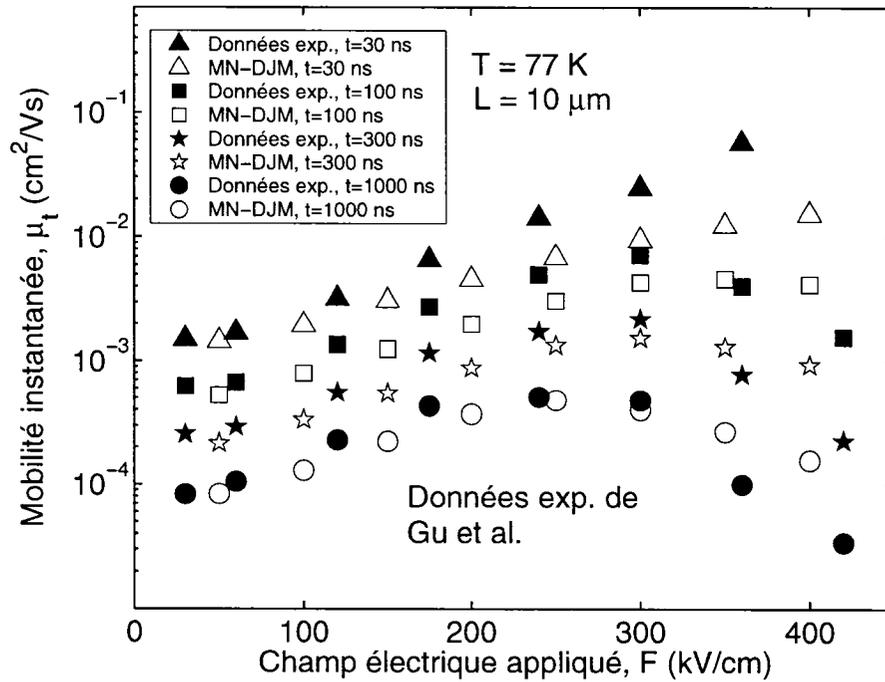


Figure 3.6 Mobilité instantanée μ_t versus F pour $t = 30, 100, 300, 1000$ ns, $T = 77$ K et $L = 10 \mu\text{m}$. Les résultats expérimentaux sont de Gu et al. (Gu, 1995).

où $f_{Bande}(t)$ est la fraction des porteurs qui se trouvent au-dessus du seuil de mobilité au moment t . Nous comparons MN-DJM aux données expérimentales provenant de Gu et al. (Gu, 1995). Nous voyons que μ_{30} augmente avec F jusqu'au moment où $t_T = 30$ ns, par après il diminue. Nous voyons que, pour presque toutes les valeurs de T et de F , MN-DJM donne des résultats qui sont inférieurs aux données expérimentales, que la dépendance en champ est plus faible en comparaison avec les expériences et que ces différences augmentent avec T .

À la fig. 3.6, nous montrons μ_t versus F pour différents temps $t = 30, 100, 300, 1000$ ns avec $T = 77$ K. Les données expérimentales proviennent de Gu et al. (Gu, 1995). Nous voyons que l'accord entre les résultats calculés et mesurés s'améliore lorsque t augmente et lorsque F diminue. De plus, pour F grand, MN-DJM surestime et sous-estime μ_t pour t long et court respectivement. Pour augmenter la valeur de μ_t à la fig. 3.5 ou à la fig. 3.6, nous devons augmenter le courant au temps t . Nous pouvons accomplir ceci

en augmentant soit le nombre de porteurs dans la bande de conduction au moment t ou la mobilité des porteurs. Ces changements peuvent être instaurés de plusieurs manières, telles qu'augmenter a ou μ_0 ou bien diminuer ν_{00} . Cependant, dans tous les cas, ceci dégrade l'accord observé à la fig. 3.4. Ainsi, les valeurs des paramètres ont été choisies de manière à optimiser l'accord entre MN-DJM et toutes les données expérimentales que nous avons rencontrées dans la littérature.

3.4 Conclusion

Le modèle MN-DJM reproduit correctement toutes les données expérimentales des expériences de TOF à faible et haut champ et montre un accord global amélioré pour tous les régimes de T et F en comparaison avec les modèles MN et DJM. Les résultats à haut champ de MN-DJM dévient souvent des données expérimentales en augmentant F . Quant aux mesures de μ_D ou de μ_t , le modèle donne des résultats parfois au-dessus ou en-dessous des différents points empiriques. Il est impossible d'ajuster MN-DJM de manière à reproduire parfaitement toutes les données provenant des différentes expériences. En ajustant le modèle afin d'obtenir un accord amélioré entre celui-ci et une série de données expérimentales à haut champ nous observons une détérioration de l'accord avec les données d'une autre expérience.

Il existe une abondance de données expérimentales à faible champ qui sont toutes en accord avec MN-DJM. Ceci suggère que le problème se situe au niveau des expériences, plutôt que dans le modèle. Une explication possible est qu'il y a des différences entre les échantillons qui ne sont pas perceptibles à faible champ et qui le deviennent à champ élevé. Il est possible que certains paramètres de l'échantillon qui influencent le comportement en champ, telle que la longueur de localisation a , soient sensibles à la qualité et/ou les conditions de préparation des échantillons. Une autre possibilité est que ces anomalies soient dues à des erreurs introduites lors des expériences à haut champ, qui

sont notoirement difficiles à effectuer. Par exemple, à champ élevé, malgré les efforts des expérimentateurs, il est possible que le champ électrique interne ne soit pas constant comme le supposent les modèles de transport. Nous pourrions inclure l'effet d'un champ linéaire, mais ceci augmenterait le nombre de paramètres ajustables. De plus, il y a possiblement un effet de saturation de la vitesse de bande, la relation $v = \mu_0 F$ serait valide jusqu'à une certaine valeur du champ au-dessus de laquelle v serait une constante. Donc, des données à champ élevé plus fiables sont nécessaires. En effectuant toutes les mesures sur plusieurs échantillons dans plusieurs laboratoires nous pourrions espérer comprendre les contradictions observées ce qui permettrait de mieux tester le modèle.

Chapitre 4

Simulation des expériences de temps de vol à des temps de l'ordre de la picoseconde dans le a-Si:H

4.1 Introduction

Dans le chapitre précédent, nous avons développé un modèle de transport (MN-DJM) pour le a-Si:H pouvant reproduire adéquatement le comportement en température et en champ des données expérimentales de TOF. La résolution pour ce type d'expérience est limitée par le temps de réponse du circuit externe, généralement > 1 ns. Une méthode purement optique d'effectuer l'expérience de temps de vol (TOF), originalement appliquée au GaAs cristallin par Shank et al. (Shank, 1981), a été utilisée pour mesurer la mobilité de dérive μ_D dans le a-Si:H (Schiff, 1989; Devlen, 1989(1); Devlen, 1989(2)). La résolution de cette technique est ~ 1 ps. Avant de pouvoir confirmer que le modèle MN-DJM fonctionne correctement dans tous les régimes, il faudra comparer celui-ci aux données empiriques mesurées à des temps très courts.

Pour des temps plus longs que 1 ns (TOF traditionnel), les porteurs ont été piégés et dépiégés plusieurs fois par les niveaux discrets situés sous le seuil de mobilité. Donc, le transport des charges dans ce domaine temporel est dominé par la présence des états localisés, ce qui cause la dispersion. Supposant qu'initialement tous les porteurs injectés se trouvent au-dessus du seuil de mobilité, le transport à cet instant serait non-dispersif, c'est-à-dire $\mu_D = \mu_0$ où μ_0 est la mobilité microscopique. Si ce régime sans-pièges était accessible expérimentalement, nous pourrions mesurer directement certains paramètres, tel que μ_0 , et limiter les plages de valeurs de d'autres paramètres amenant ainsi une connaissance plus approfondie de la dynamique des porteurs. De plus, certains modèles, tel

que le modèle de conduction par sauts, ne supposent pas une mobilité initiale plus élevée, donc une observation directe du régime non-dispersif pourrait éliminer l'incertitude à ce sujet. Avec la version optique de l'expérience de TOF, l'espoir était d'obtenir des données dans le régime sans-pièges, mais ceci n'a pas été observé. Ces mesures (picosecondes) sont différentes des données traditionnelles (nanosecondes), parce qu'elles ont été obtenues à des temps assez courts pour que les effets de la dispersion soient petits (voir fig. 4.2). Pour des temps ~ 10 ps, dans le cadre du transport par piégeage multiple, les porteurs ont été piégés en moyenne une fois. Ceux qui sont réémis au-dessus du seuil de mobilité, dans cet intervalle de temps, le sont principalement par les états localisés peu profonds énergétiquement, puisque la fréquence d'émission augmente exponentiellement avec l'énergie du piège (voir chapitre 3). Donc, les données obtenues à des temps courts nous fournissent de l'information sur le transport dans les états à proximité du seuil de mobilité.

4.2 Méthode expérimentale

L'expérience optique de TOF exploite l'effet d'électroabsorption, c'est-à-dire la variation de la transmittance d'un matériau en fonction du champ électrique, F . Dans ce cas un potentiel électrique constant est appliqué à l'échantillon, après quoi les paires électron-trou sont générées. Il y a un champ électrique local f , dû à la charge d'espace, ($f \ll F$) généré par les électrons et les trous qui forment les paires. Celles-ci se séparent sous l'influence de F . Le champ f , opposé à F , dépend de la distance entre les électrons et les trous et donc est dépendent du temps. Le champ électrique total $F_{TOT}(x, t) = F - f(x, t)$, et par conséquent l'absorption (effet d'électroabsorption), diminue avec le temps jusqu'au moment où les porteurs sont collectés aux extrémités de l'échantillon. Avec cette version optique de l'expérience de TOF, la variation relative de la transmittance

$(\Delta\tau/\tau)$ est mesurée en fonction du temps. Il a été démontré (Schiff, 1989) que,

$$\frac{\Delta\tau(t)}{\tau} = -\frac{\partial\alpha}{\partial F} \int_0^L f(x,t) dx = \frac{\partial\alpha}{\partial F} \delta V(t) = \frac{\partial\alpha}{\partial F} \frac{Q_{ind}(t)}{C}, \quad (4.1)$$

où $\alpha(F)$ est le coefficient d'absorption, $\delta V(t)$ est la variation du potentiel électrique aux bornes de l'échantillon due à la charge d'espace (porteurs en mouvement), $Q_{ind}(t)$ est la charge induite et C est la capacitance interélectrode. L'éq.(4.1) montre que la variation de la transmittance est proportionnelle à la charge induite. La dérivée temporelle de la charge induite est égale au photocourant ($dQ_{ind}/dt = I(t)$), ce qui fournit la même information que l'expérience de TOF traditionnelle, mais à des temps de l'ordre de la picoseconde. La variation en transmittance a été enregistrée en utilisant la technique pompe et sonde (« pump and probe »), voir (Schiff, 1989) et les références incluses dans (Schiff, 1989). Essentiellement, une impulsion laser d'une durée < 100 fs avec une énergie de ≈ 2 eV répétée avec une fréquence ≈ 8 kHz est séparée en deux, la pompe et la sonde. Le champ électrique de polarisation F est appliqué en impulsions de ≈ 10 μ s synchronisées avec les impulsions laser. La pompe est défocalisée et utilisée pour illuminer une extrémité de l'échantillon pour créer des paires électron-trou (un nombre beaucoup plus petit que la charge associée au champ F). La sonde est retardée et puis envoyée à travers le centre de l'échantillon dans lequel la variation de la transmittance, induite par la pompe, est mesurée en fonction du retard entre les impulsions de la pompe et de la sonde.

Nous utilisons le modèle MN-DJM (voir chapitre 3), à l'aide de la méthode de simulation Monte-Carlo (MC), pour reproduire les données expérimentales picosecondes. À notre connaissance, ceci est la première tentative de simuler les résultats picosecondes dans le a-Si:H.

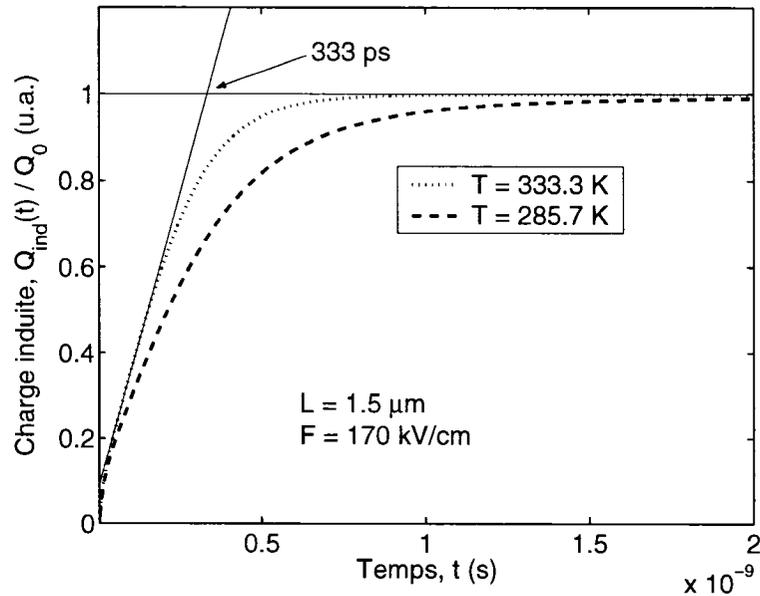


Figure 4.1 Charge induite $Q_{ind}(t)/Q_0$ calculée avec MN-DJM en fonction du temps pour $T = 285.7, 333.3$ K avec $F = 170$ kV/cm. La méthode pour obtenir t_T avec la pente initiale et le maximum de $Q_{ind}(t)$ est montrée pour la courbe à $T = 333.3$ K.

4.3 Résultats et Discussion

Tous les résultats simulés, dans ce chapitre, ont été obtenus pour des électrons en utilisant une série de paramètres fixes: $|\mu_0| = 8 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$, $\nu_{00} = 3 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$, $T_0 = 240$ K, $T_{MN} = 410$ K et $a = 14 \text{ \AA}$. Les valeurs des paramètres ont été choisies de manière à reproduire les données empiriques picosecondes et nanosecondes (Maassen, 2005). Naturellement, il y a une légère, mais acceptable, détérioration de l'accord entre les résultats nanosecondes simulés et expérimentaux due à une déviation des paramètres optimaux trouvés pour ce domaine temporel (voir fig. 4.3).

Pour déterminer la mobilité de dérive, les expérimentateurs mesurent la variation de la transmittance $\Delta\tau$ en fonction du temps. Nous avons montré à la section 4.2 que la charge induite est proportionnelle à $\Delta\tau$. À la fig. 4.1, nous présentons la charge induite $Q_{ind}(t)/Q_0$ versus le temps pour $T = 285.7, 333.3$ K avec $F = 170$ kV/cm et $L = 1.5 \mu\text{m}$.

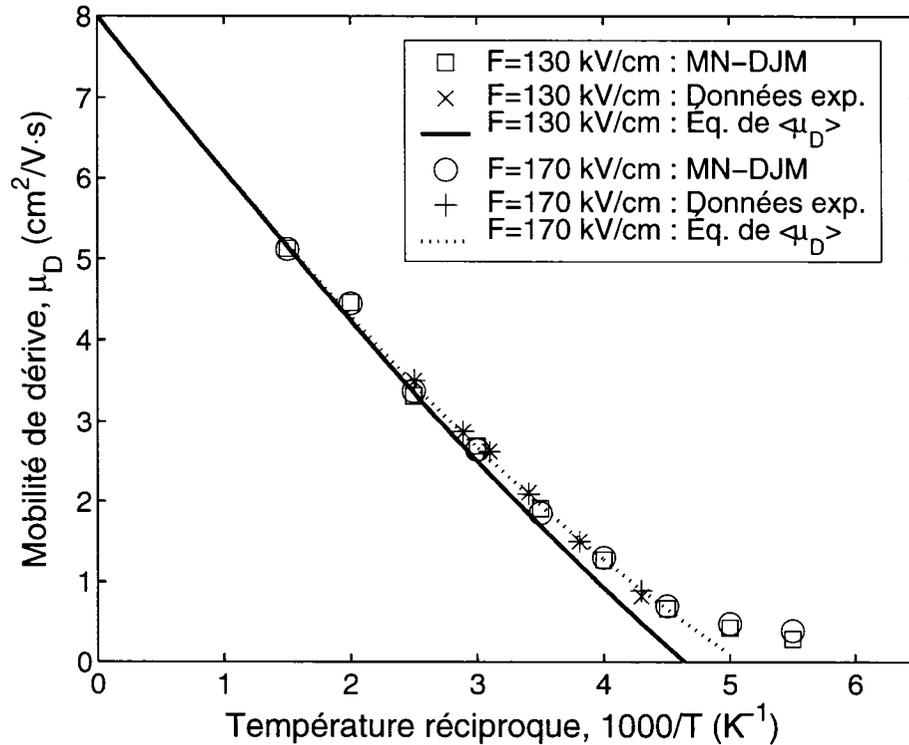


Figure 4.2 Mobilité de dérive μ_D versus la température réciproque pour $F = 130, 170$ kV/cm. Les données expérimentales proviennent de Devlen et al. (Devlen, 1989(1)).

Le temps de transit est défini comme étant l'intersection entre la valeur maximale de $Q_{ind}(t)$ et la projection de la pente initiale (Schiff, 1989). Nous montrons, à la fig. 4.1, la procédure pour obtenir t_T pour la courbe à $T = 333.3$ K. Des définitions alternatives de t_T sont utilisées par d'autres auteurs (Devlen, 1989(1); Devlen, 1989(2)). Dans ces cas, les expérimentateurs ajustent une fonction qui exprime $Q_{ind}(t)$ en terme d'un paramètre libre qui est la vitesse de dérive. Un désavantage avec cette méthode est que la fonction à ajuster est applicable seulement dans le cas où le paquet de porteurs se déplace à une vitesse constante, ce qui est loin d'être toujours vrai. De plus, il est difficile de démontrer la cohérence entre les données mesurées avec cette méthode qui est valable pour un régime très restreint et celles prises à des temps plus longs (là où la vitesse n'est pas du tout constante) avec d'autres méthodes plus générales.

À la fig. 4.2, nous montrons la mobilité de dérive μ_D en fonction de $1000/T$ pour deux valeurs de champ électrique ($F = 130, 170 \text{ kV/cm}$) avec $L = 1.5 \mu\text{m}$. Les données expérimentales de Devlen et al. (Devlen, 1989(1)) sont comparées avec MN-DJM, calculées avec $\mu_D = L/Ft_T$, où le temps de transit t_T est le temps de montée de la charge induite (voir fig. 4.1). Les temps de transit sont de l'ordre de $\sim 100 \text{ ps}$. Nos calculs de t_T possèdent au plus une erreur de 10%. Il y a un très bon accord entre les données empiriques et simulées. Les données picosecondes de μ_D montrent une très faible dépendance en champ électrique, ce qui peut être expliqué, dans le cadre théorique du modèle MT, par un manque de dispersion. La dispersion, qui est associée à l'étalement spatial du paquet de porteurs, dépend du nombre d'évènements de piégeage (c'est-à-dire L et k_c) et le temps de piégeage (c'est-à-dire K_r). k_c et K_r sont tous les deux fortement dépendants de T (voir éqns.(3.9),(3.17)), donc augmenter T réduit le taux de piégeage (temps dans la bande plus long) et augmente le taux de dépiégeage (temps dans les pièges plus court). Par conséquent, à des températures élevées dans des échantillons courts, le paquet de porteurs s'étale relativement peu (comme supposé dans (Devlen, 1989(1); Devlen, 1989(2))). Ceci aide à expliquer pourquoi les données expérimentales obéissent à la relation $v_D = \mu_D F$, où μ_D est une fonction de T mais pas de F .

La dépendance en T de μ_D est presque linéaire en fonction de la température réciproque (notez l'utilisation peu usuelle d'une échelle linéaire pour μ_D). Ce comportement peut être expliqué en observant les propriétés de la valeur moyenne de la mobilité de dérive $\langle \mu_D \rangle$. Nous pouvons écrire,

$$\langle \mu_D \rangle \approx L/F \langle t_T \rangle, \quad (4.2)$$

où $\langle t_T \rangle = (n + j) \langle t_c \rangle + n \langle t_r \rangle$ est le temps de transit moyen, n est le nombre d'évènements de piégeage, j est un nombre qui tient compte du fait que les porteurs sont collectés avant de piéger une $(n + 1)^{\text{e}}$ fois ($0 < j < 1$), $\langle t_c \rangle$ est le temps de capture

moyen et $\langle t_r \rangle$ est le temps d'émission moyen. En écrivant, $L = \mu_0 F(n + j) \langle t_c \rangle$, nous pouvons éliminer n et j pour obtenir,

$$\langle \mu_D \rangle \approx \frac{\mu_0 \langle t_c \rangle}{\langle t_r \rangle + \langle t_c \rangle}, \quad \text{pour } n \text{ grand.} \quad (4.3)$$

Ce résultat est équivalent à la définition de la mobilité de dérive pour un seul niveau de piège donnée par Spear (Spear, 1969). En utilisant MN-DJM avec plusieurs approximations simplificatrices, nous trouvons,

$$\langle \mu_D \rangle \approx \mu_0 \left(1 - \frac{T_0}{T_{eff}} \right), \quad \text{pour } T_{eff} > T_0, \quad (4.4)$$

où $T_{eff}^2 = T^2 + (eaF/2k_B)^2$. Si nous négligeons la contribution de l'effet tunnel à K_r ($a = 0$), nous retrouvons l'équation utilisée pour ajuster les données expérimentales picosecondes dans (Devlen, 1989(1)). L'éq.(4.4), tracée à fig. 4.2, explique la dépendance presque linéaire de μ_D en fonction de la température réciproque et montre que ce comportement est observable, pour des mesures picosecondes et nanosecondes, à des températures élevées. Par contre, ce résultat simplifié montre une dépendance en champ qui n'est pas observée expérimentalement. Notez que la définition de t_T implicite dans l'éq.(4.4) diffère de celle utilisée pour les simulations et les mesures empiriques.

Conventionnellement, les données expérimentales nanosecondes de μ_D sont présentées sur une échelle logarithmique. Pour montrer que les données picosecondes de Devlen sont cohérentes avec les mesures de la mobilité de dérive obtenues à des temps de l'ordre de la nanoseconde, nous avons tracé à la fig. 4.3 les μ_D nanosecondes de Tiedje (Tiedje, 1984) et de Nebel et Bauer (Nebel, 1989) avec les μ_D picosecondes de Devlen et al. (Devlen, 1989(1)) versus la température réciproque. Nous comparons les données expérimentales à MN-DJM. Nous voyons que tous les points empiriques démontrent un comportement cohérent en fonction de T . Comme nous avons mentionné plus haut, les paramètres ont été choisis de manière à accommoder les données expérimentales picosec-

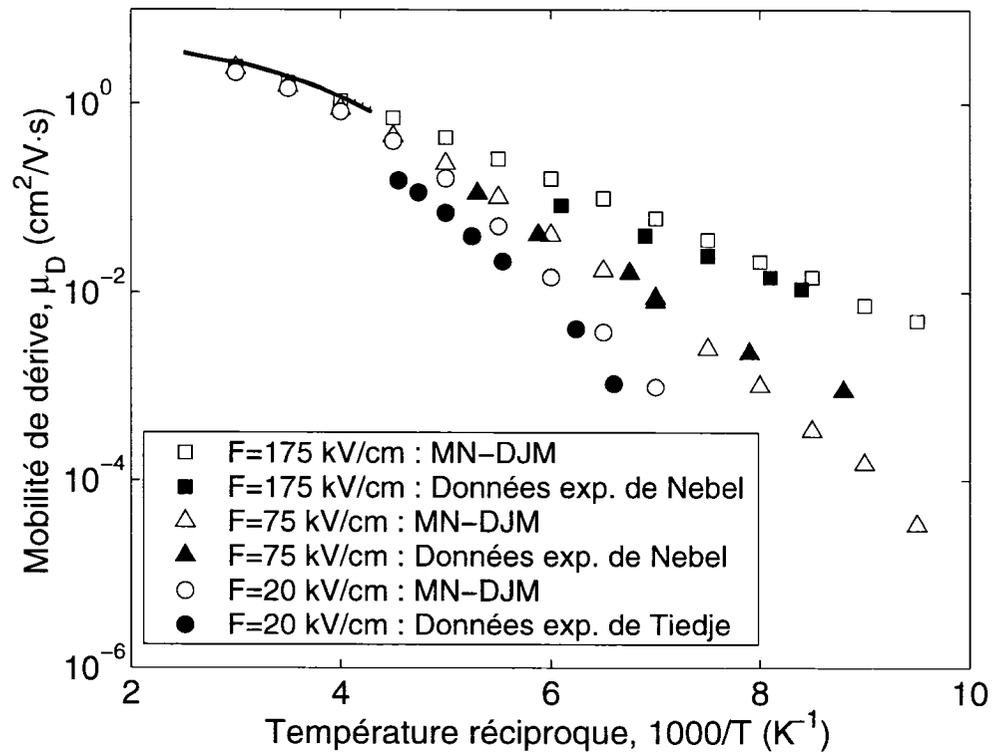


Figure 4.3 Mobilité de dérive μ_D versus la température réciproque pour $F = 20, 75, 130, 170, 175 \text{ kV/cm}$. Les lignes pleine et pointillée sont les mesures picosecondes de Devlen et al. (Devlen, 1989(1)) pour $F = 130, 170 \text{ kV/cm}$ respectivement. Les points sont les données nanosecondes expérimentales et calculées.

ondes et nanosecondes, ceci résulte en une détérioration de l'accord entre le modèle et les mesures nanosecondes en comparaison avec les anciens paramètres. Le changement le plus significatif des paramètres est la mobilité microscopique, μ_0 , qui passe de $4 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ à $8 \text{ cm}^2/\text{Vs}$. Les paramètres actuels reproduisent les données picosecondes très bien, comme le montre la fig. 4.2. Mais, à la fig. 4.3, si nous extrapolons la mobilité de dérive lorsque $T \rightarrow \infty$ pour les différentes valeurs de F , les données expérimentales pointent vers une plus petite valeur de μ_D en comparant avec MN-DJM. Naturellement, cette différence peut surgir en raison d'une comparaison faite entre différentes techniques expérimentales appliquées à différents échantillons dans différents laboratoires. À des temps de l'ordre de la picoseconde, il est possible que la mobilité des porteurs soit plus élevée en raison de la dépendance en énergie de $\mu_0(E)$. Les états électroniques situés bien au-dessus du seuil de mobilité (E_c) permettent les porteurs de se déplacer à des vitesses grandement supérieures à $\mu_0(E_c)F$. Au fur et à mesure que le paquet de porteurs dérive dans l'échantillon, l'énergie moyenne du paquet diminue et par conséquent l'influence des états à hautes mobilités sur les quantités mesurées à des temps plus longs ($\sim 1 \text{ ns}$) est réduite.

La vitesse de dérive v_D en fonction du champ F pour différentes températures avec $L = 1.5 \mu\text{m}$ est montrée à la fig. 4.4. Les données expérimentales proviennent de Devlen et al. (Devlen, 1989(1)). v_D est calculée avec $v_D = L/t_T$. Nous trouvons que MN-DJM reproduit correctement le comportement des résultats empiriques. La dépendance superlinéaire en F de v_D pour $T < 396 \text{ K}$ peut être expliquée par le dépiégeage par effet de champ dans MN-DJM. Lorsque T croît, le dépiégeage thermique domine sur l'émission par effet tunnel. Ceci mène à la corrélation linéaire observée entre v_D et F pour $T = 396 \text{ K}$. Nous voyons que pour toutes les valeurs de T avec $F < 170 \text{ kV/cm}$, la vitesse de dérive est linéaire en F , ce qui est en accord avec la faible dépendance en champ montrée à la fig. 4.2. La relation entre la température et le champ dans l'expression de $K_r(E)$ (éq.(3.9)) réussit aussi à bien reproduire les valeurs élevées de v_D lorsque T

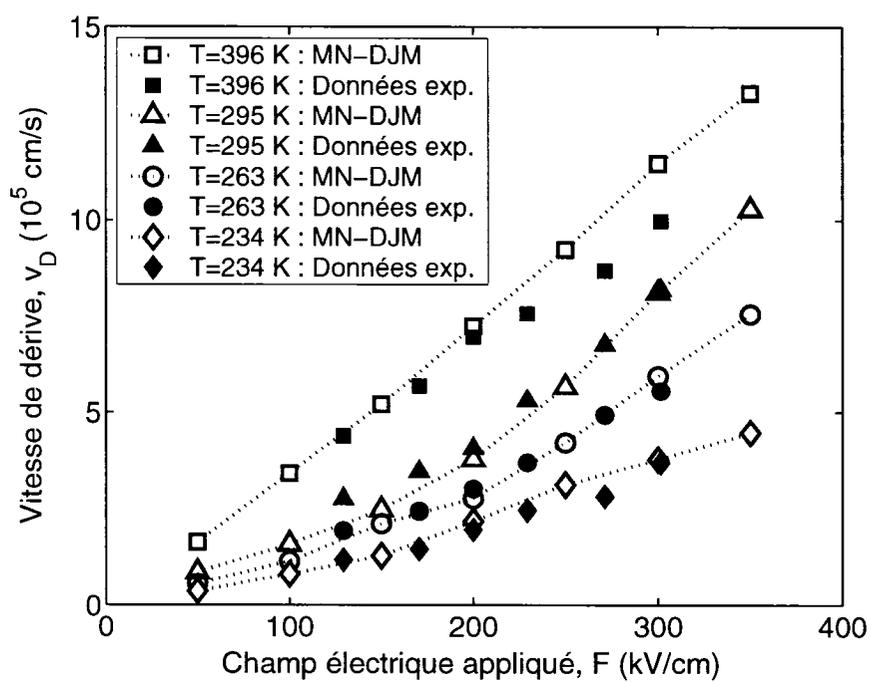


Figure 4.4 Vitesse de dérive v_D versus le champ électrique appliqué pour $T = 234, 263, 295, 396$ K. Les données expérimentales proviennent de Devlen et al. (Devlen, 1989(1)).

augmente. Si nous extrapolons v_D lorsque $F \rightarrow 0$ les données expérimentales semblent pointer vers une plus grande valeur de v_D en comparaison avec MN-DJM. Ceci pourrait suggérer une valeur plus élevée de μ_0 .

4.4 Conclusion

L'accord entre les données expérimentales obtenues à des temps de l'ordre de la picoseconde et MN-DJM est bon. Notre modèle reproduit, avec une série de paramètres fixes, les dépendances en température et en champ des résultats empiriques. Nous montrons qu'une dépendance presque linéaire de μ_D versus la température réciproque est prévue pour des températures élevées. Nous trouvons que pour $F < 170 \text{ kV/cm}$ et pour $T < 250 \text{ K}$ la mobilité de dérive est indépendante du champ. Nous montrons aussi que les données picosecondes sont cohérentes avec les données nanosecondes traditionnelles. De plus, nos calculs montrent qu'une amélioration d'un ordre de grandeur de la résolution expérimentale pourrait permettre l'observation directe du transport sans-pièges. MN-DJM est à notre connaissance le premier modèle unifié à reproduire de manière satisfaisante les résultats expérimentaux du transport des charges dans le a-Si:H, et ce dans tous les régimes de temps, de température et de champ électrique qui ont été étudiés jusqu'ici.

Conclusion

Dans ce mémoire, nous avons étudié par la méthode Monte Carlo le transport des charges par piégeage multiple (MT) en supposant une densité exponentielle des états localisés dans le silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H).

En premier lieu, nous avons revu la physique du dépiégeage par effet tunnel et les conséquences de celui-ci dans le modèle DJM («Diagonal Jump Model»). Nous avons trouvé que, dans le modèle DJM, le chemin de sortie (Δx) qui optimise le taux de dépiégeage $K_r(E, \Delta x)$ est égal à la valeur moyenne de Δx . Par contre, nous avons montré qu'évaluer $K_r(E, \Delta x)$ au point $\langle \Delta x \rangle$ surestime le taux de dépiégeage en comparaison avec $\langle K_r(E) \rangle$. Ensuite, nous avons proposé que le taux de dépiégeage, pour une énergie de piège donnée, est obtenu en effectuant la somme des contributions de tous les différents chemins de sortie. Cette procédure exige que nous déterminions une quantité qui est le taux de dépiégeage par unité de distance $k_r(E, \Delta x)$. En principe, ce dernier est obtenu par un calcul basé sur les premiers principes, mais en ce moment nous ne possédons pas une telle solution. Un effort dans cette direction serait très intéressant pour le domaine des semi-conducteurs amorphes. Par la suite, nous avons proposé deux expressions de $k_r(E, \Delta x)$ basées sur les hypothèses incluses dans le modèle DJM, dont une qui résulte en un taux de dépiégeage différent de celui utilisé précédemment dans ce modèle. De plus, nous avons montré que le taux de piégeage $k_c(E)$ peut aussi inclure une dépendance en Δx . Dans ce cas, il s'agit de calculer le taux de piégeage par unité de distance $\tilde{k}_c(E, \Delta x)$. Nous avons montré qu'en réécrivant le bilan détaillé de manière à tenir compte des chemins de sortie, l'expression de $\tilde{k}_c(E, \Delta x)$ est connue lorsque nous définissons $k_r(E, \Delta x)$. Donc, le fait de connaître $k_r(E, \Delta x)$ détermine toute la physique du transport.

Ensuite, nous avons développé un modèle conjoint basé sur le transport par MT qui inclut

l'effet Meyer-Neldel et le dépiégeage par effet tunnel. Nous avons validé l'hypothèse de négliger la contribution du dépiégeage par effet tunnel au courant total, en montrant que le rapport de la charge induite moyenne produite par un électron qui dérive dans la bande versus celui qui dépiège sur une distance Δx est très grand. Nous avons trouvé, qu'avec une série de cinq paramètres fixes, ce nouveau modèle reproduit adéquatement le comportement en champ électrique et en température des données expérimentales. La reproduction exacte des résultats de μ_D provenant de différents groupes de recherche n'a pas été atteinte. Nous avons proposé que ceci est peut-être dû à des différences entre les échantillons et/ou à la difficulté expérimentale associée aux mesures à haut champ. Afin de résoudre cette contradiction, nous avons suggéré de faire toutes les mesures sur différents échantillons dans différents laboratoires.

Par après, nous avons trouvé que le modèle conjoint, avec une légère variation des paramètres optimaux trouvés au chapitre 3, est capable de reproduire les données expérimentales obtenues à des temps de l'ordre de la picoseconde. Naturellement, ce changement de paramètres résulte en une légère, mais acceptable, détérioration de l'accord entre le modèle et les résultats empiriques mesurés pour $t > 1$ ns. Avec un calcul simple basé sur les valeurs moyennes des variables dynamiques, nous avons réussi à expliquer le comportement de μ_D en fonction de la température. Nous avons montré que les données picosecondes sont cohérentes avec les données nanosecondes traditionnelles. Nos calculs ont suggéré que le régime de transport sans-pièges serait observable avec une amélioration en résolution temporelle d'un ordre de grandeur. Notre modèle est à notre connaissance le premier à reproduire de manière satisfaisante les résultats empiriques dans tous les régimes de température, de champ électrique et de temps qui ont été étudiés jusqu'à présent.

Malgré que le modèle MN-DJM soit le premier à reproduire les données expérimentales dans tous les régimes, est-ce qu'un modèle basé sur le transport par sauts incluant l'effet Meyer-Neldel pourrait aussi reproduire ces mêmes données? Nous savons qu'à des temps

très courts le modèle par sauts diffère du modèle MT, par le fait que le transport « hopping » suppose que les porteurs injectés se retrouvent sous le seuil de mobilité dans un intervalle de temps plusieurs ordres de grandeur plus petit que le temps moyen du porteur libre $\langle t_c \rangle$ dans le transport par MT (temps approximatif durant lequel le courant est maximal, voir fig. 3.2). Par conséquent, le courant prédit par le transport par sauts et par MT possède une dépendance en temps donnée par l'éq.(1.2), pour $t < t_T$, qui est valide pour des temps $t < 10^{-14}$ s et $t \sim 10^{-11}$ s respectivement. Donc, d'un point de vue théorique, il n'est pas évident qu'un modèle de conduction par sauts pourrait reproduire les données expérimentales picosecondes qui démontrent très peu de dispersion, car pour ce type de transport le paquet de porteurs disperse déjà à des temps bien inférieurs à $\langle t_c \rangle$ (temps durant lequel, dans le modèle MT, la majorité des porteurs se situent toujours dans la bande après injection). D'un point de vue expérimental, une observation directe du régime de transport sans-pièges ($t < 10^{-11}$ s dans la fig. 3.2), qui serait possiblement accessible avec une amélioration de la résolution expérimentale (mentionné plus haut), aiderait à comprendre quel est le modèle de transport dominant.

Notons aussi que, le courant total est composé de la somme des courants individuels produits par chaque porteur. Dans le cas du transport « hopping », les porteurs se déplacent en effectuant des sauts par effet tunnel ce qui résulte en un grand nombre de pics de courant très courts (temps du saut par effet tunnel). Tandis que, pour le transport par MT, chaque porteur dans la bande contribue un courant constant durant un temps moyen de $\langle t_c \rangle$. Donc, avec une résolution expérimentale améliorée, nous pourrions aussi espérer observer des variations rapides du courant (la tendance générale du courant serait en accord avec l'éq.(1.2)), ce qui favoriserait le transport par sauts. L'observation de ce phénomène deviendrait plus favorable lorsque le nombre de porteurs injectés est très petit.

Il est intéressant de noter que le modèle MN-DJM est applicable dans des matériaux possédant les caractéristiques suivantes: présence d'états étendus et d'états localisés qui sont séparés par un seuil de mobilité et dans le cas où le transport est limité par l'interaction

entre les porteurs et les états localisés. Donc, nous pouvons imaginer que le modèle MN-DJM pourrait décrire le transport des charges dans les semi-conducteurs amorphes, tels que le Ge ou SiC qui possèdent le même nombre de voisins que le Si. Nous pouvons aussi inclure les verres chalcogénures (systèmes composés de S, Se ou Te), les semi-conducteurs amorphes de type V (par ex.: As) et de type III-V (par ex.: GaAs). En principe, nous pourrions aussi appliquer ce modèle à certains isolants et semi-conducteurs cristallins dopés (les dopants agissant comme des états localisés).

La relaxation des pièges est un mécanisme par lequel le niveau d'énergie du porteur piégé diminue avec le temps. Chen et al. (Chen, 2000) ont démontré que la relaxation dans le modèle standard MT augmente la mobilité microscopique d'environ un ordre de grandeur, ce qui est compatible avec l'absence de recombinaison geminée à la température de la pièce, et que la relaxation n'affecte pas les données mesurables. Puisque le modèle MN-DJM fournit des résultats satisfaisants, le fait d'ajouter un paramètre supplémentaire dans ce modèle afin d'augmenter la valeur de μ_0 est, selon nous, pas nécessaire. Par contre, la présence de la relaxation fournit une explication au fait qu'à la fig. 4.3 nos données de μ_D nanosecondes surestiment les données expérimentales dans la limite $T \rightarrow \infty$, malgré que ce choix des paramètres produise un très bon accord avec les μ_D picosecondes. Dans ce cas, la dispersion créée par le modèle MN-DJM serait insuffisante et la présence de la relaxation augmenterait l'effet de la dispersion.

Nous souhaitons noter qu'un certain effort a été mis sur la résolution analytique des équations de transport (éqns.(1.6),(1.7)), en utilisant l'analyse complexe. Malgré que nous n'ayons pu trouver de solutions dans le temps disponible, nous pensons que celles-ci sont peut-être toujours accessibles. Aussi, nous croyons que le transport par MT, étant un phénomène statistique, peut être représenté approximativement en considérant seulement le comportement moyen des porteurs (comme nous avons fait de manière simplifiée à la section 4.3). Une telle approche donnerait, pour un modèle donné, des résultats préliminaires démontrant le comportement des porteurs et des données mesurables en fonction

des paramètres externes avant de procéder à des calculs plus élaborés (ex.: méthode Monte Carlo).

Références

- Aljishi, S., Cohen, J.D., Jin, S. et Ley, L., Phys. Rev. Lett. **64**, 2811 (1990).
- Anderson, P.W., Phys. Rev. **109**, 1492 (1958).
- Antoniadis, H. et Schiff, E.A., Phys. Rev. B **43**, 13957 (1991).
- Chen, W.C. et Hamel, L.A., Can. J. Phys. **73**, 585 (1995).
- Chen, W.C. et Hamel, L.A., dans: Amorphous Silicon Technology, Éditeurs: Hack, M., Schiff, E.A., Wagner, S., Schropp, R. et Matsuda, A. (Materials Research Society, Pittsburgh, 1996) p.759.
- Chen, W.C., Hamel, L.A. et Yelon, A., J. Non-Cryst. Solids **220**, 254 (1997).
- Chen, W.C., Hamel, L.A. et Yelon, A., J. Non-Cryst. Solids **258**, 223 (1999).
- Chen, W.C., Kemp, M., Hamel, L.A. et Yelon, A., J. Non-Cryst. Solids, **277**, 219 (2000).
- Constable, H., Proc. R. Soc. Lond. A **108**, 355 (1926).
- Devlen, R.I., Tauc, J. et Schiff, E.A., J. Non-Cryst. Solids **114**, 567 (1989).
- Devlen, R.I., Schiff, E.A., Tauc, J. et Guha, S., Mat. Res. Soc. Symp. Proc. Vol. **149**, 107 (1989).
- Dong, J. et Drabold, D.A., Phys. Rev. Lett. **80**, 1928 (1998).
- Dubeau, J., Hamel, L.A. et Pochet, T., Phys. Rev. B **53**, 10740 (1996).
- Esipov, S.E., Phys. Rev. B **44**, 7930 (1991).
- Gradshteyn, I.S. et Ryshik, I.M., Table of integrals, series, and products (New York: Academic Press, 1980).

- Grünewald, M. et Movaghar, B., *J. Phys.: Condens. Matter* **1**, 2521 (1989).
- Gu, Q., Schiff, E.A., Chévrier, J.B. et Equer, B., *Phys. Rev. B* **52**, 5695 (1995).
- Gu, Q., Schiff, E.A., Chevrier, J.B. et Equer, B., *J. Non-Cryst. Solids*, **198-200**, 194 (1996).
- Kalos, M.H. et Whitlock, P.A., *Monte Carlo Methods Volume I*, (John Wiley & Sons, Inc., New York, 1986).
- Maassen, J., Yelon, A., Hamel, L.A. et Chen, W.C., *Mat. Res. Soc. Symp. Proc. Vol. 862*, 519 (2005).
- Maassen, J., Yelon, A. et Hamel, L.A., soumis à *Journal of Non-Crystalline Solids* le 6 octobre 2006.
- Marshall, J.M., Street, R.A. et Thompson, M.J., *Phil. Mag.* **54**, 51 (1986).
- Meyer, W. et Neldel, H., *Z. Tech. Phys.* **12**, 588 (1937).
- Mott, N.F., *Philos. Mag.* **19**, 835 (1969).
- Nebel, C.E. et Bauer, G.H., *Philos. Mag. B* **59**, 463 (1989).
- Nebel, C.E., Street, R.A., Johnson, N.M. et Kocka, J., *Phys. Rev. B* **46**, 6789 (1992).
- Noolandi, J., *Phys. Rev. B* **16**, 4466 (1977).
- Orenstein, J. et Kastner, M., *Phys. Rev. Lett.* **46**, 1421 (1981).
- Schiff, E.A., Devlen, R.I., Grahn, H.T., Tauc, J. et Guha, S., *Appl. Phys. Lett.* **54**, 19 (1989).
- Schmidlin, F.W., *Phys. Rev. B* **16**, 2362 (1977).
- Schmidlin, F.W., *Phil. Mag.* **41**, 535 (1980).

Shank, C.V., Fork, R.L., Greene, B.I., Reinhart, F.K. et Logan, R.A., Appl. Phys. Lett. **38**, 2 (1981).

Spear, W.E., J. Non-Cryst. Solids **1**, 197 (1968).

Spear, W.E., J. Non-Cryst. Solids **1**, 197 (1969).

Spear, W.E., dans: Advances in Disordered Semiconductors, Vol 1, Éditeur: Fritzsche, H. (World Scientific, Singapore, 1989) p.271.

Street, R.A., Hydrogenated amorphous silicon (Cambridge University press, 1991).

Tefft, W.E., J. Appl. Phys. **38**, 5265 (1967).

Tiedje, T., Cebalca, J.M., Morel, D.L. et Abeles, B., Phys. Rev. Lett. **46**, 1425 (1981).

Tiedje, T., dans: Semiconductors and Semimetals, Éditeur: Pankove, J.I. (Academic Press, New York, 1984), Vol. 21C, p.207-237.

Winer, K., Hirabayashi, I. et Ley, L., Phys. Rev. Lett. **60**, 2697 (1988).

Yelon, A., Movaghar, B. et Crandall, R.S., Rep. Prog. Phys. **69**, 1145 (2006).

Zanio, K.R., Akutagawa, W.M et Kikuchi, R., J. Appl. Phys. **39**, 2818 (1967).

Annexe I

Intégration de $K_r(E, \Delta x)$ dans le modèle DJM

Nous souhaitons intégrer la relation suivante,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp \left(-n \sqrt{\left(\frac{2\Delta x}{a} \right)^2 + \left(\frac{\Delta E}{k_B T} \right)^2} \right) d(\Delta x) \quad (\text{I.1})$$

où $\Delta E = E - e\Delta x F$ et n est une constante qui est égale à soit 1 ou 2 pour nos calculs.

Nous pouvons réécrire cette expression de la manière suivante:

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -n \sqrt{\underbrace{\left[\left(\frac{2}{a} \right)^2 + \left(\frac{eF}{k_B T} \right)^2 \right]}_{\alpha} \Delta x^2 + \underbrace{\left[-\frac{2eFE}{(k_B T)^2} \right]}_{\beta} \Delta x + \underbrace{\left(\frac{E}{k_B T} \right)^2}_{\gamma}} \right\} d(\Delta x) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left(-n \sqrt{\alpha \Delta x^2 + \beta \Delta x + \gamma} \right) d(\Delta x) \end{aligned}$$

[Posons : $\delta \equiv \sqrt{\alpha}$, $\theta \equiv \beta/(2\sqrt{\alpha})$ et $\varphi \equiv \gamma - \beta^2/(4\alpha)$.]

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left(-n \sqrt{(\delta \Delta x + \theta)^2 + \varphi} \right) d(\Delta x)$$

[Changement de variable #1 : $u = \delta \Delta x + \theta \Rightarrow du = \delta d(\Delta x)$.]

$$= \frac{1}{\delta} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left(-n \sqrt{u^2 + \varphi} \right) du$$

$$= \frac{2}{\delta} \int_0^{\infty} \exp\left(-n\sqrt{u^2 + \varphi}\right) du$$

[Changement de variable #2 : $g = n\sqrt{u^2 + \varphi} \Rightarrow dg = \frac{nudu}{\sqrt{u^2 + \varphi}}$.]

$$= \frac{2}{n\delta} \int_{n\sqrt{\varphi}}^{\infty} \frac{g \exp(-g)}{\sqrt{g^2 - n^2\varphi}} dg \quad (\text{I.2})$$

$$= \frac{2}{\delta} \cdot \sqrt{\varphi} \cdot K_1(n\sqrt{\varphi}) \quad (\text{I.3})$$

où K_1 est la fonction de Bessel modifiée de second ordre (voir (Gradstheyn, 1980) pour la résolution de l'intégrale dans l'éq.(I.2)) et

$$\begin{cases} \sqrt{\varphi} = \frac{E}{\sqrt{(k_B T)^2 + (eaF/2)^2}} \\ \delta = \sqrt{\left(\frac{2}{a}\right)^2 + \left(\frac{eF}{k_B T}\right)^2} \end{cases}$$

En développant l'éq.(I.3), nous trouvons,

$$\begin{aligned} &= \frac{2}{\sqrt{\left(\frac{2}{a}\right)^2 + \left(\frac{eF}{k_B T}\right)^2}} \cdot \frac{E}{\sqrt{(k_B T)^2 + \left(\frac{eaF}{2}\right)^2}} \cdot K_1\left(\frac{nE}{\sqrt{(k_B T)^2 + \left(\frac{eaF}{2}\right)^2}}\right) \\ &= \frac{ak_B T E}{(k_B T)^2 + \left(\frac{eaF}{2}\right)^2} \cdot K_1\left(\frac{nE}{\sqrt{(k_B T)^2 + \left(\frac{eaF}{2}\right)^2}}\right). \end{aligned} \quad (\text{I.4})$$

Annexe II

Calcul de $\langle \Delta x \rangle$ pour le modèle DJM

Nous souhaitons calculer $\langle \Delta x \rangle$ qui est défini comme,

$$\begin{aligned}
 \langle \Delta x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \Delta x P(E, \Delta x) d(\Delta x) \\
 &= \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \Delta x \exp \left(-\sqrt{\left(\frac{2\Delta x}{a}\right)^2 + \left(\frac{\Delta E}{k_B T}\right)^2} \right) d(\Delta x)}{\int_{-\infty}^{\infty} \exp \left(-\sqrt{\left(\frac{2\Delta x}{a}\right)^2 + \left(\frac{\Delta E}{k_B T}\right)^2} \right) d(\Delta x)} \quad (\text{II.1})
 \end{aligned}$$

où l'expression de $P(E, \Delta x)$ est pour le modèle DJM. En utilisant le résultat donné à l'annexe I, nous définissons,

$$\begin{aligned}
 X &= \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left(-\sqrt{\left(\frac{2\Delta x}{a}\right)^2 + \left(\frac{\Delta E}{k_B T}\right)^2} \right) d(\Delta x) \\
 &= \frac{ak_B T E}{(k_B T)^2 + \left(\frac{eaF}{2}\right)^2} \cdot K_1 \left(\frac{E}{\sqrt{(k_B T)^2 + \left(\frac{eaF}{2}\right)^2}} \right) \quad (\text{II.2})
 \end{aligned}$$

Nous pouvons réécrire l'éq.(II.1) de la manière suivante :

$$\langle \Delta x \rangle = \frac{1}{X} \int_{-\infty}^{\infty} \Delta x \exp \left(-\sqrt{(\delta \Delta x + \theta)^2 + \varphi} \right) d(\Delta x) \quad (\text{II.3})$$

où $\delta^2 \equiv \left(\frac{2}{a}\right)^2 + \left(\frac{eF}{k_B T}\right)^2$, $\theta \equiv \frac{-eaFE}{2k_B T} \frac{1}{\sqrt{(k_B T)^2 + (eaF/2)^2}}$ et
 $\varphi \equiv \frac{E^2}{(k_B T)^2 + (eaF/2)^2}$. En posant, $u = \delta\Delta x + \theta$, $du = \delta d(\Delta x)$, nous obtenons,

$$\begin{aligned} \langle \Delta x \rangle &= \frac{1}{X} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{u - \theta}{\delta}\right) \exp(-\sqrt{u^2 + \varphi}) \frac{du}{\delta} \\ &= \frac{1}{X\delta^2} \left[\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} u \exp(-\sqrt{u^2 + \varphi}) du}_{= 0 \text{ (impaire)}} - \theta \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\sqrt{u^2 + \varphi}) du \right] \\ &= \frac{-\theta}{X\delta^2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\sqrt{u^2 + \varphi}) du \end{aligned} \quad (\text{II.4})$$

$$= \frac{-\theta}{X\delta^2} [2\sqrt{\varphi} K_1(\sqrt{\varphi})]. \quad (\text{II.5})$$

où K_1 est la fonction de Bessel modifiée de second ordre. L'avant-dernière équation (II.4) a été résolue en utilisant le résultat obtenu (éq.(I.3)) à l'annexe I. En remplaçant l'éq.(II.2) pour X dans l'éq.(II.5), nous trouvons

$$\begin{aligned} \langle \Delta x \rangle &= \frac{-2[(k_B T)^2 + (eaF/2)^2]}{ak_B T E K_1(\sqrt{\varphi})} \cdot \frac{-eaFE}{2k_B T \sqrt{(k_B T)^2 + (eaF/2)^2}} \\ &\quad \frac{1}{\left(\frac{2}{a}\right)^2 + \left(\frac{eF}{k_B T}\right)^2} \\ &\quad \frac{E}{\sqrt{(k_B T)^2 + (eaF/2)^2}} \cdot K_1(\sqrt{\varphi}) \\ &\quad \frac{1}{\left(\frac{2}{a}\right)^2 + \left(\frac{eF}{k_B T}\right)^2} \\ &= \frac{a^2 eFE}{4[(k_B T)^2 + (eaF/2)^2]}. \end{aligned} \quad (\text{II.6})$$

Nous trouvons que la fonction $P(E, \Delta x)$ définie pour le modèle DJM possède la propriété suivante:

$$\langle \Delta x \rangle = \Delta x_{opt}. \quad (\text{II.7})$$

Annexe III

Calcul de l'erreur introduite en utilisant l'expression approximative de $k_r(E, \Delta x)$

Nous souhaitons calculer l'erreur qui est introduite en utilisant le taux de dépiégeage par unité de distance donné par l'éq.(2.12) au lieu d'employer l'éq.(2.23). Définissons les quantités suivantes (voir fig. III.1):

$$\begin{aligned} A_{approx} &= \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\sqrt{(2\Delta x/a)^2 + (\Delta E/k_B T)^2}\right) d(\Delta x) \\ &= \frac{aTE}{k_B T_{eff}} K_1\left(\frac{E}{k_B T_{eff}}\right) \end{aligned} \quad (\text{III.1})$$

$$\begin{aligned} B_{exacte} &= \int_{\Delta x=E/eF}^{\infty} \exp(-2\Delta x/a) d(\Delta x) \\ &= (a/2) \exp\left(\frac{-2E}{eaF}\right) \end{aligned} \quad (\text{III.2})$$

$$B_{approx} = \int_{\Delta x=E/eF}^{\infty} \exp\left(-\sqrt{(2\Delta x/a)^2 + (\Delta E/k_B T)^2}\right) d(\Delta x) \quad (\text{III.3})$$

où B_{approx} ne possède pas de solution analytique. L'intégrale exacte s'écrit comme $A_{approx} - B_{approx} + B_{exacte}$. L'erreur relative introduite en utilisant l'expression approximative, est

$$E_{rr} = \frac{|A_{approx} - (A_{approx} - B_{approx} + B_{exacte})|}{(A_{approx} - B_{approx} + B_{exacte})} = \frac{B_{exacte} - B_{approx}}{A_{approx} + B_{exacte} - B_{approx}}. \quad (\text{III.4})$$

Nous avons exploité le fait que $B_{exacte} > B_{approx}$. Nous calculons B_{approx} avec une méthode numérique (Simpson). La borne supérieure de l'intégration numérique est $10^3 E/eF$, nous avons divisé l'intervalle $[E/eF, 10^3 E/eF]$ en 100 001 points et nous avons pris $a = 12 \text{ \AA}$. Nous avons trouvé que varier la borne supérieure d'intégration n'influençait pas les résultats, confirmant que notre choix de limite est suffisamment grand.

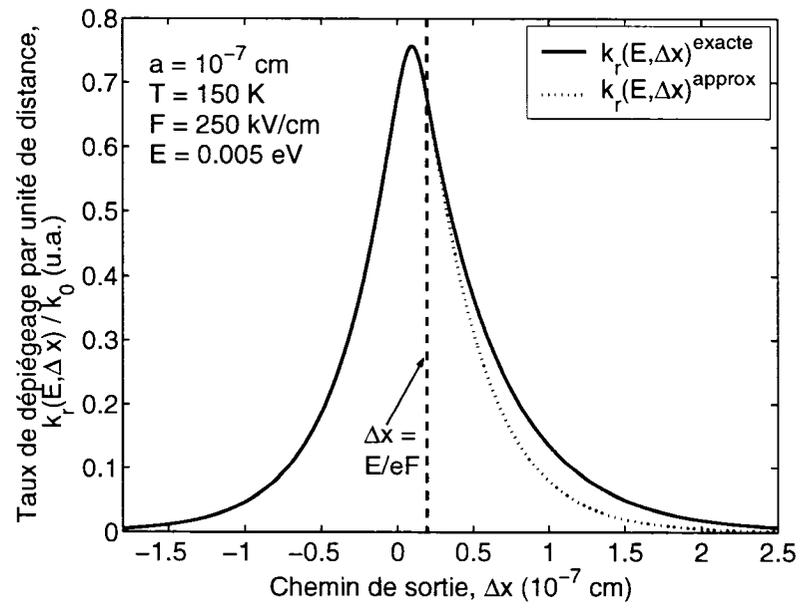


Figure III.1 Comparaison entre $k_r^{exacte}(E, \Delta x)$ et $k_r^{approx}(E, \Delta x)$ versus Δx . Nous indiquons la valeur de $\Delta x = E/eF$.

Annexe IV

Optimisation du taux de dépiégeage $K_r(E, \Delta x)$ dans le modèle MN-DJM

Nous souhaitons optimiser l'éq.(3.7), ce qui revient à maximiser,

$$Y(\Delta x) = \frac{\Delta E}{E_{MN}} - \sqrt{\left(\frac{2\Delta x}{a}\right)^2 + \left(\frac{\Delta E}{k_B T}\right)^2},$$

où $\Delta E = E - e\Delta x F$. Donc, nous voulons déterminer la valeur de Δx qui fait que $dY/d(\Delta x) = 0$. Nous trouvons,

$$\frac{eF}{E_{MN}} + \frac{(2/a)^2 \Delta x - \Delta E e F / (k_B T)^2}{\sqrt{(2\Delta x/a)^2 + (\Delta E/k_B T)^2}} = 0. \quad (\text{IV.1})$$

Nous pouvons réécrire cette équation comme,

$$\sqrt{(2\Delta x/a)^2 + (\Delta E/k_B T)^2} = \frac{-E_{MN}}{eF} \left[(2/a)^2 \Delta x - \Delta E e F / (k_B T)^2 \right]. \quad (\text{IV.2})$$

Ceci signifie qu'en utilisant l'éq.(IV.2), l'exposant optimisé peut s'écrire comme (en manipulant)

$$\begin{aligned} & \frac{\Delta E}{E_{MN}} + \frac{E_{MN}}{eF} \left[(2/a)^2 \Delta x - \Delta E e F / (k_B T)^2 \right] \\ &= E_{MN} \left\{ \left[1/E_{MN}^2 - 1/(k_B T)^2 \right] E + eF \left[1/(k_B T)^2 - 1/E_{MN}^2 + (2/eaF)^2 \right] \Delta x \right\}. \end{aligned} \quad (\text{IV.3})$$

Il faut résoudre l'éq.(IV.1) pour Δx .

$$\frac{eF}{E_{MN}} + \frac{(2/a)^2 \Delta x - eFE/(k_B T)^2 + (eF/k_B T)^2 \Delta x}{\sqrt{(2\Delta x/a)^2 + (k_B T)^{-2} [E^2 - 2eFE\Delta x + (eF)^2 \Delta x^2]}} = 0,$$

$$\begin{aligned} \frac{eF}{E_{MN}} \left\{ \left[(2/a)^2 + (eF/k_B T)^2 \right] \Delta x^2 - \frac{2eFE\Delta x}{(k_B T)^2} + (E/k_B T)^2 \right\}^{1/2} \\ = \frac{eFE}{(k_B T)^2} - \left[(2/a)^2 + (eF/k_B T)^2 \right] \Delta x. \end{aligned}$$

Posons $U = (2/a)^2 + (eF/k_B T)^2$.

$$\begin{aligned} \frac{eF}{E_{MN}} \left[U\Delta x^2 - \frac{2eFE\Delta x}{k_B T} + (E/k_B T)^2 \right]^{1/2} = \frac{eFE}{(k_B T)^2} - U\Delta x, \\ U \left[(eF/E_{MN})^2 - U \right] \Delta x^2 + \frac{2eFE}{(k_B T)^2} \left[U - (eF/E_{MN})^2 \right] \\ + (eFE/k_B T)^2 \left[\frac{1}{E_{MN}^2} - \frac{1}{(k_B T)^2} \right] = 0. \end{aligned}$$

Posons,

$$\begin{cases} V = 1/E_{MN}^2 - 1/(k_B T)^2, \\ W = (eF/E_{MN})^2 - U. \end{cases} \quad (\text{IV.4})$$

Ceci donne,

$$\begin{aligned} UW\Delta x^2 - \frac{2eFEW}{(k_B T)^2} \Delta x + \frac{(eFE)^2 V}{(k_B T)^2} = 0, \\ \Delta x^2 - \frac{2eFE}{U(k_B T)^2} \Delta x + \frac{(eFE)^2 V}{UW(k_B T)^2} = 0. \end{aligned} \quad (\text{IV.5})$$

Avec l'éq.(IV.5), nous trouvons

$$\Delta x = \frac{eFE}{U(k_B T)^2} \left\{ 1 \pm \left[1 - \frac{UV(k_B T)^2}{W} \right]^{1/2} \right\}. \quad (\text{IV.6})$$

Puisque,

$$\begin{cases} U(k_B T)^2 = (2k_B T/a)^2 + (eF)^2, \\ W = (eF)^2 V - (2/a)^2. \end{cases} \quad (\text{IV.7})$$

Alors,

$$1 - \frac{UV(k_B T)^2}{W} = \left(\frac{2k_B T}{aE_{MN}} \right)^2 / \left[(2/a)^2 - (eF)^2 V \right],$$

$$1 \pm \left[1 - \frac{UV(k_B T)^2}{W} \right]^{1/2} = \frac{\sqrt{(2/a)^2 - (eF)^2 V \pm 2k_B T / (aE_{MN})}}{\sqrt{(2/a)^2 - (eF)^2 V}},$$

$$\Delta x = \frac{eFE}{U(k_B T)^2} \left[\frac{\sqrt{(2/a)^2 - (eF)^2 V \pm 2k_B T / (aE_{MN})}}{\sqrt{(2/a)^2 - (eF)^2 V}} \right]. \quad (\text{IV.8})$$

Utilisons l'éq.(IV.8) pour réécrire l'éq.(IV.3),

$$E_{MN} \left[VE - \frac{W\Delta x}{eF} \right] =$$

$$E_{MN} E \left[V - \frac{W}{U(k_B T)^2} \left(\frac{\sqrt{(2/a)^2 - (eF)^2 V \pm 2k_B T / (aE_{MN})}}{\sqrt{(2/a)^2 - (eF)^2 V}} \right) \right],$$

$$= E \left[\frac{(k_B T)^2 / E_{MN} \pm k_B T \sqrt{1 - (eaF/2)^2 V}}{(k_B T)^2 + (eaF/2)^2} \right],$$

$$= E \frac{(k_B T)^2 / E_{MN}^2 \pm \sqrt{(k_B T)^2 + (eaF/2)^2 (1 - T^2 / T_{MN}^2)}}{(k_B T)^2 + (eaF/2)^2}.$$

Nous constatons que la solution physique impose le signe négatif. Finalement, nous trouvons,

$$K_r(E, \Delta x) |_{\Delta x_{opt}} = \nu_{00} \exp \left(\frac{E/E_{MN}}{1 + \left(\frac{eaF}{2k_B T} \right)^2} \right)$$

$$\cdot \exp \left(\frac{-E \sqrt{(k_B T)^2 + (eaF/2)^2 (1 - T^2 / T_{MN}^2)}}{(k_B T)^2 + (eaF/2)^2} \right). \quad (\text{IV.9})$$