



REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE  
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA  
RECHERCHE SCIENTIFIQUE  
CENTRE UNIVERSITAIRE DE TISSEMSILT



# MEMOIRE DE MASTER

*Présenté par :*

➤ **Zanou Bakhta**

*Filière : PHYSIQUE*

*Spécialité : Nano-Physique*

**Intitulé**

**Etude des propriétés optoélectroniques du Si-nanocristallin  
hydrogéné**

*Devant le jury composé de :*

<b>Président</b>	M <sup>r</sup> . MOKHTARI MOHAMED	MC(B). Centre Universitaire de Tissemsilt
<b>Directeur de thèse</b>	M <sup>me</sup> . BESAHAOUI FATIHA	MC(A) Centre Universitaire de Tissemsilt
<b>Examineur</b>	M <sup>r</sup> . DAHMANE FETHALLAH	MC(B). Centre Universitaire de Tissemsilt

**Année universitaire : 2016/2017**

## REMERCIENT

*En préambule à ce mémoire nous remerciant ALLAH qui nous a aidé et nous a donné la patience et le courage durant ces trois années d'étude. Merci Allah de nous avoir donné la capacité d'écrire et de réfléchir.*

*Nous tenant à remercier sincèrement madame **Fatiha BESAHAOUI**, qui, en tant que directrice de mémoire, elle est toujours montrée à l'écoute et très disponible tout au long de la réalisation de ce mémoire, ainsi pour l'inspiration, l'aide et le temps qu'ils ont bien voulu nous consacrer. Sans elle, ce mémoire n'aurait jamais vu le jour. Nous souhaitant adresser nos remerciements les plus sincères aux personnes qui nous ont apporté leur aide et qui ont contribué à l'élaboration de ce mémoire ainsi qu'à la réussite de cette formidable année universitaire.*

*Nous tenons à remercier vivement monsieur **Mohamed MOKHTARI** enseignant au sein du département des sciences de la Matière (SM) au centre universitaire de Tissemsilt, d'avoir accepté de présider le jury.*

*Nous remercions monsieur **Fethallah, DAHMANE** enseignant au sein du département des sciences de la Matière (SM) au centre universitaire de Tissemsilt, d'avoir contribué au jury de ce mémoire.*

*Ces remerciements vont également au corps professoral et administratif de l'Institut des Sciences et technologies, en particulier, le département des Sciences de la Matière (SM) pour la richesse et la qualité de l'enseignement et qui déploient de grands efforts pour assurer à leurs étudiants une formation actualisée.*

*On n'oublie pas nos parents pour leur contribution, leur soutien et leur patience. En fin nous tiens à remercier tous ceux qui de près ou de loin, ont contribué à la réalisation de ce modeste travail.*

**«Pour réussir, retenez bien ces trois maximes : voir c'est savoir, vouloir c'est pouvoir, oser c'est avoir. »**

**Alfred de Musset**

*Merci* 

## Résumé

L'objectif de ce travail est d'étudier les propriétés optiques et optoélectroniques des semiconducteurs hétérogènes à base de silicium, plus particulièrement, le silicium nanocristallin hydrogéné (nano-Si :H).

Cette étude a été menée en identifiant le spectre d'absorption réelle de ce type de semiconducteurs et en adoptant un modèle théorique qui traite les effets de la diffusion de la lumière qui se produit sur la surface de silicium nanocristallin hydrogéné. Le modèle théorique adopté est basé sur la méthode de Photocourant Constant (CPM). Cette méthode expérimentale permet d'étudier les spectres d'absorption optique des semiconducteurs en termes de photocourant.

Dans ce travail, nous avons mis en au point d'une nouvelle méthode numérique qui permet de séparer la contribution de la lumière diffusée et spéculaires dans les termes du coefficient d'absorption apparente mesuré. Cette méthode numérique développée suivant le langage de programmation « Fortran Power Station » constitue un outil puissant pour déconvoluer les spectres d'absorption optique apparente déduits des mesures de CPM.

La validité de cette méthode a été vérifié en comparant des résultats numériques et expérimentales effectués sur un échantillon de nano-Si :H. Un très bon accord a été obtenu.

Lors de l'application de notre méthode numérique sur une série d'échantillons de nano-Si :H de rugosité surfacique différente, nous avons constaté que le coefficient de diffusion surfacique est proportionnel à la valeur de la rugosité de surface du matériau.

## ملخص

الهدف من هذا العمل هو دراسة الخصائص الضوئية و الكهروضوئية لأشباه النواقل ذات البنية غير المتجانسة للسيليسيوم . و قد حددنا هذه الدراسة على السيليسيوم النانو بلوري الهيدروجيني-nano) Si :H) لما لديه من تطبيقات متعددة و مهمة في مختلف المجالات التكنولوجية خاصة مجال الخلايا الضوئية والمجال الكهروضوئي.

و قد ركزنا على تحديد طيف الامتصاص الضوئي الحقيقي ل nano-Si :H لما له من أهمية كبرى في استخراج مختلف الخواص الفيزيائية لأشباه النواقل .وقد تجسدت هذه الدراسة بإدراج نموذج نظري يسمح بدراسة ظواهر الانتشار الضوئي على السطح الخشن للسيليسيوم النانو بلوري الهيدروجيني و علاقته بالامتصاص الضوئي .

هذا النموذج النظري مبني على المنهج التجريبي المسمى منهج التيار الكهروضوئي الثابت (CPM) الذي يسمح بتحليل الخصائص الكهروضوئية لأشباه النواقل .

وقد قمنا في هذا العمل بتطوير منهج رقمي جديد مبني على لغة البرمجة Fortran power station يسمح باستخراج طيف الامتصاص الضوئي الحقيقي من خلال طيف الامتصاص الضوئي الظاهري للسيليسيوم النانو بلوري الهيدروجيني . هذا المنهج الرقمي يسمح أيضا باستخراج طيف الانتشار الضوئي.

إضافة إلى ذلك قمنا بالتأكد من صحة هذا المنهج الرقمي من خلال مقارنة نتائج نظرية و تجريبية طبقت على عينات من nano-Si :H .استنتجنا توافق كبير بين المنهجين . هذا يدل على مدى نجاعة المنهج الرقمي المجسد في هذا العمل .

## INTRODUCTION GENERALE

### CHAPITRE I : GENERALITES SUR LES SEMICONDUCTEURS A BASE DE SILICIUM

<b>Introduction</b> .....	10
<b>1. Différentes structures de semiconducteurs à base de silicium</b> .....	11
1.1. Silicium monocristallin.....	12
1.2. Silicium amorphe hydrogéné.....	13
1.3. Silicium polymorphe hydrogéné.....	14
1.4. Silicium microcristallin hydrogéné.....	15
1.5. Silicium poly cristallin.....	16
<b>2. Méthodes de croissances des couches minces de nano-Si : H</b> .....	17
2.1. Principe de la méthode (RF- PECVD).....	17
2.2. Les conditions du plasma.....	17
<b>3. Propriétés optiques des couches minces de nano-Si : H</b> .....	18
<b>4. Propriétés électrique des couches minces de nano-Si : H</b> .....	19
<b>Conclusion</b> .....	19

### Chapitre II : MODELE THEORIQUE DE DIFFUSION DE LA LUMIERE DANS LES MILIEUX HETEROGENES

<b>Introduction</b> .....	20
<b>1. Mesures des faibles absorptions</b> .....	20
1.1. Méthode de Photocourant Constant.....	20
<b>2. Phénomènes de diffusion de la lumière</b> .....	23
2.1. Expression du photocourant dans un milieu homogène.....	24
2.2. Expression du photocourant dans un milieu hétérogène.....	25
2.2.1. L'effet de la rugosité de surface sur le photocourant mesuré.....	26
<b>Conclusion</b> .....	30

# Sommaire

---

## **Chapitre III : RESULTATS ET COMPARAISONS**

<b>Introduction</b> .....	31
<b>1. Calcul numérique du coefficient d'absorption réelle</b> .....	31
<b>2. Validité de la méthode numérique</b> .....	32
<b>3. Résultats d'application de la méthode numérique</b> .....	32
3.1. Résultats sur l'échantillon 907051.....	33
3.1.1. Calcul du coefficient d'absorption réel.....	34
3.1.2. Calcul du coefficient de diffusion.....	34
<b>4. Résultats d'application de la méthode numérique</b> .....	35
4.1. Résultats sur l'échantillon 907052.....	35
4.1.1. Calcul du coefficient d'absorption réel.....	36
4.1.2 Calcul du coefficient de diffusion.....	36
<b>Conclusion</b> .....	37
<b>CONCLUSION GENERALE</b> .....	38
<b>REFERENCES</b> .....	39

## INTRODUCTION GENERALE

Récemment, des couches de silicium déposées par voie chimique du silane en phase vapeur assistée par plasma radiofréquence (RF-PECVD) à basse température ( $< 300^{\circ}\text{C}$ ) ont révélé la présence des nanostructures de silicium. Ces couches sont connues sous le nom de silicium nanocristallin hydrogéné (nano-Si : H) ou microcristallin hydrogéné ( $\mu\text{m-Si : H}$ ). Ils sont composés d'une matrice amorphe, dans laquelle sont incorporés des domaines de silicium ordonné de taille nanométrique ou micrométrique. Ces nanomatériaux semiconducteurs possèdent des propriétés électroniques et optoélectroniques très améliorées par rapport au silicium amorphe hydrogéné (a-Si : H). En plus, ils présentent une métastabilité plus faible lors de leurs exposition prolongée à la lumière en comparant avec le a-Si :H. La raison d'un tel comportement est liée à la structure hétérogène de ces matériaux. Cette structure particulière donne lieu à des phénomènes de diffusion de la lumière (Light scattering) dans le volume et/ou sur la surface rugueuse du matériau.

En effet, la diffusion qui se produit dans ces nanomatériaux augmente le chemin optique suivi par les photons diffusés, de telle manière que l'absorption du matériau augmente. L'absorption totale du matériau est égale à la somme des deux absorptions ; celle de la lumière spéculaire (qui n'a pas subi de diffusion) qui donne un coefficient d'absorption réelle ( $\alpha_{\text{réel}}$ ) et celle de la lumière diffusée qui donne un coefficient de diffusion ( $\alpha_{\text{diff}}$ ). Les mesures optiques et électriques de ces matériaux hétérogènes donnent accès à un coefficient d'absorption apparente ( $\alpha_{\text{app}}$ ). Cependant, il est important de distinguer la contribution due à la diffusion ( $\alpha_{\text{diff}}$ ) de celle due au faisceau spéculaire ( $\alpha_{\text{réel}}$ ) qui nous renseignera sur la structure électronique du matériau.

Dans ce mémoire, nous proposons une étude des phénomènes de diffusion de la lumière sur la surface des milieux hétérogènes que nous présentons en trois chapitres.

- Dans le premier chapitre, nous définissons les différentes structures hétérogènes à base de silicium ainsi que leurs différentes propriétés optiques et électriques.
- Le deuxième chapitre est consacré aux études théorique et expérimentale des phénomènes de diffusion de la lumière sur la surface des semiconducteurs hétérogènes. Dans la première partie de ce chapitre, nous donnons une description générale de la Méthode de Photocourant Constant (CPM) utilisée pour la caractérisation optique et électrique des semiconducteurs. La deuxième partie de ce chapitre est consacrée à l'étude du modèle théorique de la diffusion surfacique de la lumière dans les milieux hétérogènes. Nous

donnons les expressions corrigées des termes d'absorption optique ainsi que l'expression du photocourant.

- Dans le troisième chapitre, nous proposons une méthode numérique qui permet de séparer les diverses contributions du coefficient d'absorption déduit directement des mesures expérimentales. Puis, afin de vérifier sa validité, nous comparons notre méthode numérique à d'autres méthodes expérimentales proposées dans la littérature. Dans la dernière partie de ce chapitre, nous appliquons notre méthode numérique à une série d'échantillons de  $\mu\text{-Si:H}$  ayant des hétérogénéités surfaciques ou une certaine rugosité surfacique afin de déduire les spectres du coefficient d'absorption réelle  $\alpha_{\text{réel}}(E)$  et de coefficient de diffusion surfacique  $\alpha_{\text{diff}}(E)$ .

# **CHAPITRE I**

---

---

**GENERALITES SUR LES SEMICONDUCTEURS HETEROGENESA BASE  
DE SILICIUM**

---

---

## Introduction

Le silicium est le matériau semiconducteur de base dans de nombreuses réalisations de la microélectronique, telles que l'élaboration de transistors, diodes et capteurs aussi pour les dispositifs optoélectroniques et photoniques [1]. D'un point de vue physique, il possède par rapport au germanium une stabilité plus performante à plus haute température. Du côté de l'exploitation, il est le deuxième élément le plus abondant de l'écorce terrestre (28 %) sous forme de composés : (silicate, silice) et est non toxique. Cependant, le silicium possède différentes formes selon la nature de l'arrangement et la dimension de ses composants. Ceci affecte de manière notable ses propriétés optoélectronique. Dans ce chapitre, nous allons présenter les différentes structures possibles de silicium à savoir, le silicium monocristallin, amorphe, polymorphe, polycristallin et le micro ou le nanocristallin exploitant de près la densité d'états électroniques dans quelques structures.

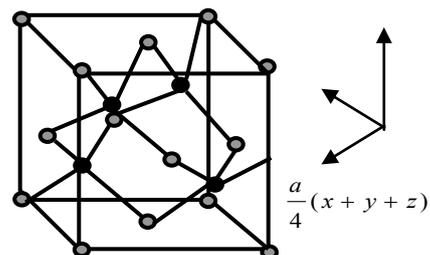
### 1. Différentes structures de semiconducteurs à base de silicium

Comme beaucoup d'autres éléments le silicium peut exister à la température ambiante sous différentes structures dont les deux extrêmes sont respectivement l'état amorphe et l'état cristallin. On peut imaginer des structures intermédiaires entre ces deux états extrêmes. En particulier il peut exister des phases constituées de l'état cristallin et de l'état amorphe.

#### 1.1. Silicium monocristallin

La réalisation de nombreux dispositifs optoélectroniques à base de semiconducteurs commence par la production d'un matériau monocristallin de grande pureté (qui ne contient pas des défauts de structure). La fusion de zone et l'étirage en méthode de czochraski sont les deux méthodes utilisées couramment pour obtenir des lingots de silicium monocristallin (mono-Si) de grande pureté. Cette pureté est liée à la structure uniforme et la périodicité du réseau cristallin du mono-Si. En effet, l'atome de silicium présente une couche électronique externe contenant quatre électrons ( $3s^2 3p^2$ ) et forme des liaisons covalentes d'énergie 2.5eV et hybrides de type  $sp^3$  avec les atomes voisins. Il résulte de cette hybridation une structure cristallographique de type diamant avec un paramètre de maille ( $a$ ) de 0.54 nm (Figure.1).

*Les sites indiqués en noir correspondent à un des deux réseaux cubiques à faces centrés s'interpénétrant l'un par rapport à l'autre. Les liaisons entre les voisins les plus proches ont été tracées dans le schéma. Les quatre voisins les plus*



**Figure .1. Maille cubique conventionnelle de la structure diamant.**

A ce type de liaisons hybrides, ils correspondent des états électroniques couplés entre eux dans un potentiel périodique dans le cristal. Ce qui conduit à des bandes d'énergie permises et interdites pour les porteurs de charges (Figure.2). La bande interdite (le gap) séparant la bande de valence (BV) de la bande de conduction (BC) est égale à 1.12eV à la température ambiante ( $E_g = 1.12eV$ )

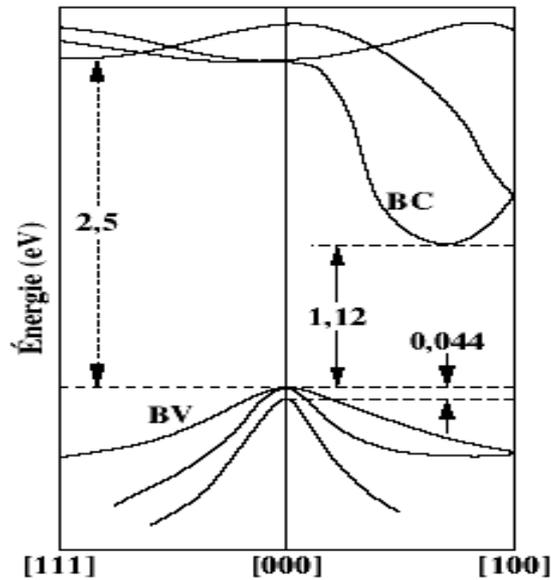


Figure. 2. Diagramme de bandes d'énergie du silicium monocristallin [2].

Le maximum de la bande de valence a lieu au vecteur d'onde  $\vec{k} = \vec{0}$ . Le milieu de la bande de conduction a lieu au vecteur d'onde  $\vec{k} \neq 0$ . Par conséquent, Le silicium monocristallin possède un gap indirect. C'est pour cette raison que le mono-Si est moins adopté en optoélectronique.

## 1.2. Silicium amorphehydrogéné

Le silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) est un matériau très attrayant pour les applications optoélectroniques. Ses propriétés physiques particulières permettent de l'utiliser dans une grande variété d'applications microélectroniques et photovoltaïques. Mais tout d'abord, nous allons décrire les propriétés physiques du silicium amorphe (a-Si) pur. Tout comme le silicium cristallin, le silicium amorphe est organisé en réseau tétraédrique et chaque atome est lié aux quatre atomes voisins par des liaisons covalentes. Cependant, à la différence du réseau cristallin (Figure.3.a) qui maintient l'ordre atomique à grande distance, dans le réseau de silicium amorphe pur, seules la coordination tétraédrique ainsi que de nombreux défauts de structure (l'apparition des liaisons libres ou pendantes : Dangling bond) existent (Figure.3.b).

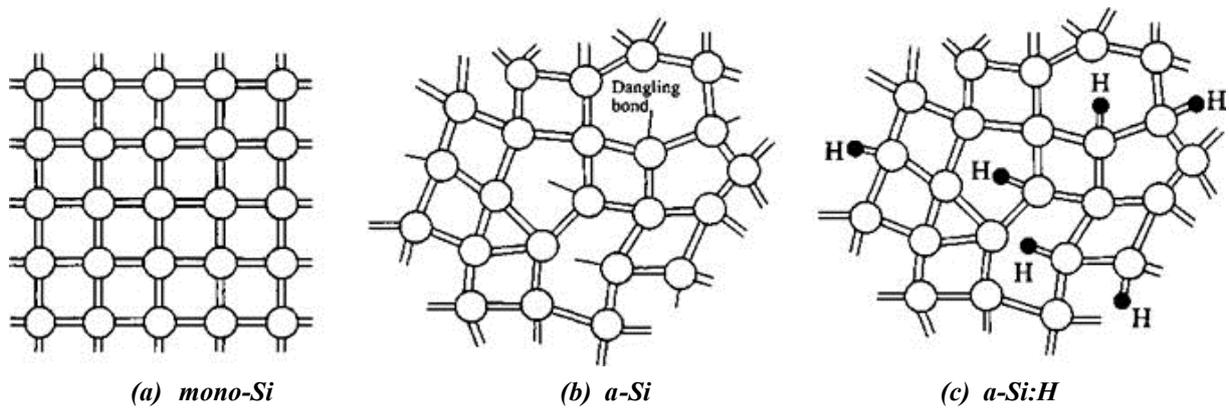


Figure .3.(a) Réseau ordonné de Silicium monocristallin. (b) Réseau désordonné de Silicium amorphe. (c) Passivation des liaisons pendantes (Dangling bond) par des atomes d'hydrogène (H) dans le réseau désordonné de Silicium amorphe hydrogéné.

Ces défauts se traduisent par l'apparition d'un nombre élevé d'états localisés dans la bande interdite du matériau (états profonds) (Figure.4) [3]. Plusieurs chercheurs ont examiné les effets du désordre sur les propriétés électroniques des semiconducteurs amorphes. Les premiers pionniers dans cette discipline furent Philip.W.Anderson, Francis Mott et Edward Devis qui ont montré que la distribution dans les angles et dans les distances, ainsi que dans les liaisons pendantes, introduit un pseudo bande interdite. Les extrémités de la bande interdite sont remplacées par des queues élargies des états localisés s'étendant dans la bande interdite. Ces queues de bande des états localisés ont été attribués au désordre [4]. Les liaisons pendantes créent des états localisés profonds de défaut dans le gap.

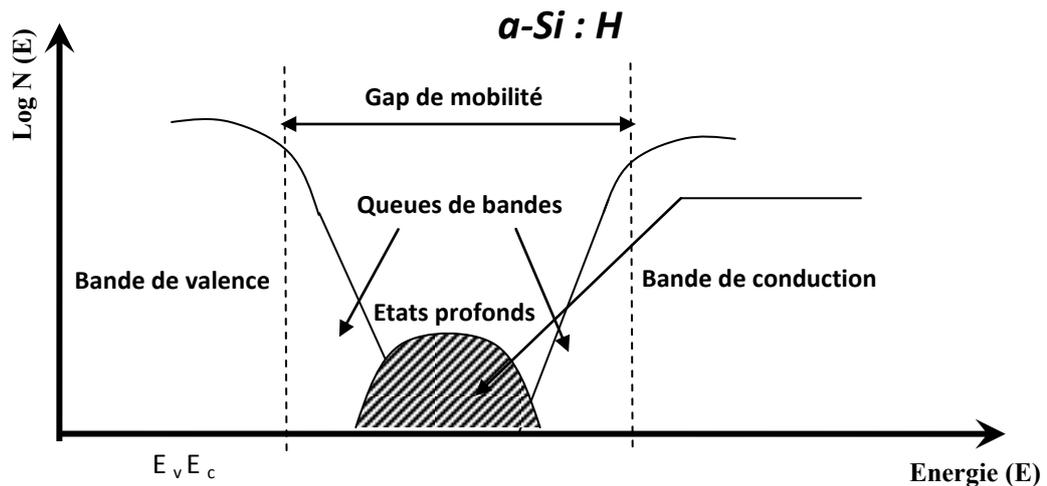


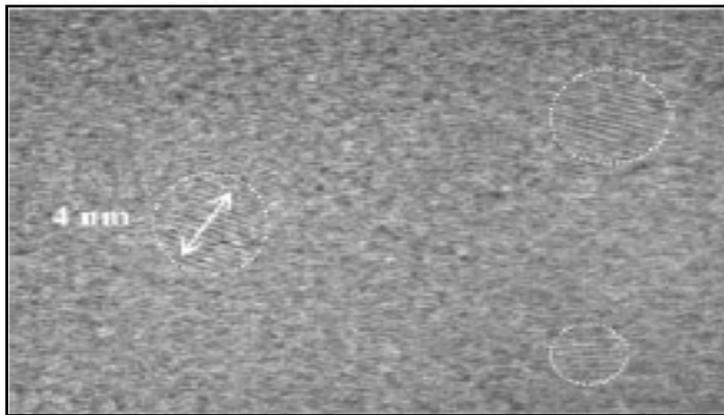
Figure.4. Schéma simplifié de la structure de bandes d'énergie des semiconducteurs amorphes selon le modèle de Davis et Mott [5]

En raison de la présence des liaisons pendantes dans le silicium amorphe, sa densité d'états profonds est très élevée (de l'ordre de  $10^{19}$ -  $10^{20}$   $\text{cm}^{-3}$ ) [6]. Ce qui rend ce matériau moins

sollicité dans les applications optoélectroniques. Cependant, ces liaisons pendantes peuvent être passivées par l'hydrogène atomique (et aussi par le chlore ou le fluor), par un processus de dopage, ce qui permet de réduire la densité de défauts jusqu'à  $10^{15}$ - $10^{16}$   $\text{cm}^{-3}$  et d'améliorer ses propriétés optoélectroniques. Par conséquent, ce matériau est nommé "Silicium amorphe hydrogéné : (a-Si: H)". Notant que l'absorption optique de a-Si:H est très élevée dans le visible (1.7 - 3.2 eV), En plus, ce matériau présente un gap direct. Ces différentes propriétés ont lui permet d'être le matériau le plus demandé dans les applications photovoltaïques

### 1.3. Silicium polymorphe hydrogéné

Le silicium polymorphe hydrogéné (pm-Si:H) est défini comme un semiconducteur de structure hétérogène. En effet, il possède une structure intermédiaire entre le silicium amorphe et le silicium microcristallin ( $\mu$ -Si:H). Une étude de microscopie à haute résolution (HRM) montre que ce matériau est essentiellement constitué de nanocristallites sphériques de silicium cristallin ou ordonné dont la taille est seulement de 2 à 4 nm de diamètre incluses dans une matrice de silicium amorphe relaxée [7] (Figure.5).



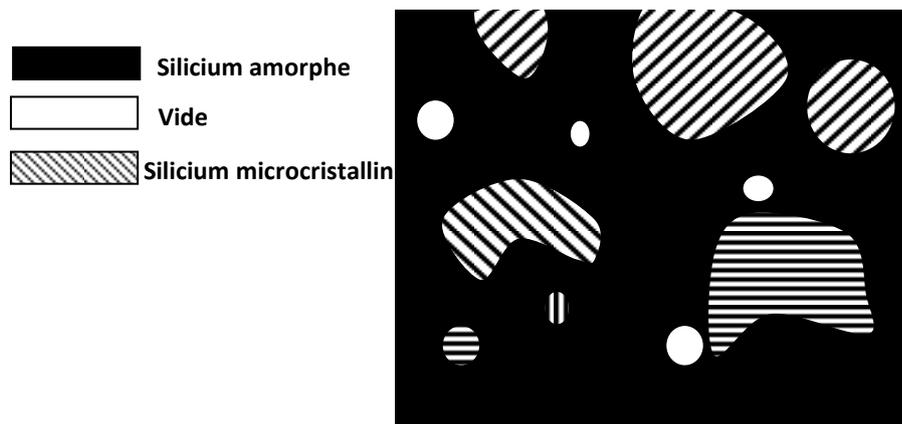
*Figure.5. Image de Microscopie électronique par transmission à haute résolution (HRTEM) réalisée par le département de Physique des Matériaux de l'université Lyon I d'un échantillon de silicium polymorphe d'épaisseur  $d_f = 10$  nm, déposé au LPICM de l'Ecole Polytechnique [8].*

Cette structure particulière sera ainsi responsable des nouvelles propriétés physiques obtenues. Le pm-Si: H présente des propriétés de transport électroniques assez améliorées (densité d'états profonds de 10 à 100 fois plus faible que le a-Si: H) ainsi un produit mobilité-temps de vie des porteurs de charge (électrons et trous)  $\eta\tau$  aussi élevé que  $2 \cdot 10^{-4} \text{cm}^2 \text{V}^{-1}$ ) [10]. Ce nouveau matériau a pu être élaboré par décomposition en phase vapeur assistée par plasma radiofréquence (RF-PECVD) en diluant le silane dans l'hydrogène ou dans l'hélium. Le silicium polymorphe a été déposé dans des conditions similaires à celles de a-Si: H

standard<sup>1</sup> dans un régime de plasma proche de la formation des poudres [9]. Ceci lui donne des propriétés électroniques très prometteuses, notamment pour les photopiles où le rendement énergétique serait plus stable est supérieure à celui du a-Si : H [10].

#### 1.4. Silicium microcristallin hydrogéné

Le silicium microcristallin hydrogéné ( $\mu\text{c-Si} : \text{H}$ ) est un semiconducteur de structure hétérogène et d'épaisseur non homogène [11] constitué de microcristallites de silicium cristallin (c-Si) ayant la taille de quelques dizaines à quelques centaines de nanomètres et d'une matrice silicium amorphe hydrogéné (a-Si : H). Notant que ce matériau contient une proportion plus au moins importante de vides. La taille, la fraction volumique des nanocristallites présentes ainsi que leur orientation cristallographique et le contenu d'hydrogène, varient selon les conditions de dépôt [12]. Un schéma intuitif du  $\mu\text{c-Si} : \text{H}$  est donnée sur la figure.6.



*Figure. 6. Schéma simplifié de la topologie de  $\mu\text{c-Si} : \text{H}$  dont des cristallites de c-Si de différentes orientations cristallographiques sont présentes dans la phase amorphe.*

#### 1.5. Silicium polycristallin

Le silicium polycristallin (poly-Si) est constitué de grains monocristallins séparés entre eux par des zones désordonnées et riches en défauts cristallins, que l'on assimile à du silicium et que l'on nomme joint de grains (Figure.7). Chacun de ces deux composants grains et joints de grain possède des caractéristiques propres que nous rappelons brièvement :

- Le grain peut être défini par sa taille et par sa qualité cristalline. En effet, parler de grain monocristallin constitue un abus de langage, car le procédé de l'obtention du silicium par CVD ne permet pas de déposer du silicium de grande qualité cristalline, c'est à dire

<sup>1</sup> Les couches de a-Si : H standard obtenues généralement par décomposition de silane ( $\text{SiH}_4$ ) sous décharge lumineuse se distinguent par une densité de défauts comprise entre  $10^{15}$  et  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$  et un contenu en hydrogène de 8 à 10 %.

exempt de défauts [13]. Ces défauts peuvent être des dislocations et des macles. Les dislocations induisent l'apparition des liaisons pendantes qui sont électriquement actives. Quant aux macles, si elles se terminent à la surface du grain, elles n'induisent pas de défauts électriquement actifs dans le grain mais peuvent se diviser en plusieurs cristallites. Par contre si elles se finissent dans le grain, elles provoquent l'apparition de dislocations et donc des liaisons pendantes [13]. La densité de ces défauts va donc déterminer la qualité du grain. En ce qui concerne les cristallites, ce sont leurs tailles mais surtout leurs orientations cristallographiques qui les caractérisent suivant que l'on observe ou non une orientation cristallographie prépondérante, le poly-Si sera texturé ou pas [13].

- Les caractéristiques essentielles du joint de grain sont ses dimensions c'est-à-dire son épaisseur et également sa densité de défauts.

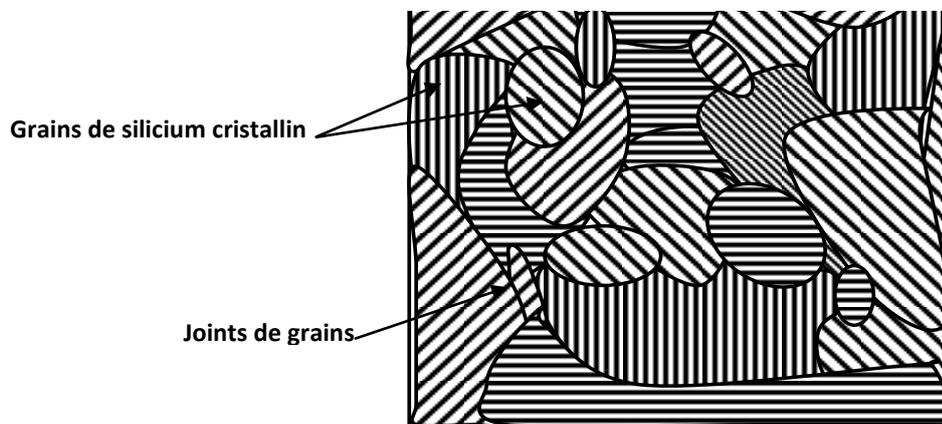


Figure. 7. Schéma simplifié de la structure desilicium polycristallin (poly-Si) constitué d'un ensemble d'agrégats de grains de silicium cristallin (c-Si) de différentes orientations cristallographiques séparés par des joints de grains.

La figure.8 résume les différentes structures des matériaux à base de silicium dont la taille des nanocristallites contrôle le type du matériau obtenu.

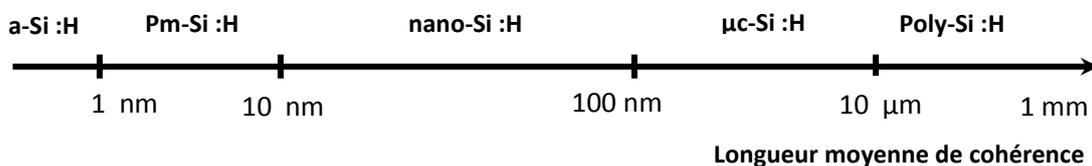


Figure. 8. Classification des matériaux à base de silicium selon la taille des nanocristallites.

## 2. Méthodes de croissances des couches minces de nano-Si :H

Actuellement, un éventail de techniques peut être utilisé pour le dépôt de silicium amorphe en couche mince. La plus ancienne est sans doute l'évaporation sous vide du matériau que l'on veut obtenir, mais beaucoup d'autres méthodes sont appliquées comme :

- La pulvérisation cathodique d'une cible de silicium monocristallin.

- La dissociation d'un hydruure par filament chaud (1500 à 1900C°).
- La décomposition thermique en phase vapeur (CVD) ainsi que plusieurs autres variantes :
  - La décomposition photochimique (Photo- CVD).
  - La CVD à basse pression (LPCVD).
  - La CVD homogène (HOMOCVD).
  - La CVD assistée par plasma (PECVD) avec encore quelques variantes selon :
    - ❖ La fréquence d'excitation du plasma (la résonance cyclotronique, électronique et la microonde CVD).
    - ❖ La CVD assistée par plasma radiofréquence (RF- PECVD).

Cette dernière est la technique la plus répandue parmi toutes celles utilisées pour le dépôt de a- Si : H et le  $\mu$ c-Si : H et leurs alliages et aussi pour le pm- Si : H. Les étapes de cette méthode seront décrites en détail dans le paragraphe suivant.

### 2.1. Principe de la méthode(RF- PECVD)

Le principe général de cette technique consiste à utiliser un plasma pour dissocier des molécules de gaz (silane ( $\text{SiH}_4$ ), hydrogène ( $\text{H}_2$ ) méthane ( $\text{CH}_4$ ) germane ( $\text{GeH}_4$ ),...etc.) qui une fois dissocié par les collisions inélastiques avec des électrons, il constitue un mélange d'espèces réactives (ions, radicaux, électrons, photons)[14]. Aux cours de leur transport vers le substrat, ces espèces réactives peuvent réagir entre elles au sein du plasma. Notant que, le silane ( $\text{SiH}_4$ ) c'est le gaz le plus couramment utilisé à cause de sa stabilité et de sa facilité d'approvisionnement. Ces espèces réactives interagissent une seconde fois à la surface du substrat où elles se condensent pour former une couche mince. La structure de cette couche sera amorphe polymorphe ou microcristallin selon les différents paramètres d'élaboration utilisées qui ont une influence sur la chimie du plasma et sur les mécanismes réactionnels à la surface ainsi sur les réactions dans le volume de la couche croissante [14].

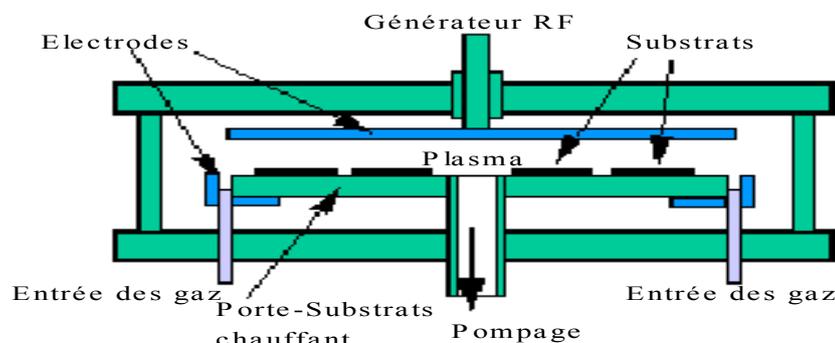


Figure .9. Schéma simplifié d'un réacteur RF- PECVD.

#### 2.1.1. Les conditions du plasma

Les couches de silicium amorphe hydrogéné peuvent être obtenus dans une décharge de silane ( $\text{SiH}_4$ ) pur, à une pression de 40-50 m torr, soit 10 sccm (centimètre cube par minute dans les conditions standard 273K et 101 Pa) [15]. D'autres conditions de plasma sont utilisées en particulier lors de l'étude de leur influence sur les mécanismes de croissance des couches.

Matériau	Flux ( $\text{SiH}_4$ ) (sccm)	Flux ( $\text{H}_2$ ) (sccm)	Pression totale du gaz (m torr)	Puissance RF (Watts)
a-Si : H	10	0	45	6
$\mu\text{c-Si : H}$	3	140	450 -900	20
pm- Si : H	3	140	1000- 2000	20

*Tableau.1. Conditions de dépôt des matériaux résultants à une température de substrat de 250°C [16].*

Plus précisément, les couches de pm-Si : H et  $\mu\text{c-Si : H}$  peuvent être obtenus par dilution de silane dans l'hydrogène, dans un régime proche de la formation des poudres. Ainsi pour des basses pressions (autour de 450-900 m torr environs), les conditions de dépôt favorisent la formation de  $\mu\text{c-Si : H}$ . Le pm- Si :H peut être élaboré à des pressions situées entre 1000-2000 m torr pour des échantillons déposés à des températures de substrat de 150 et 250°C [17]. En effet, les nanostructures incorporées dans la matrice de silicium amorphe ont été observées dans ces conditions [18].

### 3. Propriétés optiques des couches minces de nano-Si :H

Le coefficient d'absorption optique  $\alpha$  (E) est un paramètre optique important qui caractérise les semiconducteurs. En effet, lors du calcul de ce paramètre on peut déterminer d'autres propriétés physiques telles le gap, la densité d'états électronique (DOS). La figure.10 compare le coefficient d'absorption optique  $\alpha$  (E) mesuré pour le  $\mu\text{c-Si :H}$ , a-Si : H et le c-Si [19].

Ces mesures ont été évaluées à partir de la spectroscopie PDS (PhotoThermal Deflection Spectroscopy) [19]. Dans la gamme des faibles absorptions (0.7-1.1 eV), le  $\mu\text{c-Si :H}$  a un coefficient d'absorption optique plus élevé que celui de a-Si :H. Cette propriété est liée à la structure hétérogène de ce matériau [20]. Dans la gamme des fortes absorptions optiques (au-dessus de 1.4 eV), le a-Si :H possède un coefficient d'absorption optique plus approprié par rapport à celui de c-Si.

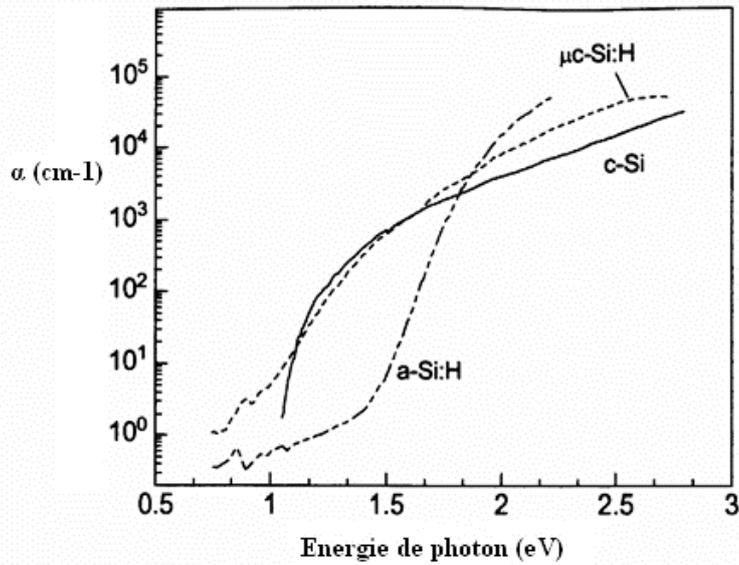


Figure.10. Spectres du coefficient d'absorption optique du  $\mu\text{c-Si:H}$ ,  $\text{a-Si:H}$  et le  $\text{c-Si}$  obtenus par la méthode PDS [21].

Notant qu'il n'est pas facile de tracer un profil de la densité d'états électronique de  $\mu\text{c-Si:H}$  et de nano-Si:H, en raison de leur structure hétérogène.

#### 4. Propriétés électrique des couches minces de nano-Si:H

La structure hétérogène de ce matériau influe fortement sur ses propriétés électriques. En effet dû à la présence d'une fraction cristalline élevée dans des couches de nano-Si:H ou même dans des couches de  $\mu\text{c-Si:H}$ , une passivation limite par les atomes d'hydrogène est obtenue [22]. Par conséquent, les propriétés électriques et de transport de ces matériaux seront modifiées. Différentes techniques ont été utilisées pour caractériser les propriétés de transport de  $\mu\text{c-Si:H}$ , localement, parallèlement au substrat ou dans la direction de croissance de la couche mince. Ce matériau possède une énergie d'activation qui varie entre 0.6 eV à 0.2 eV même pour des couches non intentionnellement dopées. Elle décroît lorsque la fraction cristalline du matériau augmente.

La conductivité électrique des couches de  $\mu\text{c-Si:H}$  est de l'ordre de quelque  $10^{-7} \Omega^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$  et peut augmenter de plusieurs ordres de grandeur à partir de valeurs caractéristiques du silicium amorphe lorsque la fraction cristalline dépasse 40 %, ce qui correspond à la percolation des cristallites [23]. Le facteur pré-exponentiel de la conductivité est de quelque  $\Omega^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$ . Il augmente au départ en même temps que la fraction cristalline du matériau, puis il décroît fortement lors de l'apparition des joints de grains [23]. Ce comportement est attribué au fait que le transport dans le silicium microcristallin dans la

direction parallèle au substrat est limité par les barrières entre les grains et non pas par la transition entre les petites cristallites

## **Conclusion**

Dans ce chapitre, nous avons rappelé les différentes structures hétérogènes du silicium en illustrant l'intérêt technologique du silicium polymorphe, nano cristallin et microcristallin hydrogéné. Ces matériaux présentent d'excellentes propriétés optiques et électriques par rapport au silicium amorphe hydrogéné et le silicium cristallin. La raison d'un tel comportement est liée à la structure hétérogène de ces matériaux qui donne lieu à des phénomènes de diffusion de la lumière. Dans le chapitre suivant, nous allons présenter une étude détaillée d'un modèle théorique qui décrit les phénomènes de diffusion de la lumière responsables de l'absorption optique élevée dans ces matériaux. Cette étude sera menée à l'aide des méthodes de caractérisation optique qui permettent de mesurer l'absorption optique des semi-conducteurs, particulièrement la méthode de photocourant constant (CPM).

# **CHAPITRE II**

---

---

**MODELE THEORIQUE DE DIFFUSION DE LA LUMIERE DANS LES  
MILIEUX HETEROGENES**

---

---

## Introduction

Dans ce Chapitre, nous allons présenter le principe de la Méthode de Photocourant Constant (CPM) utilisée pour l'analyse optique et électrique des matériaux semiconducteurs en couche mince. Cette description est menée à l'aide des équations et des formules qui permettent de déterminer les expressions de l'absorption optique et du photocourant induits dans les milieux de structure homogène tels que le silicium cristallin et le silicium amorphe hydrogéné ainsi que dans les milieux de structure hétérogène tels que le silicium polymorphe et nanocristallin hydrogéné. Cette étude sera menée en exploitant un modèle théorique important qui traite les phénomènes de diffusion de la lumière dans ces matériaux hétérogènes.

### 1. Mesures des faibles absorptions

Les mesures d'absorption optique au-dessous du seuil d'absorption fondamental d'un matériau semiconducteur en couche mince peuvent apporter des informations très utiles sur son désordre et sur ses défauts. La détermination de faibles coefficients d'absorption optique par les méthodes basées sur les mesures de transmission et de réflexion (T&R) n'est pas assez précise, nous avons donc besoin de recourir à des méthodes basées sur les mesures de la photoconductivité, particulièrement la méthode de photocourant constant (CPM), qui permettent de mesurer les faibles coefficients d'absorption optique.

#### 1.1. Méthode de photocourant constant (CPM)

La Méthode de Photocourant Constant (CPM : Constant Photocurrent Method) a été proposée initialement par Grimeiss et Ledebor [29], puis appliquée à l'étude des semiconducteurs amorphes par Vaněček et al [30]. Le principe physique de cette méthode consiste à placer en configuration coplanaire (Figure.1) une couche mince semiconductrice et éclairer uniformément sa surface située entre les deux électrodes métalliques par une lumière monochromatique (modulé ou non) sous une incidence normale dont l'énergie ( $\eta\omega$ ) est inférieure à l'énergie du gap ( $E_g$ ) du semiconducteur ( $\eta\omega < E_g$ ).

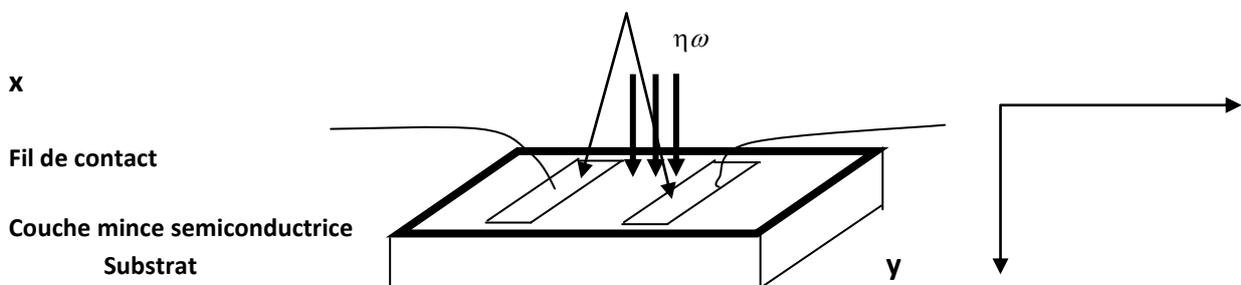


Figure. 1. Couche mince d'un semiconducteur placée en configuration coplanaire sous un éclairage électromagnétique perpendiculaire à sa surface.

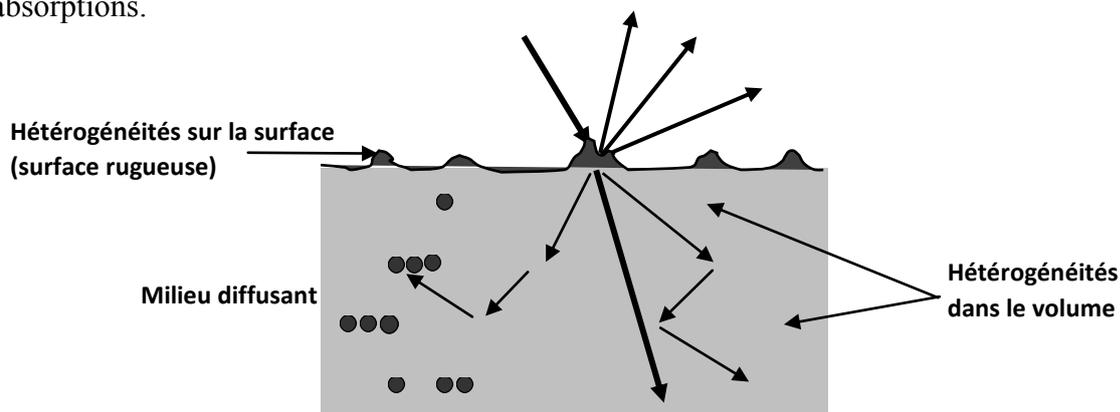
Cette méthode est effectuée en faisant varier le flux incident de façon à maintenir le photocourant constant tout au long de la mesure du domaine spectral considéré. Cette façon de procéder permet de maintenir les quasis niveaux de Fermi fixes dans le pseudo gap du semiconducteur et par voie de conséquence, un nombre constant de centres recombinants. Ce qui assure une durée de vie ( $\tau_n$ ) constante des porteurs photocréés [28]. Dans ce cas, le coefficient d'absorption  $\alpha_f(\eta\omega)$  est déduit de la relation suivante :

$$\alpha_f(\hbar\omega) = \frac{cste}{\phi_0(\hbar\omega)}(1)$$

$\phi_0(\hbar\omega)$  est le flux électromagnétique incident.

## 2. Phénomènes de diffusion de la lumière

Comme nous l'avons discuté dans le premier chapitre, le silicium polymorphe (pm-Si :H) et nanocristallin hydrogéné (nano-Si :H) sont des nanomatériaux qui possèdent des propriétés optoélectroniques très améliorées par rapport au silicium amorphe hydrogéné (a-Si : H). En plus, ils présentent une métastabilité plus faible lors de leurs exposition prolongée à la lumière en comparant avec le a-Si :H. La raison d'un tel comportement est liée à la structure hétérogène de ces matériaux. Cette structure particulière donne lieu à des phénomènes de diffusion de la lumière (Light scattering) dans le volume et/ou sur la surface rugueuse du matériau (Figure.2). En effet, la diffusion qui se produit dans ces nanomatériaux augmente le chemin optique suivi par les photons diffusés, de telle manière que l'absorption du matériau augmente. Ce qui rend le matériau un bon photoconducteur surtout dans la gamme des faibles absorptions.



*Figure. 2. Schéma simplifié des phénomènes de diffusion de la lumière sur la surface rugueuse et dans le volume d'un milieu de structure hétérogène.*

### 2.1. Expression du photocourant dans un milieu homogène

Afin de mettre le point sur la contribution de la lumière diffusée dans l'absorption optique d'un matériau hétérogène tel que le silicium polymorphe ou nanocristallin hydrogéné, il est nécessaire d'introduire l'expression qui relie le coefficient d'absorption optique  $\alpha_f$  calculé dans un milieu homogène avec le photocourant ( $I_{ph}$ ) induit suivant la configuration CPM en introduisant des paramètres physiques et géométriques importants.

Tout d'abord, nous déterminons le photocourant induit par les porteurs de charges photocréées traversant la surface hachurée (S) du schéma de la figure.3.

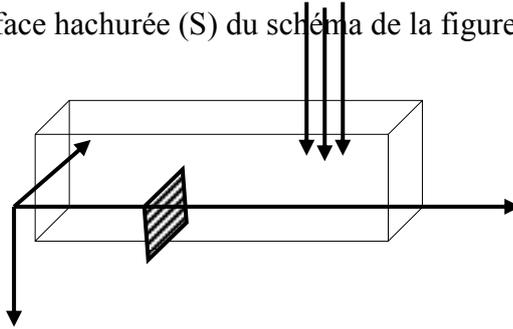


Figure.3. Couche (film) mince d'un semiconducteur homogène soumise à un éclairage perpendiculaire sur le plan (XOZ).

Le transport de charge peut être décrit par les équations suivantes définissant les densités de courant des électrons ( $j_n$ ) et des trous ( $j_p$ ) [28].

$$\vec{j}_n = q \mu_n n \vec{\xi} + q D_n \overrightarrow{\text{grad}} n \quad (2)$$

$$\vec{j}_p = q \mu_p p \vec{\xi} - q D_p \overrightarrow{\text{grad}} p \quad (3)$$

et obéit aux lois de continuité exprimées par les équations suivantes :

$$\frac{\delta n}{\delta t} = g_n - r_n + \frac{1}{q} \text{div } \vec{j}_n \quad (4)$$

$$\frac{\delta p}{\delta t} = g_p - r_p - \frac{1}{q} \text{div } \vec{j}_p \quad (5)$$

$\xi$  représente le champ électrostatique appliqué.

$n, p$  expriment respectivement les densités des électrons et des trous.

$\mu_n, \mu_p$  représentent respectivement les mobilités des électrons et des trous.

$r_n, r_p$  sont respectivement les taux de recombinaison des électrons et des trous.

$D_n, D_p$  expriment respectivement les coefficients de diffusion des électrons et des trous.

$q$  désigne la charge électrique de l'électron.

Le taux de génération des électrons  $g_n(y)$  et des trous  $g_p(y)$  sont donnés par :

$$g_n(y) = g_p(y) = \eta \alpha T_f (1 - R_f) \phi_0 e^{-\alpha_f \cdot y} \quad (6)$$

$\phi_0$  représente le flux des photons arrivant à la surface éclairée.

$\alpha_f$  est le coefficient d'absorption de la couche (film).

$\eta$  représente le rendement quantique de la génération des paires (électrons -trous) prise égale à l'unité.

$R_f, T_f$  sont respectivement les facteurs de réflexion de la couche.

Pour résoudre les équations (4) et (5), on se place en régime permanent ( $\frac{\delta n}{\delta t} = \frac{\delta p}{\delta t} = 0$ ) et on

considère que le champ électrique est constant entre les deux électrodes. Les courants suivant les directions (OY) et (OZ) (Figure.3) sont nuls. Le courant de diffusion étant nul (éclairage uniforme sur la surface), la densité de courant suivant la direction (OX), ( $j_x$ ) peut s'exprimer comme :

$$j_x = q n \mu_n \xi_x \quad (7)$$

La durée de vie ( $\tau_n$ ) des électrons photogénérés étant définie par :

$$\tau_n = \frac{\Delta n(y)}{g_n(y)} \quad (8)$$

où :

$\Delta n(y)$  représente la densité des électrons photogénérés, donnés par :

$$\Delta n(y) = n(y) - n_{obs}(y) \quad (9)$$

$n_{obs}(y)$  représente la densité des électrons à l'obscurité.

En intégrant la densité du courant sur toute la surface traversée par le courant (la surface S hachurée sur la figure .3], on obtient finalement l'intensité du photocourant :

$$I_{ph} = \iint_S j_{ph} \cdot dy \cdot dz \quad (10)$$

En calculant cette intégrale, on aura donc :

$$I_{ph} \approx q \phi_0 L l (1 - R_f) T_f \left[ (1 - \exp(-\alpha_f \cdot d_f)) \right] \mu_n \tau_n \frac{V}{L^2} \quad (11)$$

$R_f$  et  $T_f$  présentent respectivement les facteurs de réflexion et de transmission du film.

Le photocourant ( $I_{ph}$ ) est proportionnel à l'absorptance totale de la couche ( $A_f$ ) donnée par :

$$A_f = (1 - R_f) \left[ (1 - \exp(-\alpha_f \cdot d_f)) \right] \quad (12)$$

L'équation.12 exprime l'approche de BEER pour le calcul de l'absorptance d'une couche mince homogène à faces parallèles [26].

Donc :

$$I_{ph} \approx q \phi_0 L l T_f \mu_n \tau_n \frac{V}{L^2} A_f \quad (13)$$

Dans le domaine des faibles absorptions ( $\eta\omega \leq E_g$ ) où la condition  $\alpha_f \cdot d_f \ll 1$  est satisfaite et pour une couche mince de a- Si : H en, l'équation (2-24) peut être simplifiée comme :

$$I_{ph} \approx q \phi_0 L l (1 - R_f) T_f \mu_n \tau_n \frac{V}{L^2} \alpha_f \cdot d_f \quad (14)$$

L'équation (14) permet de relier le photocourant  $I_{ph}$  avec le coefficient d'absorption  $\alpha_f(\eta\omega)$  d'un film semiconducteur de structure homogène.

Les valeurs de  $\alpha_f, d_f, R_f, T_f$  sont des inconnus qui peuvent être déterminés expérimentalement.

Les grandeurs (L) et (l) sont des valeurs fixées lors du dépôt du semiconducteur.

## **2.2. Expression du photocourant dans un milieu hétérogène**

Il est évident que la perte d'énergie due à la diffusion peut être caractérisée par un coefficient d'absorption de diffusion  $\alpha_{diff}(\eta\omega)$  qui s'ajoute au coefficient d'absorption du faisceau spéculaire (non diffusé)  $\alpha_{réel}(\eta\omega)$ . Nous pouvons écrire alors, le coefficient d'absorption totale d'un milieu hétérogène sous la forme suivante [26] :

$$\alpha_f(\eta\omega) = \alpha_{réel}(\eta\omega) + \alpha_{diff}(\eta\omega) \quad (15)$$

L'absorptance totale de milieu ( $A_{tot}$ ) est la somme des deux termes, l'absorptance directe ( $A_{dir}$ ) et l'absorptance dûe à la diffusion ( $A_{diff}$ ) [24] :

$$A_{tot} = A_{dir} + A_{diff} \quad (16)$$

Avec :

$$A_{dir} \sim \frac{\alpha_{réel}}{\alpha_f} [1 - \exp(-\alpha_f \cdot d_f)] \quad (17)$$

$$A_{diff} \sim \frac{\alpha_{diff}}{\alpha_f} [1 - \exp(-\alpha_f \cdot d_f)] \quad (18)$$

Nous avons établi dans le cas d'un milieu homogène que le photocourant total ( $I_{ph}$ ) est proportionnel à l'absorptance totale ( $A_{tot}$ ) (Equation. 13). Cette caractéristique reste toujours valable même pour un milieu hétérogène avec :

$$I_{ph} \approx A_{tot} = N_{photons} (A_{dir} + A_{diff}) \quad (19)$$

$N_{photons}$  représente le nombre de photons incidents.

Ce qui permet de déduire que le photocourant ( $I_{ph}$ ) se compose de deux termes :

$$I_{ph} = I_{ph,dir} + I_{ph,diff} \quad (20)$$

Où :

$I_{ph,dir}$  représente le photocourant due à l'absorption du faisceau lumineux spéculaire

$I_{ph,diff}$  représente le photocourant due à l'absorption du faisceau lumineux diffusé.

Pour calculer les composantes  $I_{ph,dir}$  et  $I_{ph,diff}$ , on distingue deux cas possibles de diffusion de la lumière, à savoir la diffusion de la lumière par une surface rugueuse ou la diffusion de la lumière par des hétérogénéités dans le volume. Nous limiterons notre étude dans ce mémoire au traitement de la diffusion de la lumière sur la surface rugueuse d'un milieu hétérogène.

### **2.2.1. L'effet de la rugosité de surface sur le photocourant mesuré**

Pour calculer l'influence de la rugosité de surface sur le photocourant, nous allons considérer un échantillon dont la surface (air - film) est rugueuse, tandis que l'interface (substrat - film) est lisse et que la couche mince (le film) ne contient pas des hétérogénéités dans son volume (Figure.4). On éclaire la couche du côté de la surface rugueuse, le photocourant total ( $I_{ph}$ ) est proportionnel à l'absorptance totale ( $A_{tot}$ ) (Equation. 19).

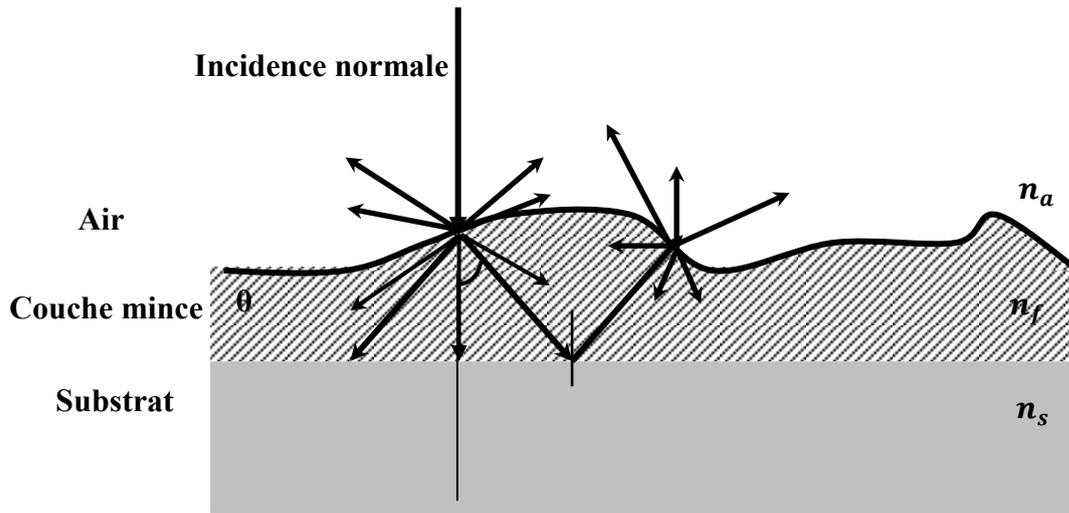


Figure.4. Schéma simplifié du phénomène de diffusion de la lumière sur une surface rugueuse d'une couche mince.

Le photocourant dû à l'absorption du faisceau spéculaire s'écrit [24] :

$$I_{ph,dir} \approx N_{photons} S_t [1 - \exp(-\alpha_f \cdot d_f)] \quad (21)$$

Où  $S_t$  est un terme correctif de la diffusion en surface du faisceau transmis et est donné par :

$$S_t = \exp \left[ - \left[ \frac{2 \pi \sigma_{rms} (n_a - n_f)}{\lambda} \right]^2 \right] \quad (22)$$

$\sigma_{rms}$  exprime la rugosité moyenne de la surface.

$\lambda$  est la longueur d'onde du faisceau électromagnétique incident.

Pour déterminer le photocourant dû à l'absorption du faisceau diffusé ( $I_{ph,diff}$ ), nous allons tout d'abord suivre le chemin optique d'un photon diffusé avant qu'il soit absorbé. En effet, le photon subit une première diffusion à la surface (air - film), il traverse une première fois le film puis il est réfléchi à l'interface (film - substrat). Il traverse une deuxième fois le film pour revenir à l'interface (film - air) où il subit une deuxième diffusion et ainsi de suite.

La probabilité de diffusion d'un photon par une surface rugueuse est donnée par [24] :

$$P_{diff} = \left[ \frac{n_s}{n_f} \right]^2 \quad (23)$$

Tenant compte de ces diffusions et de ces réflexions, le photocourant déduit de l'absorption du faisceau diffusé  $I_{ph,diff}$  peut être exprimé par [24] :

$$I_{ph,diff} \approx P_0 A_1 + P_0 P_1 A_2 \left[ \frac{P_2^{N_{surf}} - 1}{P_2 - 1} \right] \quad (24)$$

Avec :

$$P_0 = (1 - S_t) + S_t \cdot R_{fs} \exp(-2 \alpha_{réel} \cdot d_f) R_{fa} (1 - S_{r0}) \quad (25)$$

Où :

$S_r$  est le terme correctif de la réflexion donné par :

$$S_r = \exp \left[ - \left( \frac{4 \pi \sigma_{rms} n_a}{\lambda} \right)^2 \right] \quad (26)$$

$S_t$  est le facteur correctif de la transmission donné par :

$$S_t = \exp \left[ - \left[ \frac{2 \pi \sigma_{rms} (n_a - n_f)}{\lambda} \right]^2 \right] \quad (27)$$

$R_{fs}$  représente le facteur de la réflexion de l'interface (film-substrat).

$R_{fa}$  est le coefficient de transmission de l'interface (air – film).

$$A_1 = (1 - P_{diff}) [1 - \exp(-y \alpha_{réel} \cdot d_f)] + P_{diff} [1 - \exp(-1.05 \alpha_{réel} \cdot d_f)] \quad (28)$$

Avec (y) est un facteur de correction calculé pour un faisceau qui traverse la surface du film avec un certain angle  $\varphi$  [24].

Les termes  $P_1$ ,  $A_2$ ,  $P_2$  de l'équation.24 sont donnés par [24] :

$$P_1 = (1 - P_{diff}) [\exp(-y \alpha_{réel} \cdot d_f)] \quad (29)$$

$$A_2 = \{(1 - P_{diff}) (1 - S_r) + S_r\} [1 - \exp(-y \alpha_{réel} \cdot d_f)] + P_{diff} [1 - \exp(-1.05 \alpha_{réel} \cdot d_f)] \cdot [1 + R_{fs} \exp(-1.05 \alpha_{réel} \cdot d_f)] \quad (30)$$

$$P_2 = \{(1 - P_{diff}) (1 - S_r) + S_r\} [\exp(-y \alpha_{réel} \cdot d_f)] \quad (31)$$

Le terme  $N_{surf}$  qui figure dans l'équation.24 représente le nombre de diffusion du photon sur la surface (air - film) avant qu'il soit absorbé dans la région située entre les deux électrodes. Ce terme s'écrit sous la forme suivante [24] :

$$N_{surf} = \left[ \frac{X(W, D)}{y \cdot d_f} \right]^2 \cdot (1 - S_r) + \left[ \frac{X(W, D)}{y \cdot d_f} \right] \cdot S_r \quad (32)$$

$X(W, D)$  est une fonction des dimensions du dispositif éclairé suivant la configuration CPM, elle est donnée par [24] :

$$X(W, D) = \frac{1}{W \cdot D} \int_0^W \int_0^D x(W, D, x_1, y_1) dx_1 dy_1 \quad (33)$$

Le photocourant total  $I_{ph}$  s'écrit alors sous la forme suivante :

$$I_{ph} \approx N_{photons} \left\{ S_t [1 - \exp(-\alpha_{réel} \cdot d_f)] + P_0 A_1 + P_0 P_1 A_2 \frac{P_2^{N_{surf}} - 1}{P_2 - 1} \right\} \quad (34)$$

Nous notons que La formule de BEER (Equation.12) est toujours utilisée pour déterminer le coefficient d'absorption d'un milieu hétérogène, mais dans le cas de diffusion surfacique elle ne peut donner qu'un coefficient d'absorption apparente  $\alpha_{app}(\eta\omega)$  et non pas un coefficient d'absorption réelle  $\alpha_f(\eta\omega)$ . Par conséquent, l'absorptance totale est donnée par [24] :

$$A_{tot} = A_{app} \approx [1 - \exp(-\alpha_{app} \cdot d_f)] \quad (35)$$

Et puisque  $I_{ph} \approx A_{tot}$ , nous pouvons écrire l'égalité suivante :

$$[1 - \exp(-\alpha_{app} \cdot d_f)] = \left\{ S_t [1 - \exp(-\alpha_{réel} \cdot d_f)] + P_0 A_1 + P_0 P_1 A_2 \frac{P_2^{N_{surf}} - 1}{P_2 - 1} \right\} \quad (36)$$

Cette égalité permet de déterminer le coefficient d'absorption réelle  $\alpha_{réel}$  à partir des valeurs du coefficient d'absorption apparente  $\alpha_{app}$  mesuré par la méthode CPM pour des couches minces de semiconducteurs rugueux.

## Conclusion

Dans la première partie de ce chapitre, nous avons présenté le principe physique de la méthode CPM utilisée pour déterminer le coefficient d'absorption optique réelle des semiconducteurs dans la gamme des faibles énergies. Puis, nous avons discuté la contribution

de la diffusion de la lumière dans un milieu hétérogène dans son absorption optique qui est considéré comme apparente. Les phénomènes de diffusion de la lumière sont mis au point à l'aide d'un modèle théorique qui traite la contribution de la lumière diffusée sur une surface rugueuse d'un semiconducteur hétérogène en donnant des formules correctives du coefficient d'absorption et du photocourant déduit des mesures de CPM. Cependant, afin de distinguer entre les contributions spéculaire et de diffusion, nous discuterons, dans le prochain chapitre, les détails d'une nouvelle méthode numérique qui permettra d'extraire l'absorption réelle depuis l'absorption apparente d'un milieu hétérogène.

# **CHAPITRE III**

---

---

## **RESULTATS ET COMPARAISONS**

---

---

## Introduction

La résolution de l'équation.36 permettant de déduire le coefficient d'absorption réelle, est impossible analytiquement car elle a une forme mathématique complexe et elle contient plusieurs paramètres liés les uns aux autres. Donc, cette équation nécessite une résolution numérique qui permet de déterminer le coefficient d'absorption réelle  $\alpha_{réel}(\eta\omega)$  d'un matériau hétérogène.

### 1. Calcul numérique du coefficient d'absorption réelle

La figure suivante présente la solution numérique de l'équation.36. Cette solution est procédée à l'aide d'un programme numérique qu'on l'a effectué en utilisant le langage de programmation « Fortran Power Station ». Dans nos calculs, nous considérons la valeur de  $\alpha_{réel}$  pour laquelle la fonction  $f(\alpha_{réel}) = 0$ . cela sera considéré pour toute la gamme énergétique prise de 0.8 eV à 2.2 eV.

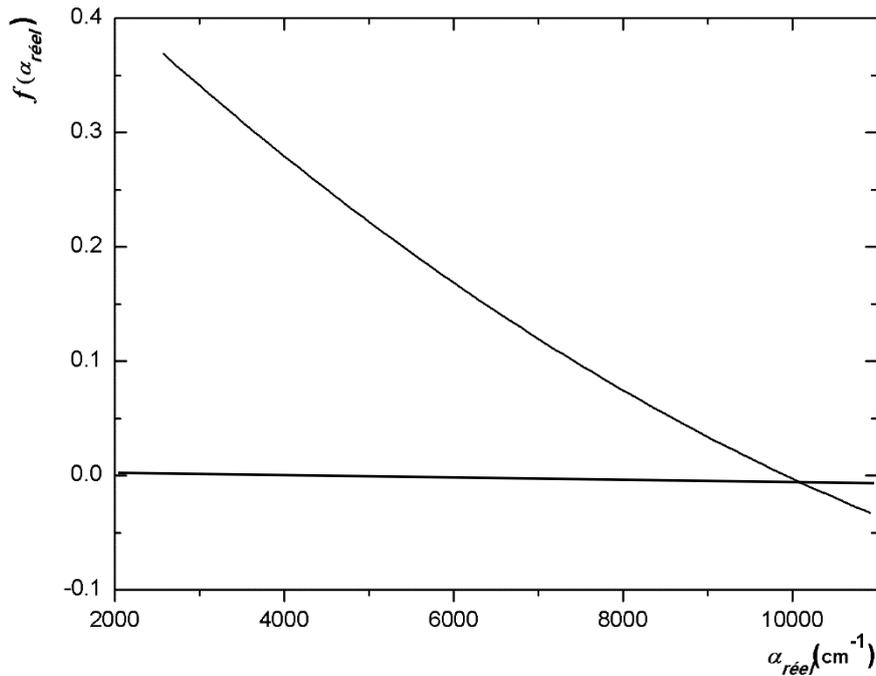
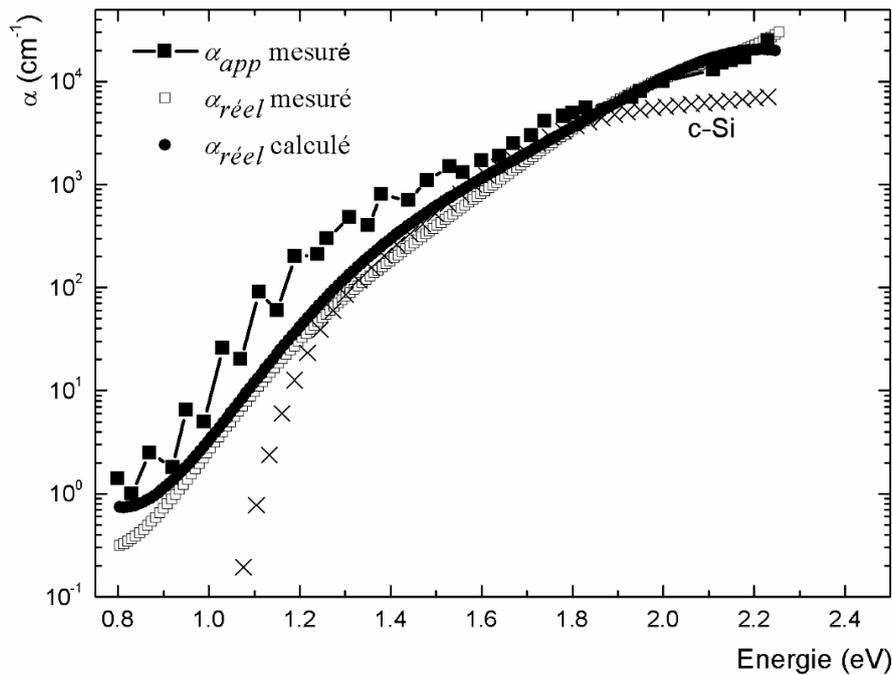


Figure. 1. Exemple d'une solution numérique de l'équation (36) prise pour  $E = 0.94 \text{ eV}$  et  $\alpha_{app} = 12635 \text{ cm}^{-1}$ .

### 2. Validité de la méthode numérique

Afin de vérifier la validité de notre méthode proposée, nous avons pris les résultats expérimentaux [24] du coefficient d'absorption réelle mesuré par la méthode CPM d'un échantillon de silicium microcristallin hydrogéné ( $\mu\text{-Si} : \text{H}$ ) dont la valeur de la rugosité de surface ( $\sigma_{rms}$ ) est de 21 nm, après avoir poli sa surface (afin de rendre  $\sigma_{rms} = 0 \text{ nm}$  et

mesurer directement  $\alpha_{réel}$ ). Puis nous avons comparé nos calculs numériques effectués sur le même échantillon à savoir  $\alpha_{réel}$  calculé par la méthode numérique. Nous avons obtenu un bon ajustement entre les spectres expérimental et calculé de  $\alpha_{réel}$ . La figure. 2 illustre la validité de la méthode numérique proposée en remarquant l'ajustement obtenu entre les courbes (b) et (c).



*Figure. 2. Spectre du coefficient d'absorption réelle mesuré par CPM (pour  $W=8$  mm et  $D=2$  mm) d'un échantillon de  $\mu\text{c-Si:H}$  d'épaisseur  $= 2 \mu\text{m}$  et de rugosité de surface  $\sigma = 21$  en comparaison avec celui du coefficient d'absorption réelle calculé par la méthode numérique. Le spectre du coefficient d'absorption de c-Si est introduit à titre de comparaison [25].*

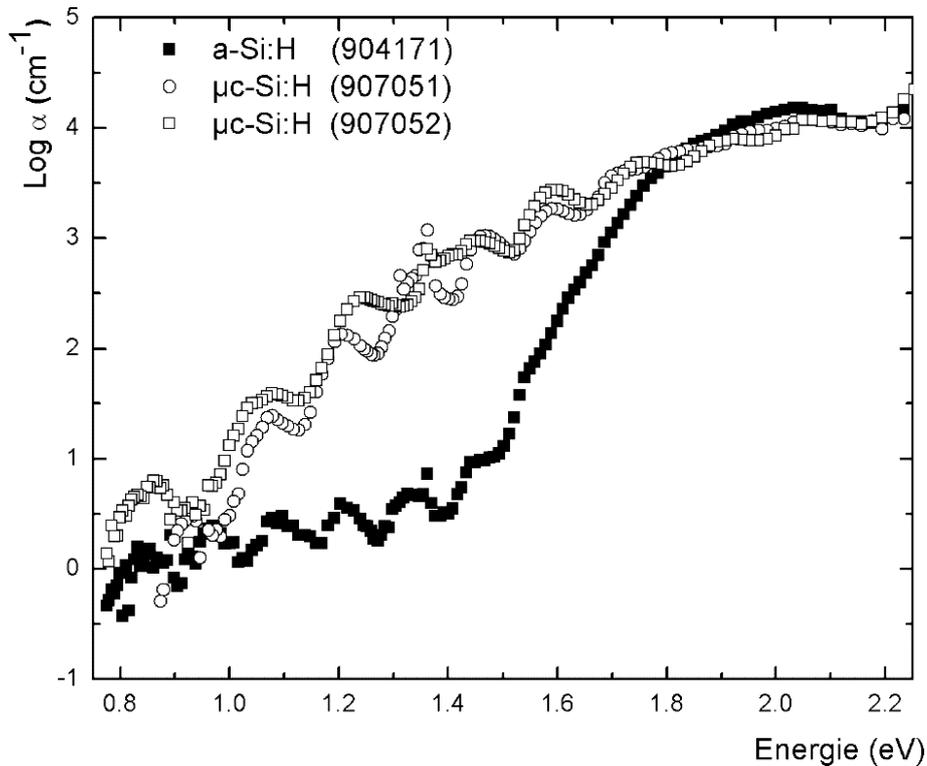
### 3. Résultats d'application de la méthode numérique

Dans ce qui suit, nous allons présenter les résultats numériques du coefficient d'absorption réelle calculé par la méthode numérique à partir des spectres expérimentaux de  $\alpha_{app}(\eta\omega)$  déduits des mesures de (CPM) des couches minces de silicium microcristallin hydrogéné ( $\mu\text{c-Si:H}$ ). Ces couches sont élaborées au sein du Laboratoire de Physique des Interfaces et des Couches Minces (LPICM) de l'École Polytechnique de France. Elles sont déposées par la méthode de PECVD en diluant 1.5 sccm de silane dans 140 sccm d'hydrogène sous une puissance d'injection de 17 W et sous une température de réacteur de  $250^\circ\text{C}$ . La pression du réacteur varie entre 65 et 200 Pa. Le tableau.1. résume les conditions de dépôt de ces couches. Nous avons représenté sur la figure.3. Les spectres du coefficient d'absorption apparente déduits des mesures de CPM de la série d'échantillons de silicium microcristallin hydrogéné

( $\mu\text{c-Si:H}$ ) qui présente une fraction cristalline très élevée (~ 99 %) et une rugosité moyenne de surface égale à 15 nm déterminée par les mesures de la Microscopie à Force Atomique (AFM).

Numéro	Pression (m Torr)	$Q_{H_2}/Q_{Tot}$	Puissance (Watt)	Température	Rugosité de surface (nm)	Épaisseur ( $\mu\text{m}$ )
907051	1220	0.99	17	250	14	0.84
907052	760	0.97	17	25	15	1
a-Si:H (standard)	33	-----	17	250	0	1

*Tableau .1. Conditions de dépôt d'une série d'échantillons de  $\mu\text{c-Si:H}$ .*



*Figure.3. Spectres du coefficient d'absorption apparente déduits des mesures de CPM d'une série d'échantillons de  $\mu\text{c-Si:H}$ , le spectre du coefficient d'absorption de a-Si:H est introduit à titre de comparaison.*

### 3.1. Résultats sur l'échantillon 907051

#### 3.1.1. Calcul du coefficient d'absorption réel

La figure.4. présente le spectre du coefficient d'absorption réelle  $\alpha_{réel}(E)$  calculé par la méthode numérique en comparant avec celui du coefficient d'absorption apparente mesuré par CPM de l'échantillon 907051. Nous remarquons que le spectre de  $\alpha_{réel}(E)$  est décalé vers les faibles énergies. Ce qui permet de déduire que le silicium microcristallin hydrogéné ( $\mu\text{-Si:H}$ ) est un matériau très adopté dans les applications photovoltaïques qui permettent d'obtenir un photocourant en absorbant plus faiblement le rayonnement électromagnétique incident. Notant que  $\alpha_{app} > \alpha_{réel}$  sur toute la gamme d'énergie. Ceci est dû aux phénomènes de diffusion surfacique de la lumière qui augmentent l'absorption apparente de la couche considérée

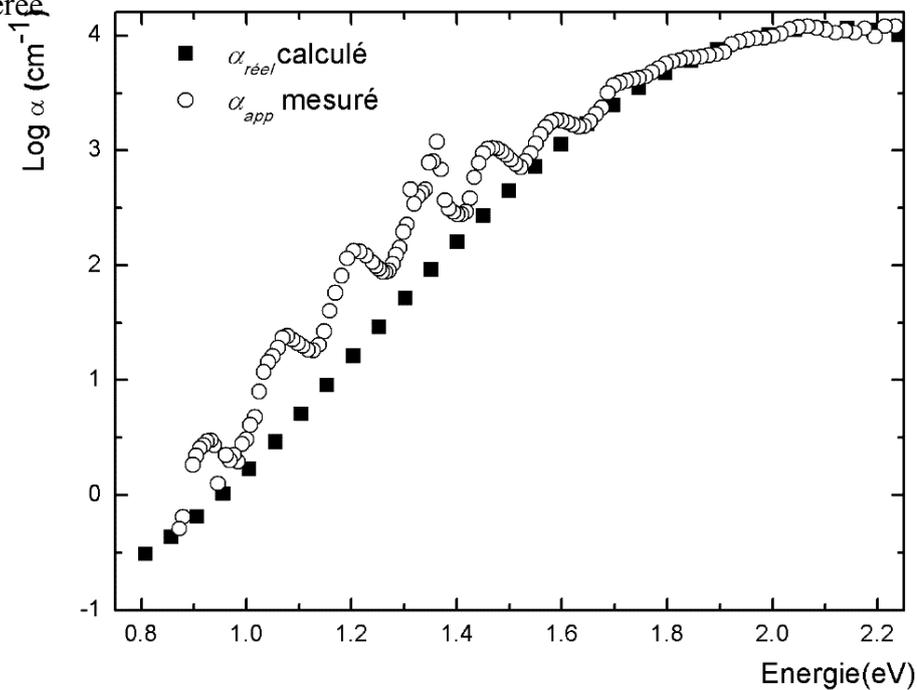


Figure.4. Spectre du coefficient d'absorption réelle calculé par la méthode numérique comparé avec celui du coefficient d'absorption apparente déduit des mesures de CPM de l'échantillon (907051).

#### 3.1.2. Calcul du coefficient de diffusion

Le spectre du coefficient de diffusion surfacique de cet échantillon est illustré sur la figure.5. Nous remarquons une certaine proportionnalité entre l'énergie lumineuse incidente et le coefficient de diffusion correspondant.

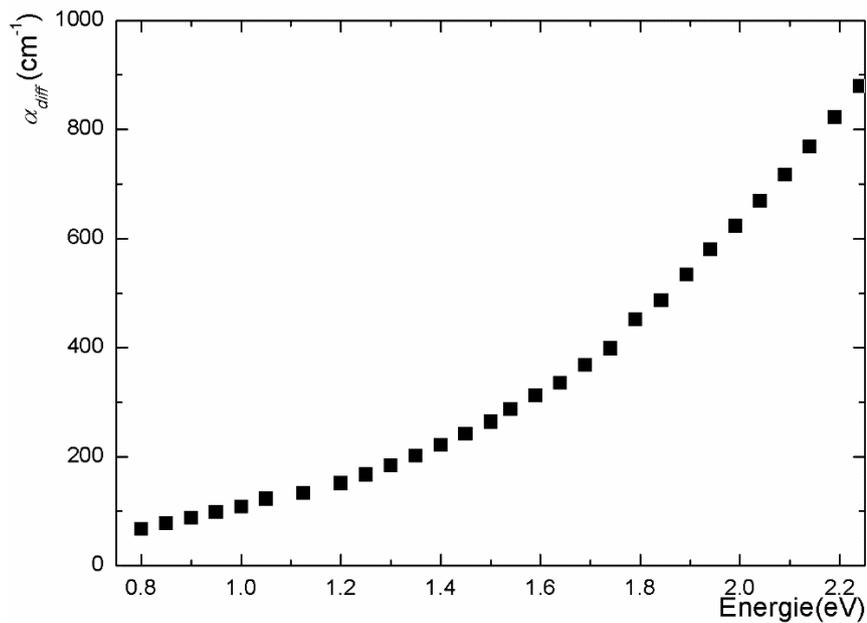


Figure.5. Spectre du coefficient de diffusion surfacique calculé par la méthode numérique de l'échantillon (907051).

### 3.2. Résultats sur l'échantillon 907052

#### 3.2.1. Calcul du coefficient d'absorption réel

Le spectre du coefficient d'absorption réelle  $\alpha_{réel}(E)$  calculé par la méthode numérique de l'échantillon 907052 est illustré sur la figure.6.

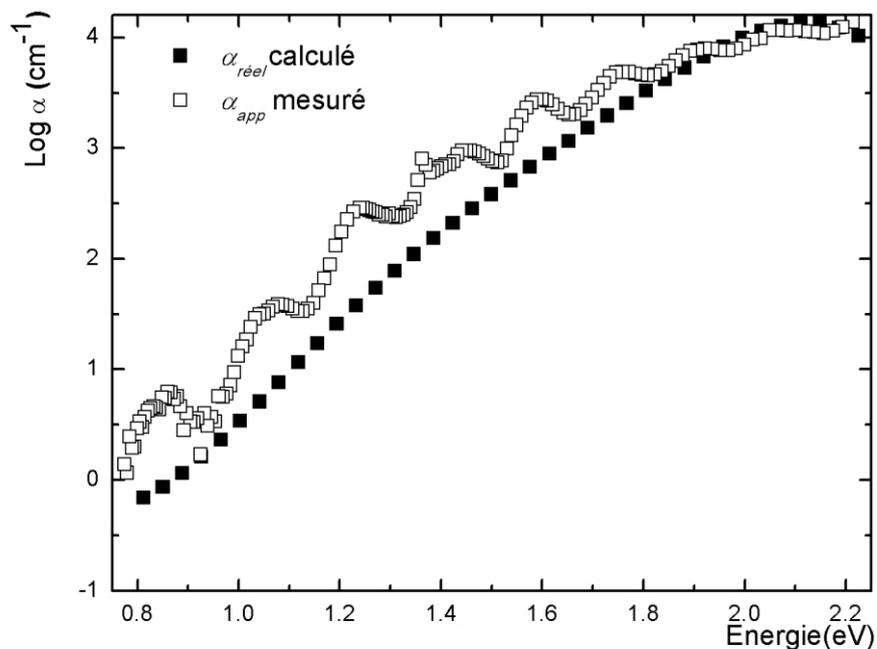
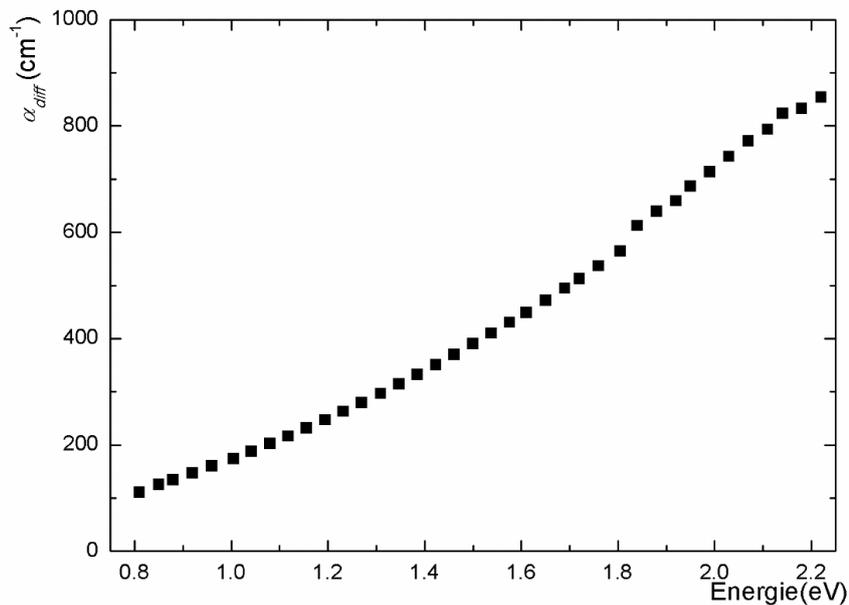


Figure.6. Spectre du coefficient d'absorption réelle calculé par la méthode numérique comparé avec celui du coefficient d'absorption apparente déduit des mesures de CPM de l'échantillon (907052).

Nous remarquons que  $\alpha_{app} > \alpha_{réel}$  dans la gamme des faibles énergies (0.8-1.8 eV). Ceci confirme la fiabilité de la méthode CPM de détecter les faibles absorptions dans les couches minces semiconductrices.

### 3.2.2. Calcul du coefficient de diffusion

Le spectre du coefficient de diffusion calculé numériquement est donné sur la figure.7. Nous remarquons le même comportement que le premier échantillon. En effet le coefficient de diffusion augmente en augmentant l'énergie incidente, surtout dans la gamme des faibles énergies dont l'importance de phénomène de diffusion est bien illustrée.



*Figure.7. Spectre du coefficient de diffusion surfacique calculé par la méthode numérique de l'échantillon (907052).*

## Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté la solution numérique de l'équation de diffusion surfacique (Equation.39) à l'aide d'un programme numérique basé sur des méthodes itératives. Puis nous avons vérifié la validité de notre méthode en comparant nos résultats numériques avec ceux donnés par d'autres auteurs. Nous avons obtenu un très bon accord. Dans la dernière partie de ce chapitre, nous avons appliqué notre méthode numérique sur deux types d'échantillons de silicium microcristallin hydrogéné ( $\mu\text{-Si : H}$ ) ayant une rugosité surfacique et d'épaisseur différentes afin de calculer leurs spectres du coefficient d'absorption réelle et de coefficient de diffusion surfaciques. Cette méthode numérique constitue un outil important pour déconvoluer les spectres d'absorption apparente mesurés par la méthode CPM des couches minces semiconductrices.

# CONCLUSION GENERALE

Nous avons décrit dans la première partie de ce mémoire, la Méthode de Photocourant Constant (CPM) utilisée pour déterminer les propriétés optiques et électriques des semiconducteurs dans la gamme des faibles absorptions. Nous avons déterminé respectivement les expressions du coefficient d'absorption et de photocourant dans les milieux homogènes et les milieux hétérogènes en introduisant des termes de correction liés aux phénomènes de diffusion surfacique de la lumière. Ces expressions corrigées ont été élaborées à l'aide d'un modèle théorique, qui décrit l'influence des phénomènes de diffusion surfacique de la lumière sur le photocourant déduit des mesures de CPM. Ce modèle permet de déterminer les contributions du faisceau diffusé et du faisceau spéculaire à partir de l'absorption apparente du faisceau incident.

Dans la deuxième partie de ce mémoire, nous avons mis en point d'une nouvelle méthode numérique basée sur le modèle théorique de diffusion illustré dans la première partie de ce travail. Cette méthode numérique permet d'extraire le spectre du coefficient d'absorption réelle d'un semiconducteur rugueux à partir du spectre du coefficient d'absorption apparente mesuré par la méthode CPM. Nous avons vérifié la validité de cette méthode numérique en comparant le spectre du coefficient d'absorption réelle calculé avec celui tiré expérimentalement d'un échantillon de  $\mu\text{-Si} : \text{H}$  après avoir poli mécaniquement sa surface. Nous avons eu un très bon ajustement entre les deux spectres. Ceci confirme la fiabilité de cette méthode numérique dans la déconvolution des spectres d'absorption mesurés par CPM des couches minces semiconductrices rugueuses.

Nous avons appliqué notre méthode de déconvolution sur une série d'échantillons de silicium microcristallin hydrogéné ( $\mu\text{-Si} : \text{H}$ ) ayant de différentes valeurs de rugosité surfacique. Ainsi, nous avons déduit que le coefficient de diffusion augmente avec le taux des cristallites présentes sur la surface de ces matériaux (C'est-à-dire avec la valeur de la rugosité surfacique). Nous avons constaté que la méthode numérique appliquée dans ce travail constitue un outil puissant pour séparer la contribution de la lumière spéculaire absorbée de celle apparente en déterminant la partie diffusée sur la surface d'une couche mince hétéro-semiconductrice.

## Références

---

- [1] C.Goncalves, « étude de couches minces de silicium hydrogéné déposées par pulvérisation cathodique magnétron radio fréquence », thèse de doctorat, université Picardie Jules Verne, (2003).
- [2] P. Munster, « Silicium intrinsèque et dopé in situ déposé amorphe par SAPCVD puis cristallisé en phase solide », Thèse de Doctorat, Université de Rennes 1, (2001).
- [3] S.C.Moss, j.Fgrazick, Phys.Rev.Lett, vol 23, p 1167(1969).
- [4] E.A. Davis et N.F.Mott, Phil. Mag, vol 22, p 903 (1970).
- [5] N.F.Mott, Phil.Mag, vol 22, p 7 (1970), Ed. M.H.Cohen and G. Lucovsky « North-Holland Amsterdam », (1972).
- [6] P.W.Anderson, phys.Rev, vol 109B, p 1492(1958).
- [7] G.W. Neudeck and A. K. Malhotra, j. of appl .phys. Vol 46, p.239(1975).
- [8] R.C. Chittick, j.H. Alexander et H.F.Sterling, j.Electrichem.soc, Vol 116, p.77 (1969).
- [9] A.Fontcuberta, i moral « croissance, propriétés structurales et optique se silicium polymorphe », thèse de doctorat, école polytechnique, (2001).
- [10] S.Hazra, A.R.Midday, C.longeaud, S.Ray, j.ofappl. Phys. Lett, vol 17, p.2340-2342(2000).
- [11] P. Roca iCabarocass,R.butté,M.cuniot,R.brenot,j.dixmier,A.fontcubertamorral, M. Gautier, E. Hamers, B.kalach,C.Longeaud,R.Meaudre,V.paillard, j.p. kleider, Y. Poissant, S.vingnoli,R.vanderhaghen, « séminaire sur la recherche et le développement technique, matériaux et procédés pour la conversion photovoltaïque et l'énergie solaire Sophia Antipolis », 21-22 novembre 2000.
- [12] P.RocaiCabarocca, ahel, C. Longeaud, J.P. kleider, R.Meaudre « nanostructured silicone thin films : a new material for photovoltaïque », proceedings of the 14 theuropean photovoltaic solar energy conférence, Barcelona, p 1444-1447(1997).
- [13] S.Kasouit, « Mécanismes de croissance et transport dans le silicium microcristallin fluré, application aux transistors en couches minces et transfert technologique », Thés de Doctorat, Ecole polytechnique, (2003).
- [14] M.goerltzer, « propriétés électroniques et structurales du silicium microcristallin hydrogéné », Thèse de Doctorat, Institut de microélectronique (IMT), Université de Neuchâtel, (1998).
- [15] S.Vèprèk et V.Manècèk, Sol. Stat. Electronics, vol 11, p 683 (1968).
- [16] S. Usui et M. Kikuchi, J.of Non-Crys. Solide, vol 34, p1 (1979).

## Références

---

- [17] J. Meier, P. Torres, R. Platz, S. Dubail, U. Kroll, J. A. Anna Selvan, N. PELLATON Vaucher, Ch. Hof, D. Fischer, H. Keppner, A. Shah, K. D. Ufert, P. Giannoulis and J. Koehler, *Mat. Res. Soc. SYMP. Proc.*, vol 420, p3(1996).
- [18] F. dihl et al. *J. Appl. Phys*, vol 84, p 3416(1998).
- [19] B. T. Tiedje, J. M. Cebulka, D. L. Morel and B. Abeles, *Phy. Rev. Lett*, vol 46, p 1425(1981).
- [20] A. K. Sinha and S. C. Agrual, *Philos. Mag.* vol B77, p 945 (1998).
- [21] F. Finger et al, *J. Materials Science: Materials in Electronics*, vol 14, p 621(2003).
- [22] S. Hamma, and P. Rocai Carrocas, *J, Appl. Phys*, vol 81, p 7282(1997).
- [23] J. Kacha, H. Struchlikova, J. Chlik, B. Rezek, T. Matés, V. Svercek, P. Fojtik, I. Plant and A. Fejfar, *J. No-cryst. Solids*, vol 299-302, p 355 (2002).
- [24] Y. Poissant., « Etude de l'influence de l'hydrogène sur les défauts et le désordre et sur les phénomènes de métastabilité dans le silicium amorphe hydrogéné, Thèse de Doctorat, Université d'Oran, Algérie, (1992).
- [25] A. Puruba, A. Fejfar, Z. Remes, J. M. Vanecek, J. Kocka, *J. App. Phys.*, vol 88, p.148, (2000).
- [26] L. Chahed., « Contribution à l'étude du silicium amorphe hydrogéné et ces alliages avec le germanium par spectroscopie de Déflexion Photothermique », Thèse de Doctorat, Université d'Oran, Algérie, (1989).
- [27] P. Fleury, J. P. Mathieu., « Physique générale et expérimentale : Lumière ». Ed. EROLLES, (1972).
- [28] F. Larbi., « Etude de l'effet de dopage sur la densité d'états profonds dans le silicium amorphe hydrogéné à partir des mesures de photoconductivité », Thèse de Magister, Université d'Oran, Algérie, (2000).
- [29] H. G. Grimeiss and L. A. Ledebor., *J. of Appl. Phys.*, vol 46, N° 5, p.2115, (1975).
- [30] M. Vanecek, J. Stuchlik and A. Triska., *Solid. Stat. Com.*, vol 39, p.1199, (1981).

## Références

---

## Références

---