

**Université de Montréal**

**Transport des charges dans le silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H)**

**par**

**Chen Wen Chao**

**Département de physique**

**Faculté des arts et des sciences**

**Thèse présentée à la Faculté des études supérieures  
en vue de l'obtention du grade de  
Philosophiæ Doctor (Ph.D.)  
en physique**

**septembre, 1998**

**©Chen Wen Chao, 1998**



**Université de Montréal**  
**Faculté des études supérieures**

**Cette thèse intitulée:**

**Transport des charges dans le silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H)**

**présentée par:**

**Chen Wen Chao**

**a été évaluée par un jury composé des personnes suivantes:**

<b>Yves Lépine,</b>	<b>président-rapporteur</b>
<b>Louis-André Hamel,</b>	<b>directeur de recherche</b>
<b>Arthur Yelon,</b>	<b>co-directeur</b>
<b>Romain Maciejko,</b>	<b>membre du jury</b>
<b>John Gunn,</b>	<b>représentant du doyen</b>
<b>Eric A. Schiff,</b>	<b>examineur externe</b>

**Thèse acceptée le: 20 avril 1999**

## Sommaire

Le transport par piégeage multiple (MT) des porteurs de charge dans une queue de bande exponentielle est étudié analytiquement et par simulation Monte Carlo (MC) dans le silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H). Cette étude traite surtout des mécanismes fondamentaux du transport par piégeage multiple et de la modélisation de différents types d'expériences. Nous étudions d'abord la formation du signal dans un détecteur de particules ionisantes, constitué d'une diode p-i-n au a-Si:H, en simulant la dérive des porteurs créés par une particule chargée. Le problème est similaire à l'étude de la mobilité de dérive par mesure de temps de vol (TOF) sauf qu'ici, la tension appliquée est continue, menant à un champ électrique non uniforme, et que les porteurs sont générés sur toute la trajectoire de la particule, plutôt qu'en surface. Une solution analytique est donnée pour la densité de porteurs libres  $n(x, t)$  pour un paramètre de dispersion  $0 < \alpha < 1$ . Dans le cas  $\alpha = 1/2$ , le courant transitoire  $I(t)$  et la charge induite  $Q(t)$  ont une solution analytique. Ces résultats sont comparés aux simulations Monte Carlo. Nous avons également montré que les calculs Monte Carlo reproduisent les signaux générés par le passage d'une particule chargée dans un détecteur p-i-n au a-Si:H.

Nous modélisons surtout l'expérience du temps de vol par simulation Monte Carlo. Nous analysons le transport par piégeage multiple standard incluant différents effets physiques en variant la tension appliquée et la température. Nous calculons principalement le courant induit, la charge induite, la distribution de porteurs libres  $n(x, t)$  et piégés  $n_i(x, t, E)$ . On extrait des courants induits, les paramètres de dispersion  $\alpha_1$  et  $\alpha_2$ , respectivement avant et après le temps de transit, et la mobilité microscopique  $\mu_0$ . Pour le modèle MT stan-

dard à basse température, les calculs MC confirment que les calculs analytiques ( $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha = T/T_0$ , où  $T_0$  est la température caractéristique) sont corrects, mais montrent que, à partir de  $T > 0.6 T_0$ , cette relation simple n'est plus valide. Les simulations montrent aussi que  $\alpha_1$  tend asymptotiquement vers 1 et que  $\alpha_2$  augmente plus rapidement que  $T/T_0$ , tel qu'observé expérimentalement. Cependant, ces calculs ne peuvent pas expliquer le comportement de  $\alpha_1$  et  $\alpha_2$  à basse température, ni de  $\alpha_2$  à haute température. Ces résultats nous amènent à proposer d'inclure l'effet Meyer-Neldel (MN) dans le modèle MT standard, afin de mieux décrire l'expérience de TOF. De plus, en comparant nos simulations aux mesures de mobilité de dérive, nous obtenons une mobilité microscopique  $\mu_0 = 4 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$  pour les électrons, contrairement à la valeur  $\mu_0 = 13 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$  donnée dans la littérature, et une valeur de  $\mu_0 = 0.5 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$  pour les trous.

Nous avons aussi proposé un modèle de transport qui inclut le dépiégeage assisté par le champ afin d'expliquer les expériences TOF récentes en présence de haut champ. Nous trouvons que les paramètres de dispersion  $\alpha_1$  et  $\alpha_2$ , qui dépendent de la température et du champ, et la mobilité de dérive, augmentent d'au moins un ordre de grandeur comme observé expérimentalement. Nous avons aussi obtenu une expression de la température effective,  $T_{eff}$ , à partir de la distribution des porteurs dans les pièges.

Nous analysons aussi l'impact de la relaxation rapide dans les pièges en reformulant le modèle de transport par piégeage multiple. Ce nouveau modèle prédit une mobilité microscopique 5 à 15 fois plus grande que celle mentionnée ci-haut, dépendant de l'énergie de relaxation, ce qui permet de justifier l'absence de recombinaison geminée dans les expériences de photoluminescence (PL) à la température de la pièce. Notre modèle est donc consistant, à la fois, avec les mesures de TOF et PL, ce qui constitue une première.



*Mots-Clés*

**Semi-conducteurs, amorphes, a-Si:H, transport, Monte Carlo, haut champ, relaxation**

## Table des matières

Sommaire . . . . .	iii
Table des matières . . . . .	vi
Liste des figures . . . . .	ix
Remerciements . . . . .	xi
Introduction . . . . .	1
Chapitre 1: Expérience de temps de vol et théorie du transport par piégeage multiple . . . . .	6
1.1 Description de l'expérience de temps de vol (TOF) . . . . .	6
1.2 Modèle de la densité d'états (DOS) . . . . .	8
1.3 Transport électronique dans les semi-conducteurs amorphes . . . . .	10
1.3.1 Formulation mathématique du problème . . . . .	10
1.3.1.1 Conduction par sauts (hopping) . . . . .	10
1.3.1.2 Piégeage multiple (MT) . . . . .	11
1.3.2 Modèle intuitif (TROC) . . . . .	14
1.4 Méthode Monte Carlo . . . . .	17
1.4.1 Introduction . . . . .	17

1.4.2	Modèle de la simulation . . . . .	19
Chapitre 2: Calculs analytiques et Monte Carlo du transport par piégeage multiple standard . . . . .		
		25
2.1	Modélisation des détecteurs de particules . . . . .	26
2.1.1	Introduction au problème . . . . .	26
2.2	Choix du champ électrique . . . . .	26
2.2.1	Article I: Calcul analytique du transport des charges dans le a-Si:H . . . . .	27
2.2.2	Article II: Charge transport in a-Si:H detectors: Comparison of analytical and Monte Carlo simulations . . . . .	38
2.2.3	Comparaison entre les calculs analytiques et Monte Carlo: Suite . . . . .	44
2.3	Modélisation de l'expérience de temps de vol (TOF) . . . . .	44
2.3.1	Introduction . . . . .	44
2.3.2	Article III: Monte Carlo simulation of transient currents in a-Si:H . . . . .	46
2.4	Conclusion . . . . .	53
Chapitre 3: Simulation MC de l'effet Meyer-Neldel dans le a-Si:H . . . . .		
		54
3.1	Article IV: Monte Carlo simulation of Meyer-Neldel effect on carrier time-of-flight in a-Si:H . . . . .	56
3.2	Conclusion . . . . .	64

Chapitre 4: Transport des charges à haut champ . . . . .	65
4.1 Article V: Multiple-trapping model with field-dependent effect on carrier time of flight in a-Si:H . . . . .	67
4.2 Résultat complémentaire . . . . .	98
4.3 Conclusion . . . . .	99
Chapitre 5: Relaxation rapide dans les pièges . . . . .	102
5.1 Article VI: Rapid relaxation and electronic properties of a-Si:H .	102
Conclusion . . . . .	109
Bibliographie . . . . .	112

## Liste des figures

1	Expérience de temps de vol. . . . .	6
2	Signaux générés par ordinateur qui simulent l'expérience TOF. (a) Courant induit et (b) charge induite. . . . .	8
3	Profil typique de la DOS. . . . .	9
4	(a) Modèle par sauts et (b) modèle MT. . . . .	11
5	Distribution de la densité d'états et évolution de la densité des porteurs piégés dans le modèle TROK. . . . .	15
6	Problème simple de transport: Diffusion dans un réseau cristallin en une dimension. . . . .	17
7	Évolution de la distribution de porteurs $n(x,t)$ générés en $x = 0$ au temps $t$ . (a) Pour deux valeurs de $\Delta x$ et un temps fixe à $t = t_1$ ( $M = 640$ ). (b) Pour deux valeurs du temps $t = t_0$ ( $M = 64$ ) et $t = t_1$ ( $M = 640$ ) et un $\Delta x$ fixe. . . . .	19
8	Simulation MC (a) du courant induit et (b) de la charge induite et de la charge collectée avec injection d'un porteur. . . . .	23
9	(a) Courant induit obtenu par simulation MC pour un champ électrique uniforme. La numérotation ① à ④ indique différentes discrétisations de la DOS exponentielle utilisée comme montrée à la figure (b). Nous utilisons $\Delta E = 0.0025\text{eV}$ . . . . .	24

- 10 Ce schéma montre le passage d'une particule ionisante dans un détecteur, créant ainsi des paires électron-trou uniformément le long de la trajectoire de la particule. Les trous  $\oplus$  circulent vers la gauche et les électrons  $\ominus$  vers la droite. . . . . 27
- 11 Comparaison entre les calculs analytique (ligne pointillée) et Monte Carlo (ligne pleine) pour le courant induit,  $I(t)$ , pour un champ électrique linéaire. L'éq. (34) de l'article I a été utilisée pour le calcul analytique. Nous avons utilisé les mêmes paramètres que dans le tableau I de l'article I. Nous avons pris  $\rho = 7 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ . 45
- 12 Préfacteur de fréquence ( $\nu_0$ ) obtenu par différentes méthodes expérimentales en fonction de l'énergie d'activation ( $E_a$ ). . . . . 56
- 13 Courant induit simulé pour le modèle ETM à  $T = 50 \text{ K}$  (ligne pleine),  $T = 100 \text{ K}$  (ligne avec traits tirés),  $T = 180 \text{ K}$  (ligne pointillée) et  $T = 220 \text{ K}$  (ligne avec traits tirés et pointillés) avec  $a = 8 \text{ \AA}$ ,  $F = 450 \text{ kV/cm}$ , et  $L = 10 \mu\text{m}$ . . . . . 98
- 14 Paramètres de dispersion en fonction de la température et du champ électrique calculés avec le modèle proposé par Esipov [8] (modèle ETM dans l'article V) pour  $a = 8 \text{ \AA}$  (a) avant le temps de transit ( $\alpha_1$ ) et (b) après le temps de transit ( $\alpha_2$ ) pour différents champs électriques tel qu'indiqué dans la légende. Les droites pleines représentent  $\alpha = T/T_0$ ; les lignes horizontales sont calculées avec  $\alpha = eaF/2KT$  avec les paramètres mentionnés ci-haut. . . . 101

## Remerciements

J'aimerais remercier mon directeur de thèse, Louis-André Hamel, pour m'avoir accueilli au Laboratoire de physique nucléaire (maintenant Laboratoire René-J.-A. Lévesque), au début comme étudiant de maîtrise et ensuite comme étudiant au doctorat. J'aimerais également remercier Arthur Yelon pour avoir accepté la codirection de cette thèse. Les nombreuses et longues discussions que nous avons eues m'ont beaucoup appris sur le silicium amorphe. Je tiens à souligner leur support financier durant toute la durée de ma thèse.

J'ai beaucoup apprécié les discussions avec Mathieu Kemp sur le silicium amorphe et surtout sur la relaxation des porteurs dans les pièges et la photoluminescence, de même que ses conseils amicaux.

J'aimerais également remercier le personnel du service d'informatique et le personnel administratif du Laboratoire de physique nucléaire pour les aides qu'ils ont rendus.

## Introduction

Le transport électronique dans les semi-conducteurs amorphes est un sujet complexe et en même temps très intéressant, tant au point de vue théorique qu'expérimental, à cause de la structure amorphe des réseaux [1, 2]. Le désordre modifie profondément la signification du réseau réciproque et du vecteur d'onde  $\vec{k}$ . Il y a absence d'un réseau réciproque et  $\vec{k}$  n'est plus un bon nombre quantique. Par conséquent, les théories utilisant le théorème de Bloch (symétrie de translation) ne s'appliquent plus pour simplifier les calculs mathématiques des excitations des électrons et phonons. Le désordre occasionne également une densité des états (DOS) localisés dans le gap,  $g(E)$ , continue au lieu d'une DOS discrète comme dans les semi-conducteurs cristallins [1, 2, 3]. Pour décrire le transport dans les semi-conducteurs amorphes,  $g(E)$  est une quantité physique essentielle sur laquelle les modèles physiques de transport doivent être basés [4].

Les porteurs de charges générés interagissent alors fortement avec la queue de bande. Dans ce cas, nous distinguons deux sortes de transport; (i) si les porteurs piègent et dépiègent entre la bande et la queue de bande, c'est du transport par piégeage multiple (MT) et (ii) si les porteurs sautent spatialement dans la queue de bande entre différents états d'énergie, c'est du transport par saut ("hopping"). Pour décrire le problème de transport à bas champ, il y a eu consensus sur le fait qu'à basse température ( $T < 100$  K), le transport est dominé par saut dans la queue de bande et qu'à haute température, le transport est dominé par piégeage multiple entre la bande et la queue de bande [5]. Par contre, à haut champ, le problème de transport est différent; la vraie température dans ce cas pourrait être remplacée par une température effective,  $T_{eff}$ . À  $T = 0$ , la prédiction de la température effective pour le modèle par saut est similaire au modèle MT. Dans



ce cas, il est alors possible d'utiliser le modèle MT à basse température.

Nous nous intéressons surtout aux données expérimentales du temps de vol dans le silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) pour différents champs et températures. Les données expérimentales montrent clairement l'existence de deux régimes de transport: l'un à bas champ et l'autre à haut champ. Ces deux régimes de transport seront étudiés indépendamment dans cette thèse. Le a-Si:H est un matériau important pour la fabrication des dispositifs à très grande échelle (par exemple les cellules solaires) du fait qu'il est moins coûteux et plus facile à fabriquer comparativement aux semi-conducteurs cristallins. On trouve de plus en plus des cellules solaires avec efficacité de conversion plus grande que 14% dans le a-Si:H [3]. Ce qui veut dire que la mobilité électronique devrait être importante. Le a-Si:H est aussi un bon candidat pour les applications comme détecteur de particules en physique des hautes énergies [6] à cause de sa haute résistance à la radiation (structure amorphe). Le seul problème est que la collecte de charge est mauvaise à cause du piégeage de porteurs (surtout des trous) dans le détecteur de particules. Pour améliorer la collecte de charge, il est d'abord nécessaire de comprendre la formation du signal dans les détecteurs au a-Si:H qui sont soumis à des particules énergétiques et opérés à la température de la pièce. La particule énergétique crée des paires électron-trou uniformément tout au long de sa trajectoire dans le détecteur. Les signaux, qui contiennent les contributions des électrons et des trous, sont alors mesurés à l'extérieur du circuit par un oscilloscope de haute résolution. À partir de ces signaux, il est possible d'extraire des informations sur les aspects pratiques du problème, par exemple le nombre de porteurs créés et l'efficacité quantique, en comparant simplement les calculs aux signaux mesurés. Nous commençons par chercher une solution analytique et nous la vérifions ensuite avec les calculs Monte Carlo (MC). En général, il arrive souvent en physique que les problèmes posés ne possèdent pas de solution analytique ou que les solutions analytiques sans approximations soient rares. Dans ce cas, la méthode Monte Carlo est alors utile pour résoudre le

problème et permet de mieux comprendre les processus de transport dans le a-Si:H. Il existe aussi des méthodes numériques, utilisant les méthodes d'inversion des matrices, qui permettent de résoudre les équations de transport dans le a-Si:H [7]. La fiabilité de la méthode est limitée par les conditions initiales du problème considéré, contrairement à la méthode MC qui dépend seulement du nombre de porteurs injectés (statistique). Le choix de la méthode MC est justifié par le fait qu'elle est très proche du modèle physique choisi (une méthode "visuelle" dans le sens où le porteur peut être suivi pas à pas) et très facile à modifier pour inclure d'autres effets physiques.

Une autre motivation importante dans la présente recherche est la modélisation de l'expérience de temps de vol dans le a-Si:H par simulation Monte Carlo en vue d'étudier les mécanismes fondamentaux du transport de charge. En principe, les modèles de transport permettent d'extraire les paramètres physiques d'un matériau quelconque. Ces paramètres nous renseignent sur les propriétés électroniques telles que la mobilité de dérive et les caractéristiques de la densité d'états [4]. Les paramètres du matériau obtenus dépendent du modèle physique utilisé. Un bon modèle, qui reproduit les données expérimentales, a comme critère principal de posséder le moins de paramètres ajustables possibles. Nous adoptons donc cette optique dans cette thèse. Dans les cas où il n'y a pas de données expérimentales, parfois à cause de la résolution des appareils expérimentaux, la simulation MC permet de prédire des valeurs pour les paramètres de dispersion et de mobilité de dérive.

Cette thèse est composée d'articles et est organisée comme suit: Dans le premier chapitre nous décrivons l'expérience du temps de vol et la théorie standard de transport par piégeage multiple. Nous y décrivons également la méthode Monte Carlo qui permet de résoudre les problèmes de transport et nous donnons quelques résultats simples et intuitifs résultant de la simulation MC.

Dans le deuxième chapitre, nous traitons le transport et la collecte de charge

dans un détecteur de particules au a-Si:H. Nous présentons alors un premier article sur les calculs analytiques du transport de charges, ainsi qu'un deuxième article sur la comparaison entre les calculs analytiques et Monte Carlo. Nous comparerons alors les calculs aux mesures expérimentales faites sur des particules ionisantes afin de comprendre la formation du signal dans un détecteur de particules au a-Si:H. Nous montrons ensuite par simulation MC (article III) que le modèle standard de transport n'est pas suffisant pour reproduire les données expérimentales des paramètres de dispersion,  $\alpha_1$  et  $\alpha_2$ , respectivement, avant et après le temps de transit.

Au chapitre 3 dans l'article IV, nous montrons que l'accord entre les calculs MC et les données expérimentales devient bien meilleur lorsqu'on inclut l'effet Meyer-Neldel (MN) dans le taux de dépiégeage. Il est à noter que l'effet MN introduit un seul nouveau paramètre ajustable.

Nous étudions ensuite au chapitre 4 (article V) deux modèles de transport à haut champ. Nous montrons, à l'aide des résultats de la simulation MC, que le premier modèle qui a été proposé par Esipov [8] donne des résultats physiquement irraisonnables, intuitivement incorrects et ne pouvant pas également reproduire les données expérimentales récentes de Gu et al. [9] avec des paramètres physiquement raisonnables. Nous proposons alors un modèle de dépiégeage assisté par le champ qui combine la température et le champ. Nous trouvons une température effective pour ce modèle à partir de la distribution des porteurs piégés. Ce nouveau modèle reproduit les données expérimentales de mobilité de dérive des électrons avec une valeur unique de longueur de localisation  $a = 8 \text{ \AA}$ . Cependant ce nouveau modèle ne peut pas reproduire quantitativement la dépendance en température et du champ des  $\alpha$  comme dans le cas à bas champ. Pour les trous, ce nouveau modèle prédit correctement le comportement des  $\alpha$  avec  $a = 12 \text{ \AA}$ .

Au chapitre 5, nous présentons l'article VI qui analyse l'impact de la relaxation rapide dans les pièges en reformulant le modèle de transport par piégeage

multiple. Ce nouveau modèle prédit une mobilité microscopique 5 à 15 fois plus grande que la mobilité obtenue dans l'article III dépendant de l'énergie de relaxation, ce qui permet de justifier l'absence de recombinaison geminée dans les expériences de photoluminescence (PL) à la température de la pièce. Notre modèle est ainsi consistant, à la fois, avec les mesures de TOF et PL, ce qui constitue une première.

Finalement, nous concluons dans le dernier chapitre de cette thèse en donnant quelques propositions de problèmes intéressants ainsi que certaines directions de recherche, faisant suite à nos travaux.

# Chapitre 1

## Expérience de temps de vol et théorie du transport par piégeage multiple

Ce chapitre décrit la méthodologie utilisée dans cette thèse. Nous introduisons d'abord l'expérience de temps de vol, ensuite la théorie standard de transport par piégeage multiple, et finalement la méthode Monte Carlo qui nous permet de résoudre les équations de transport.

### 1.1 Description de l'expérience de temps de vol (TOF)

Les informations sur les propriétés électroniques des matériaux à basse mobilité sont généralement obtenues par l'expérience de temps de vol (Time-of-flight ou TOF), dont le schéma de l'expérience est montré à la figure 1. Cette technique expérimentale a été développée par Spear [10] à la fin des années 60. On illumine

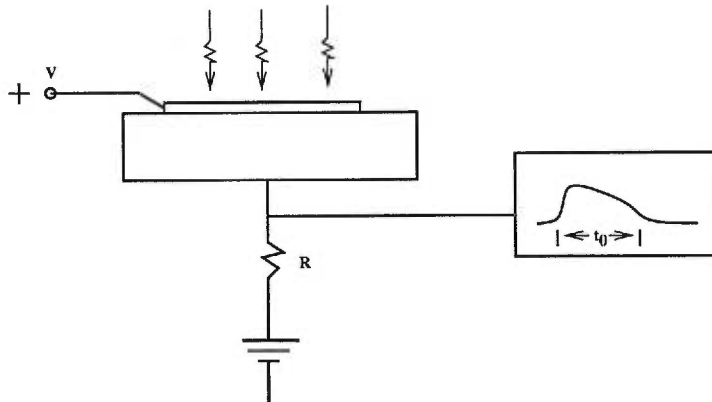


Figure 1. Expérience de temps de vol.

un contact avec un faisceau lumineux (photons d'énergie  $E = \hbar\omega$ ) pendant un temps très court pour créer des porteurs juste sous le contact, soit en  $x = 0$ . Les porteurs dérivent dans le champ et produisent un courant dans le circuit externe. L'expérience de TOF permet également de mesurer le temps de transit,  $t_T$ . Il est à noter que le champ électrique dans l'échantillon doit être gardé constant dans une telle expérience pour éviter des effets indésirés, i.e apparition d'une charge d'espace. L'électron (ou trou) va être piégé par les états localisés, puis, sous l'effet de l'excitation thermique, l'électron (ou trou) retourne dans la bande. Le processus de piégeage et dépiégeage se répète jusqu'au moment de la collecte des charges. Dans plusieurs matériaux, on a observé une loi de puissance décroissante du courant

$$I(t) \sim \begin{cases} (\nu_0 t)^{-1+\alpha_1} & t \lesssim t_T \\ (\nu_0 t)^{-1-\alpha_2} & t \gtrsim t_T \end{cases} . \quad (1.1)$$

Dans l'éq. (1.1),  $\nu_0$  représente une fréquence d'essai, et  $\alpha_1$  et  $\alpha_2$  sont les paramètres de dispersion avant et après  $t_T$  respectivement. Pour bien observer les pentes du courant induit et  $t_T$  dans les expériences de TOF, il faut tracer les courbes du courant induit en échelle Log-Log. La Fig. 2 montre le courant induit et la charge induite simulés par ordinateur. Les lignes pleines représentent les deux pentes  $-1 + \alpha_1$  et  $-1 - \alpha_2$  et le point d'intersection des deux pentes est représenté par la ligne verticale. L'intersection définit le temps de transit. Cette définition de  $t_T$  n'est pas unique, mais elle correspond néanmoins à la définition utilisée par plusieurs expérimentateurs [11]. Dès qu'on extrait  $t_T$ , la mobilité de dérive  $\mu_d$  s'obtient par:

$$\mu_d = L/t_T F , \quad (1.2)$$

où  $L$  est la longueur de l'échantillon et  $F$  est le champ électrique.

Ce genre d'expérience permet d'extraire plusieurs paramètres intrinsèques au matériau tel  $\mu_0$ ,  $\nu_0$ ,  $\alpha_1$  et  $\alpha_2$ , et  $\mu_d$ . Au chapitre 3, nous allons comparer les calculs de  $\alpha_1$  et  $\alpha_2$ , et  $\mu_d$  aux données expérimentales dans le a-Si:H pour différents champs électriques et températures. Il est à noter qu'il est très difficile de prédire

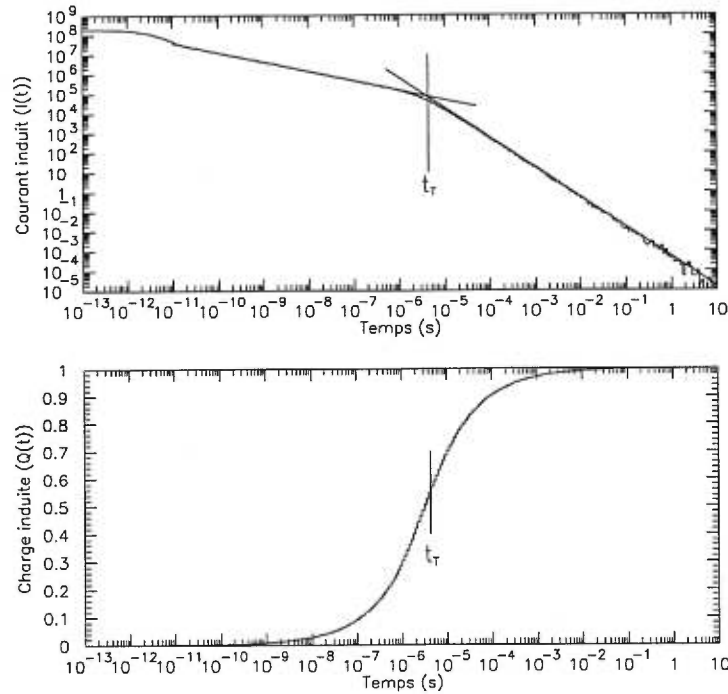


Figure 2. Signaux g n r s par ordinateur qui simulent l'exp rience TOF. (a) Courant induit et (b) charge induite.

correctement les  $\alpha_1$  et  $\alpha_2$  dans l' q. (1.1), du fait qu'ils d pendent fortement du choix de la densit  d' tats localis s et ainsi que d'autres m canismes.

## 1.2 Mod le de la densit  d' tats (DOS)

Dans ce qui suit, nous supposons une densit  d' tats (DOS) qui d cro t exponentiellement dans une queue de bande:

$$g(E) = g_0 \exp(-E/kT_0), \quad (1.3)$$

o   $k$  est la constante de Boltzmann,  $T_0$  est la temp rature caract ristique et  $E$  est l' nergie de l' tat localis . Pour simplifier les calculs, nous avons fix  le seuil de mobilit    l' nergie z ro pour les  lectrons et les trous de mani re

indépendante. Cette hypothèse de la densité d'états (DOS) est justifiée par plusieurs évidences expérimentales. Une première évidence expérimentale a été obtenue par Tiedje et al. [12] pour l'expérience de TOF et par Orenstein et Kastner [13] pour l'expérience de photo-courant transitoire dans le a-Si:H. Cependant, les résultats et analyses de Marshall et al. [14] ne sont pas en accord avec ces derniers. Winer et al. [15] et Aljishi et al. [16] ont aussi obtenu une queue de bande exponentielle par une autre méthode de mesure directe ("Total yield photoelectron spectroscopy" combiné avec la méthode de "Kelvin probe") cependant trop complexe pour être décrite ici (voir Réfs. [15] et [16] pour les détails). Cette expérience supporte les résultats de Tiedje et al. et Orenstein et Kastner. Plus récemment, Dong et Drabold ont utilisé la méthode de l'approximation de liaison forte (tight-binding) sur un réseau de 4096 atomes de Si et ont montré que la queue de bande est effectivement exponentielle comme dans l'éq. (1.3). La Fig. 3 montre l'allure des queues de bande exponentielles et les bosses dans les états localisés profonds qui sont dues aux défauts. Dans l'expérience de TOF, le

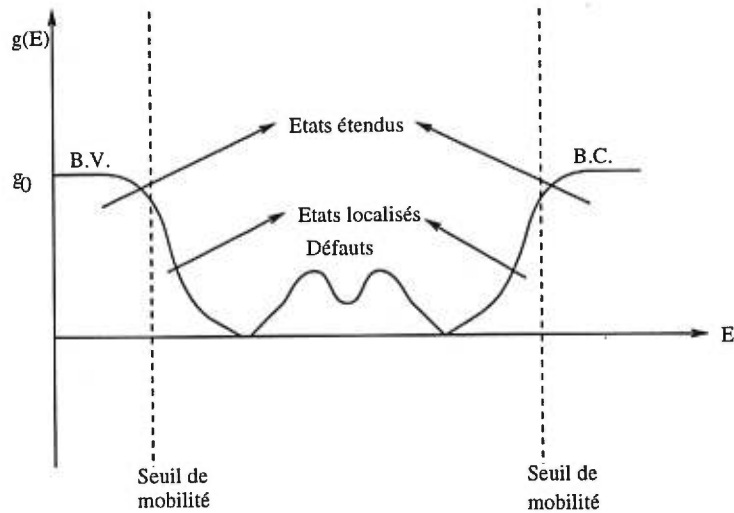


Figure 3. Profil typique de la DOS.

transport est essentiellement dominé par la queue de bande du fait que le temps de vie du porteur est court (ordre  $10^{-11}$  s). La contribution due aux défauts est négligeable comparée à la queue de bande à cause d'un long temps caractéristique



(de l'ordre de la seconde) [3]. Cette hypothèse de DOS sera aussi vérifiée à partir des données expérimentales de TOF au chapitre 3.

### 1.3 Transport électronique dans les semi-conducteurs amorphes

Il existe deux mécanismes fondamentaux de transport pouvant expliquer le transport dispersif observé (dans la forme du courant qui ressemble à l'équation 1.1) dans les semi-conducteurs amorphes. Dans le premier cas, le transport des porteurs se fait par sauts (modèle "hopping") dans les états localisés; les porteurs se promènent d'un site  $i$  à un site  $j$  avec un taux  $\nu_{ij}$ , où  $i$  est le site où se trouve le porteur, et  $j$  est le site vers lequel le porteur saute. Dans le second cas, le transport se fait entre la bande et les états localisés; c'est le modèle de piégeage multiple (MT); les porteurs sont capturés avec un taux  $K_c^i$  et réémis avec un taux  $K_r^i$ . La Fig. 4 a) montre le modèle "hopping" tandis que la Fig. 4 b) montre le modèle par piégeage multiple. À basse température, le transport par sauts est dominant tandis qu'à haute température le transport est dominé par le piégeage multiple ( $T > 100K$ ) [5].

#### 1.3.1 Formulation mathématique du problème

Cette section permettra de discuter et comparer le modèle par sauts avec le modèle par piégeage multiple.

##### 1.3.1.1 Conduction par sauts (hopping)

Imaginons un site  $i$ , dans les états localisés, à la position  $r_i$  avec une énergie  $E_i$  et un site  $j$  à la position  $r_j$  avec une énergie  $E_j$ . L'occupation des sites  $i$  et  $j$  est dénotée respectivement par  $n_i$  et  $n_j$ . Il s'agit maintenant de compter le nombre de porteurs qui entrent et qui sortent du site  $i$ . Les porteurs passent du site  $i$

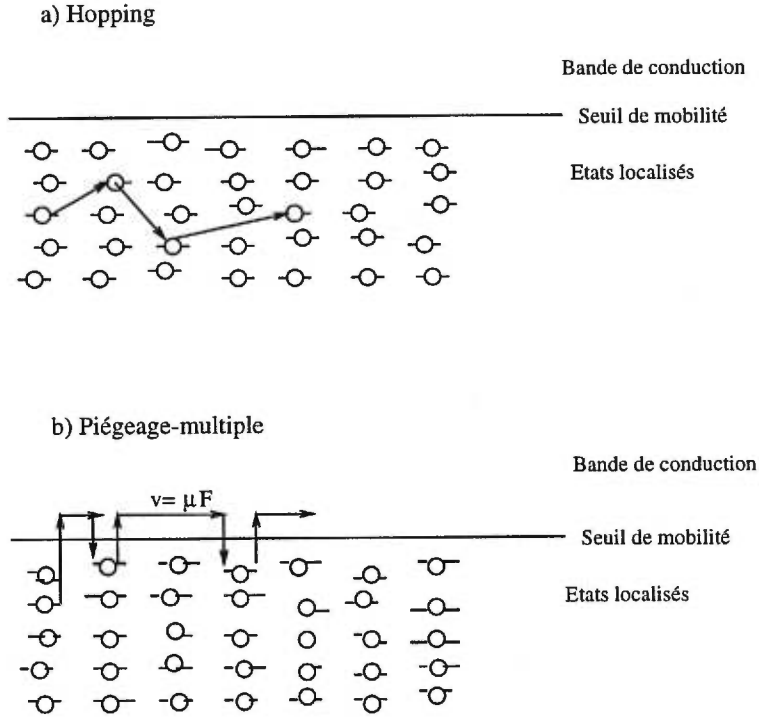


Figure 4. (a) Modèle par sauts et (b) modèle MT.

vers le site  $j$  avec un taux  $\nu_{ij}$ . Pour le “hopping” standard,  $\nu_{ij}$  s’écrit:

$$\nu_{ij} = \nu_0 \begin{cases} \exp(-2|r_{ij}|/a) \exp(-\Delta E_{ij}/kT) & \Delta E_{ij} > 0 \\ \exp(-2|r_{ij}|/a) & \Delta E_{ij} < 0 \end{cases} \quad (1.4)$$

où  $\Delta E_{ij} = E_j - E_i - eF(x_j - x_i)$  est la différence entre l’énergie des sites  $i$  et  $j$  en présence du champ électrique  $F$ ,  $|r_{ij}| = |r_j - r_i|$  est la distance entre les sites  $i$  et  $j$ ,  $T$  est la température, et  $a$  est la longueur de localisation du porteur. Quand  $\Delta E_{ij} > 0$ , le porteur saute vers le haut et tandis que si  $\Delta E_{ij} < 0$  le porteur saute vers le bas en énergie. L’évolution du site  $i$  obéit alors à l’équation maîtresse [18]:

$$\frac{dn_i}{dt} = \sum_j \nu_{ij} n_j - \sum_j \nu_{ji} n_i. \quad (1.5)$$

### 1.3.1.2 Piégeage multiple (MT)

Le modèle par piégeage multiple est conceptuellement différent du modèle de conduction par sauts. Le transport de charge se fait dans la bande sous l’influence

du champ électrique et le piégeage des porteurs se produit entre la bande et les pièges jusqu'à la collecte de charge. La mobilité de dérive est environ un ordre de grandeur plus grand par rapport à celle obtenue par le modèle de conduction par sauts. La différence est surtout accentuée dans les taux de sauts, le "hopping" étant un système qui tient compte explicitement des positions de porteurs (Eq. (1.4)). Par contre, dans le modèle piégeage multiple, les taux de sauts ne tient pas compte d'explicitement des positions de porteurs.

Le modèle MT, essentiellement développé par Schmidlin [19, 20] et Noolandi [21] indépendamment, est basé sur l'idée originale de Tefft [22]. Dans ce qui suit, on résume les grandes lignes du modèle. Les porteurs excités obéissent à l'équation de piégeage multiple

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \sum_{i=1}^{\infty} (K_r^i n_i - K_c^i n) - \frac{\partial f_p}{\partial x} + g(x, t) \quad (1.6)$$

et

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = K_c^i n - K_r^i n_i, \quad (1.7)$$

où  $n(x, t)$  et  $n_i(x, t)$  sont respectivement les densités de population locales dans la bande et dans l'état localisé  $i$ , et  $f_p = \mu_0 F n - D \frac{\partial n}{\partial x}$  est le flux local des électrons ou trous mobiles avec la constante de diffusion  $D$ .  $K_c^i$  et  $K_r^i$  sont respectivement les taux de capture et de réémission pour l'état localisé  $i$ ; ces deux paramètres fondamentaux contiennent toute la physique du transport;  $g(x, t)$  est une fonction de génération-recombinaison. On néglige normalement le terme de diffusion et on ne considère que le cas où l'excitation de porteurs libres par la lumière est très absorbée, soit  $g(x, t) = \eta' \delta(x - 0^+) \delta(t - 0^+)$ , ainsi qu'un champ électrique uniforme. Noolandi et Schmidlin ont obtenu le courant induit dans le domaine de Laplace

$$\tilde{I}(s) = \frac{e\eta' (1 - \exp(-a(s)t_0))}{t_0 a(s)}, \quad (1.8)$$

où  $t_0 = \frac{L}{\mu_0 F}$  est le temps de transit sans piégeage,  $\eta'$  est l'efficacité de la photogénération,  $s$  est la variable de la Laplace, et

$$a(s)t_0 = s \left( t_0 + \sum_{i=1}^{\infty} \frac{M_i}{s + K_r^i} \right) \quad (1.9)$$

avec  $M_i = K_c^i t_0$  représentant le nombre moyen de fois qu'un porteur est capturé par un piège. On note que la difficulté majeure est de calculer la transformée inverse de Laplace de l'éq. (1.8). L'équivalence entre le modèle MT et celui de "hopping" a été démontrée par Schmidlin [19] et Noolandi [23] en comparant le résultat  $\tilde{I}(s)$  obtenu par les deux méthodes. Cette équivalence en forme de courant est aussi confirmée par Silver et al. [24] par simulation Monte Carlo. Il est à noter que les paramètres physiques extraits à partir des données expérimentales seront différents pour ces deux modèles avec les mêmes valeurs de  $L$ ,  $T$  et  $V$ .

Pour les applications au a-Si:H, Tiedje [11] a repris les calculs de Schmidlin [19] et Noolandi [21], parce que les trous sont dispersifs dans la plage de température accessible expérimentalement et surtout à la température de la pièce, en supposant une queue de bande décroissant exponentiellement (eq. (1.3)) et un  $K_r$  donné par

$$K_r = \nu_0 \exp(-E/kT). \quad (1.10)$$

Dans ce cas, le bilan détaillé impose que le taux de capture soit:

$$K_c = \nu_0 \exp(-E/kT_0)/kT. \quad (1.11)$$

Notons que la physique est contenue dans  $K_r$  et  $K_c$  et que des nouveaux effets seront introduits en modifiant ces deux paramètres fondamentaux. Par exemple, nous introduirons l'effet Meyer-Neldel au chapitre 3 pour mieux expliquer les  $\alpha$  obtenus expérimentalement, l'effet à haut champ au chapitre 4, et finalement la relaxation des porteurs piégés dans les états localisés au chapitre 5. Pour les taux donnés ici, Tiedje a obtenu une solution asymptotique du courant induit avant et après  $t_T$  [11]

$$I(t \ll t_T) = e\eta' \left( \frac{\mu_0 F}{L} \right) \Gamma(1 - \alpha) \left( \frac{\sin^2(\alpha\pi)}{\pi^2} \right) (\nu_0 t)^{-1+\alpha} \quad (1.12)$$

$$I(t \gg t_T) = e\eta' \left( \frac{\mu_0 F}{L} \right) \frac{\Gamma(1 + \alpha)}{2} \left( \frac{\nu_0 L}{\mu_0 F} \right)^2 (\nu_0 t)^{-1-\alpha} \quad (1.13)$$

où  $\alpha = \frac{T}{T_0}$  est le paramètre de dispersion;  $T_0$  est de l'ordre de 310K pour les électrons et 490K pour les trous. Il est important de noter ici que la théorie

prédit une loi de puissance comme dans l'éq. (1.1) mais que  $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$  contrairement à ce qui est observé expérimentalement. On note aussi que Rudenko et Arkhipov [25] ont obtenu auparavant des résultats similaires avec cependant des approximations dans leurs calculs. La validité des calculs approximatifs sera discutée lorsque nous comparerons ces calculs aux simulations Monte Carlo dans l'article III au chapitre 3. Dans l'éq. (1.13), nous avons corrigé la première équation en ajoutant un facteur  $1/\pi$ . Sans ce facteur, la charge induite  $Q(t)$  n'est pas normalisée correctement et le temps de transit manque un facteur de  $\pi^{1/2\alpha}$ . La nouvelle expression corrigée du temps de transit est:

$$t_T = (1/\omega_0)(\omega_0 L/\mu_0 F)^{1/\alpha}(\pi\alpha\Gamma(\alpha)^2/2\sin(\alpha\pi))^{1/2\alpha}. \quad (1.14)$$

Au chapitre 2, nous généraliserons le modèle de piégeage multiple en introduisant la génération uniforme de porteurs, ainsi qu'un champ électrique linéaire pour modéliser les signaux obtenus dans un détecteur de particules au a-Si:H. Nous comparerons en détails, pour le cas particulier où  $\alpha = \frac{1}{2}$  qui possède une solution analytique exacte, les calculs analytiques et Monte Carlo. Nous montrerons ainsi que le modèle MT modifié est normalisé et qu'il reproduit raisonnablement les signaux expérimentaux. Ceci constitue une nette amélioration par rapport aux travaux précédents sur la modélisation des détecteurs de particules.

### 1.3.2 Modèle intuitif (TROK)

Le modèle TROK a été développé indépendamment dans les années '80 par Tiedje et Rose [26] et par Orenstein et Kasner [13] pour expliquer respectivement les données expérimentales de TOF dans le a-Si:H et les photo-courants transitoires dans le a-As<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>. C'est un modèle de piégeage multiple intuitif basé sur l'idée de thermalisation de l'énergie de démarcation  $E_d(t)$  des porteurs dans les états localisés.

Pour un taux de dépiégeage décrit par l'éq. (1.10), les porteurs s'enfoncent

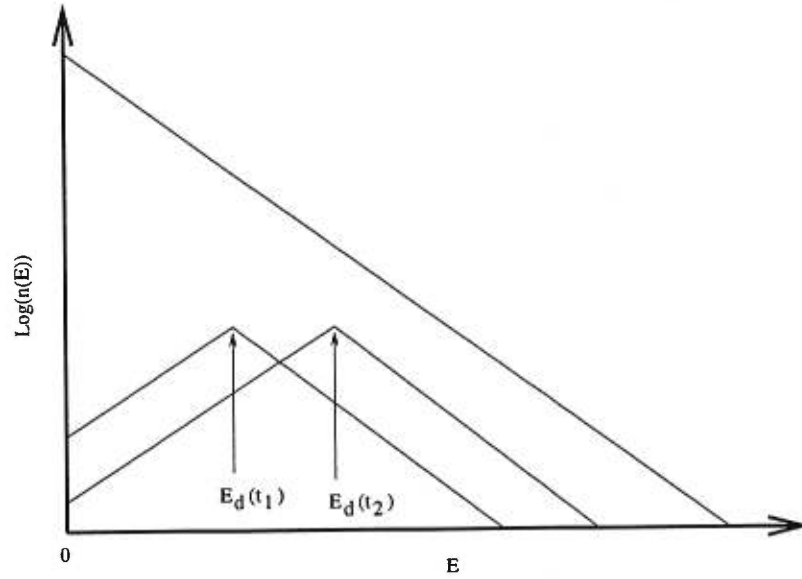


Figure 5. Distribution de la densité d'états et évolution de la densité des porteurs piégés dans le modèle TROK.

vers les états profonds selon la relation:

$$E_d(t) = kT \ln(\nu_0 t). \quad (1.15)$$

La Fig. 5 montre l'évolution de la distribution des porteurs. L'énergie de démarcation  $E_d(t)$  indiquée par la flèche correspond au maximum de la distribution. Au-dessus de  $E_d(t)$  c'est-à-dire pour  $E < E_d(t)$ , les porteurs sont en équilibre thermique et l'émission vers la bande est alors possible. Par contre, les porteurs qui sont en-dessous de  $E_d(t)$  sont gelés, et l'émission est impossible. La seule possibilité pour les porteurs piégés au temps  $t_1$ , en-dessous de  $E_d(t_1)$ , d'être réémis vers la bande est d'attendre à l'instant  $t_2$  plus tard où  $E_d$  atteindra cet état. Dans la partie en équilibre de la distribution des porteurs, TROK prédit que  $n_p(E) \sim \exp(E/kT) \exp(-E/kT_0)$ . Dans la dernière équation, si  $T < T_0$  la pente est positive et si  $T > T_0$  la pente est négative. Dans la partie hors-équilibre, la distribution est proportionnelle à la densité d'états,  $n_p(E) \sim \exp(-E/kT_0)$ , quelle que soit la température. Pour un seul niveau de piège, la mobilité de dérive

$\mu_d$  s'écrit:

$$\mu_d = \mu_0 \frac{n_l}{n_p + n_l}, \quad (1.16)$$

où  $n_l$  est la densité de porteurs libres et  $n_p$  est la densité de porteurs piégés. Cette expression est due à Rose [27] et peut être démontrée formellement à partir de la théorie que nous avons présentée à la section précédente en utilisant la transformée de Laplace. Il est à remarquer qu'il est raisonnable de négliger  $n_l$  devant  $n_p$  au dénominateur car le temps de dépiégeage est beaucoup plus long que le temps de piégeage. Le calcul analytique du courant induit dans l'approximation du modèle TROK, avant et après le temps de transit  $t_T$ , est donné par:

$$I(t < t_T) \approx \mu_0 \alpha (1 - \alpha) (\nu_0 t)^{-1+\alpha} \quad (1.17)$$

$$I(t > t_T) \approx \left(\frac{\mu_0 F}{L}\right) \alpha (1 - \alpha) (\nu_0 t_T)^{2\alpha} (\nu_0 t)^{-1-\alpha} \quad (1.18)$$

On remarque dans ces équations la présence d'une loi de puissance caractérisée par le paramètre de dispersion  $\alpha$ , où  $\alpha = \frac{T}{T_0}$ . Ce modèle permet néanmoins de décrire qualitativement le transport dispersif dans les semi-conducteurs amorphes mais avec des limites du fait des approximations. Notons que la physique du piégeage multiple est similaire à celle de la section précédente. Il est normal alors de retrouver la même dépendance en temps du courant. Cependant, on ajoute quelques hypothèses supplémentaires pour simplifier le problème afin d'obtenir une solution. Il est également à noter, à cause de cette simplification, que le modèle TROK ne donne aucune information sur la position des porteurs. Plus tard, au chapitre 2, nous montrerons plus en détail les défauts de ce modèle. Nous verrons pourquoi il est nécessaire de traiter le transport électronique dans le a-Si:H et les détecteurs de particules au a-Si:H avec des calculs plus rigoureux. Nous avons aussi choisi la méthode Monte Carlo parce qu'elle est très proche du modèle physique de piégeage multiple et facile à mettre sur pied.

## 1.4 Méthode Monte Carlo

La méthode Monte Carlo est un outil de travail très puissant et est utilisée dans plusieurs domaines des sciences pour résoudre des systèmes complexes. On l'utilise en particulier en économie, en chimie, en biologie, en mathématique, et en physique. La méthode est efficace pour résoudre les intégrales, les équations différentielles et les équations aux dérivées partielles. En physique par exemple, l'équation de diffusion, l'équation de Schrödinger ainsi que d'autres problèmes peuvent être traités par cette méthode (pour plus de détails, voir le livre sur la méthode Monte Carlo écrit par Kalos et Whitlock [28]).

### 1.4.1 Introduction

Comme introduction à la simulation Monte Carlo, nous présentons le problème de diffusion en une dimension (1D) comme exemple de transport de charge. Ce problème est traité dans presque tous les livres décrivant les semi-conducteurs cristallins. Un tel exemple permet de comprendre les systèmes physiques plus complexes. Considérons un réseau cristallin de longueur  $L$ . La figure 6 montre une chaîne de sites qui sont séparés par une distance constante  $\Delta x$ . Les cercles vides aux deux extrémités en  $x = 0$  et en  $x = L$ , sont des sites absorbants. La simulation est arrêtée lorsque le porteur occupe l'un de ces sites, ou lorsque la charge est collectée. Injectons au temps  $t = 0$  un porteur à la position  $x_i = x_0$

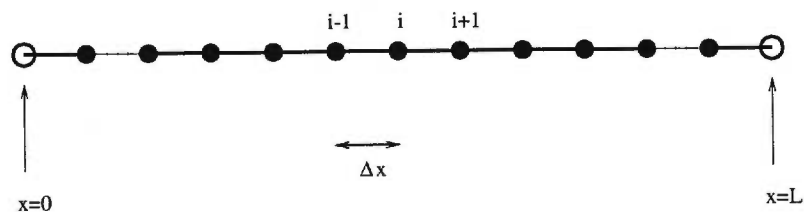


Figure 6. Problème simple de transport: Diffusion dans un réseau cristallin en une dimension.



sans champ électrique appliqué pour simplifier. Le porteur diffuse aléatoirement dans le réseau (il suit une marche aléatoire) avec une probabilité  $p = \frac{1}{2}$  de se diriger vers la droite et une probabilité  $q = \frac{1}{2}$  d'aller vers la gauche. Générons ensuite un nombre aléatoire  $R_1$ <sup>1</sup> selon une distribution uniforme. Si  $R_1 > p$  le porteur diffuse vers la droite; autrement le porteur diffuse vers la gauche. Pour chaque incrément de temps  $t_m = m\Delta t$ , où  $m = 1..M$ , le porteur continue d'être diffusé dans le réseau vers la gauche ou vers la droite jusqu'aux sites absorbants. On répète ce processus  $M$  fois. Si  $M$  est assez grand, on passe alors d'un milieu discret à un milieu continu. La distribution de porteurs de charge  $n(x, t)$  à la position  $x$  au temps  $t$  est alors parfaitement gaussienne. Ceci veut dire que la marche aléatoire dans ce réseau est équivalente à résoudre l'équation de diffusion avec un terme de génération  $g(x, t)$ :

$$\frac{\partial n(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n(x, t)}{\partial x^2} + g(x, t), \quad (1.19)$$

où  $D$  est le coefficient de diffusion. Pour une excitation  $\delta$  de charge et une condition initiale  $n(x_0, 0^+) = \eta'$ , l'équation de diffusion a une solution analytique exacte:

$$n(x, t) = \frac{\eta'}{\sqrt{\pi Dt}} \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{4Dt}\right). \quad (1.20)$$

Dans ce cas, on observe que la distribution de porteurs est une gaussienne qui demeure centrée en  $x = x_0$ , et qui s'élargit en fonction du temps.

La figure 7 montre bien l'évolution de la distribution de porteurs  $n(x, t)$  générés en  $x = 0$  au temps  $t_0$  et  $t_1$ , c'est-à-dire pour différents valeurs de  $M$ ,

---

<sup>1</sup>Il existe plusieurs générateurs de nombres aléatoires dans la littérature et il faut faire un choix avec précaution. Nous utilisons le générateur de nombre aléatoire uniforme, *RANLUX*, de James [29] qui garantit la qualité, qui est également utilisé intensivement en physique des hautes énergies et qui a surtout passé tous les tests les plus sévères. En plus, il a été estimé théoriquement que la chance d'avoir des corrélations est très faibles. La définition de la qualité du générateur de nombres aléatoires est basée sur les quatre critères suivantes: (i) les séquences doivent être générées indépendamment, (ii) les codes doivent être portables, (iii) l'implémentation doit être facile et efficace, et (iv) il doit posséder une très longue période.

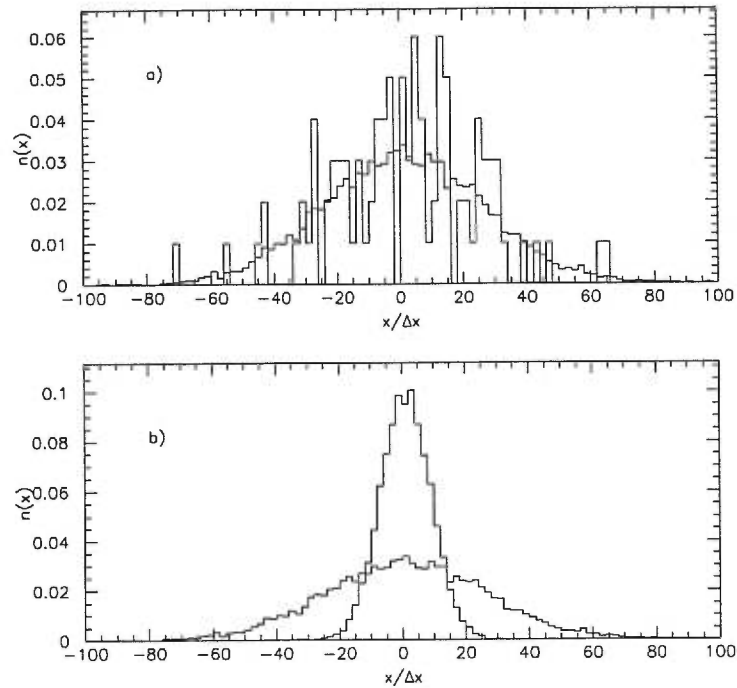


Figure 7. Évolution de la distribution de porteurs  $n(x, t)$  générés en  $x = 0$  au temps  $t$ . (a) Pour deux valeurs de  $\Delta x$  et un temps fixe à  $t = t_1$  ( $M = 640$ ). (b) Pour deux valeurs du temps  $t = t_0$  ( $M = 64$ ) et  $t = t_1$  ( $M = 640$ ) et un  $\Delta x$  fixe.

obtenue par la méthode Monte Carlo. Plus spécifiquement, la figure 7 (a) montre  $n(x, t)$  pour deux valeurs de  $\Delta x$ ; dans ce cas, on y voit que le calcul MC devient plus lisse lorsque  $\Delta x$  devient petite. La figure 7 (b) montre évolution de  $n(x, t)$  pour deux valeurs du temps pour une petite valeur de  $\Delta x$ .

#### 1.4.2 Modèle de la simulation

Nous allons maintenant décrire le modèle de simulation Monte Carlo pour le transport de charges par piégeage multiple dans les semi-conducteurs amorphes. Ce modèle s'applique aussi bien aux semi-conducteurs cristallins et amorphes et sera utilisé pour modéliser les détecteurs de particules et les expériences de

temps de vol. Nous nous intéresserons surtout au a-Si:H. Dans le cas amorphe, le désordre est caractérisé par la densité des états localisés,  $g(E)$  et à chaque événement de piégeage, l'énergie est tirée aléatoirement selon  $g(E)$ ; les temps de piégeage et dépiégeage sont également tirés à partir d'une certaine distribution que nous préciserons plus loin. La différence conceptuelle entre l'exemple précédent et celui-ci est qu'à chaque site (piège) sont associés une énergie  $E_i$  et un temps de dépiégeage  $t_r$ , tirés aléatoirement. Nous verrons dans les articles les détails du modèle ainsi que les modifications à y apporter pour inclure différents effets au modèle standard de piégeage multiple. Pour le moment, nous essayons de garder la présentation la plus générale possible.

Les hypothèses physiques sont identiques au MT standard. Les constantes de piégeage et de dépiégeage sont données par

$$K_c = \int_{E_c}^{\infty} g(E) \sigma \bar{v} dE$$

et

$$K_r = \nu_0 \exp\left(-\frac{E}{kT}\right),$$

où  $\sigma$  est la section efficace,  $\bar{v}$  est une vitesse moyenne des porteurs libres, et  $\nu_0$  est une fréquence d'essai. Pour un porteur libre, la probabilité de piéger après un temps compris entre  $t_c$  et  $t_c + dt_c$  est

$$P(t_c)dt_c = K_c \exp(-K_c t_c) dt_c. \quad (1.21)$$

Pour générer aléatoirement un temps de capture  $t_c$  selon cette distribution, nous utilisons un nombre aléatoire  $R_1$  généré uniformément entre 0 et 1. La relation entre  $R_1$  et  $t_c$  est

$$t_c = -\frac{1}{K_c} \ln(1 - R_1), \quad (1.22)$$

temps pendant lequel le porteur reste dans la bande. Sous l'influence du champ électrique, les charges libres acquièrent une vitesse de dérive

$$\vec{v}_d = \mu_0 \vec{F}(x)$$

et contribuent au courant induit selon

$$I(t) = \frac{ev_d}{L},$$

où  $\mu_0$  est la mobilité de dérive libre et  $\vec{F}(x)$  est le champ électrique dont le profil est arbitraire. Le porteur parcourt une distance  $\vec{d} = \vec{v}_d t_c$ <sup>2</sup> en un temps  $t_c$ , puis tombe dans un piège. Un autre nombre aléatoire  $R_2$  détermine l'énergie du piège dans lequel le porteur est capturé. Pour une distribution exponentielle d'états

$$E = -kT_c \ln(1 - R_2). \quad (1.23)$$

Le porteur reste piégé pendant un temps  $t_r$  donné par un troisième nombre aléatoire  $R_3$  selon

$$t_r = -\frac{1}{K_r} \ln(1 - R_3). \quad (1.24)$$

Le cycle se répète jusqu'à la collecte du porteur. On remarque que l'algorithme est très proche du processus microscopique du modèle MT et de l'expérience TOF. Cet algorithme MC est équivalent à résoudre le système des équations aux dérivées partielles (éqs. (1.6) et (1.7)) sans le terme de diffusion. Ce terme est normalement négligeable devant la dispersion des porteurs due au piègeage multiple.

Il est également à remarquer que pour les DOS autres qu'exponentielles, il n'existe pas nécessairement de relation analytique entre  $R_2$  et  $E$  et nous utilisons alors une méthode graphique (e.g. méthode de rejets) pour déterminer  $E$  à partir de  $R_2$ . Cette méthode est tout à fait équivalente à la méthode précédente et nous permet de simuler le courant transitoire pour une densité d'états localisés arbitraire.

Dans ce qui suit, nous montrons quelques cas idéaux de simulations MC du transport de charge pour mieux comprendre et pour se convaincre du bon fonctionnement de notre programme MC. La Fig. 8 illustre les processus de

---

<sup>2</sup>Ceci est valide si  $\vec{F}$  est uniforme ou si  $t_c$  est très court.

piégeage et de dépiégeage d'un seul porteur de charge. On note que la charge induite est obtenue en intégrant le courant induit. Comme prévu, il n'y a pas de piégeage avant  $t \approx 1/\nu_0$  ( $\nu_0 = 10^{11}$  s). Après ce temps, le piégeage et le dépiégeage sont aléatoires, comme le montre les pics aléatoires dans le courant induit. En général, il y a environ entre 5 à 15 événements de piégeage entre la génération et la collecte du porteur dépendant du champ électrique et de la température. La Fig. 8 b) permet également de vérifier la normalisation de la charge. Il est évident que la charge est bien normalisée. Si maintenant on augmente le nombre de porteurs à  $10^5$ , les formes du courant et de la charge induite deviennent plus lisses, tel que montré à la figure 2. Plus on injecte de porteurs, plus le calcul devient précis. En général, il suffit de simuler de  $10^5$  à  $10^6$  particules pour avoir une bonne statistique dans les distributions  $n(x, t)$  et  $n_i(E_i, x, t)$ .

La Fig. 9 (a) montre le courant calculé pour différentes densités d'états localisés. Dans le cas idéal, où les interactions entre les porteurs et les états localisés sont complètement négligées (pas de piégeage), le temps de transit libre correspond à la cassure à  $t_0 = L^2/\mu_0 V$ , et  $\alpha_1 = 1$  et  $\alpha_2 = \infty$  respectivement après et avant  $t_0$ . Dans cette même figure, on montre l'influence de l'interaction entre les porteurs et les pièges sur les courants induits avec différentes discrétisations de la DOS exponentielle tels qu'indiqué à la figure 9 (b). Il est à noter que le taux de capture totale est le même dans tous les cas.

Le temps de collecte est clairement plus long pour une distribution piquée dans les états plus profonds. Parce que le nombre total de pièges est conservé dans tous les cas et que le nombre de pièges profondes diminue (voir Fig. 9 (b)), la collecte est plus facile. Nous comparerons plus en détails la méthode MC avec les expériences plus tard dans les articles.

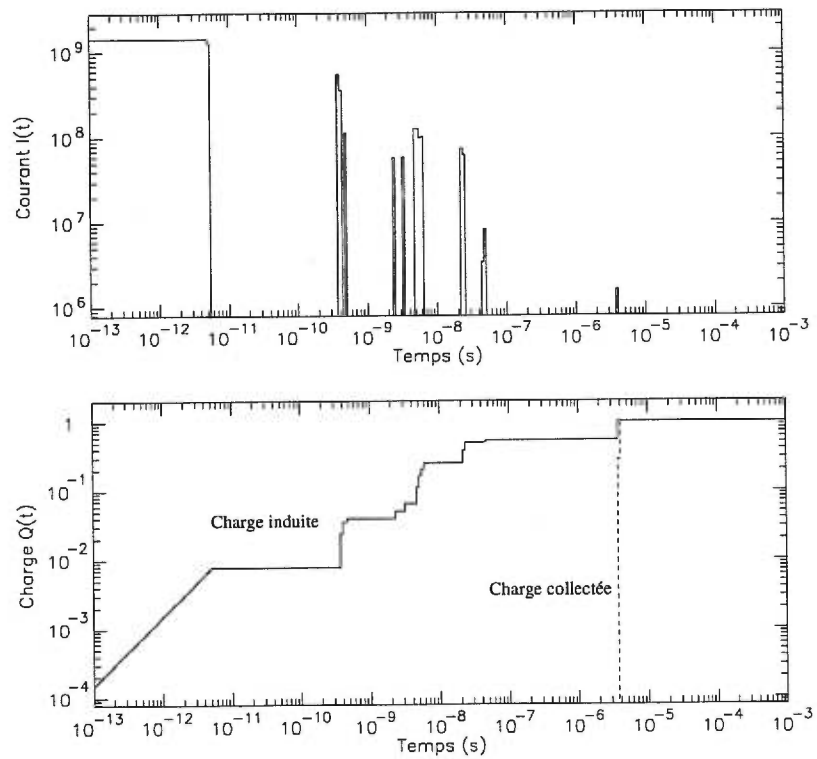


Figure 8. Simulation MC (a) du courant induit et (b) de la charge induite et de la charge collectée avec injection d'un porteur.

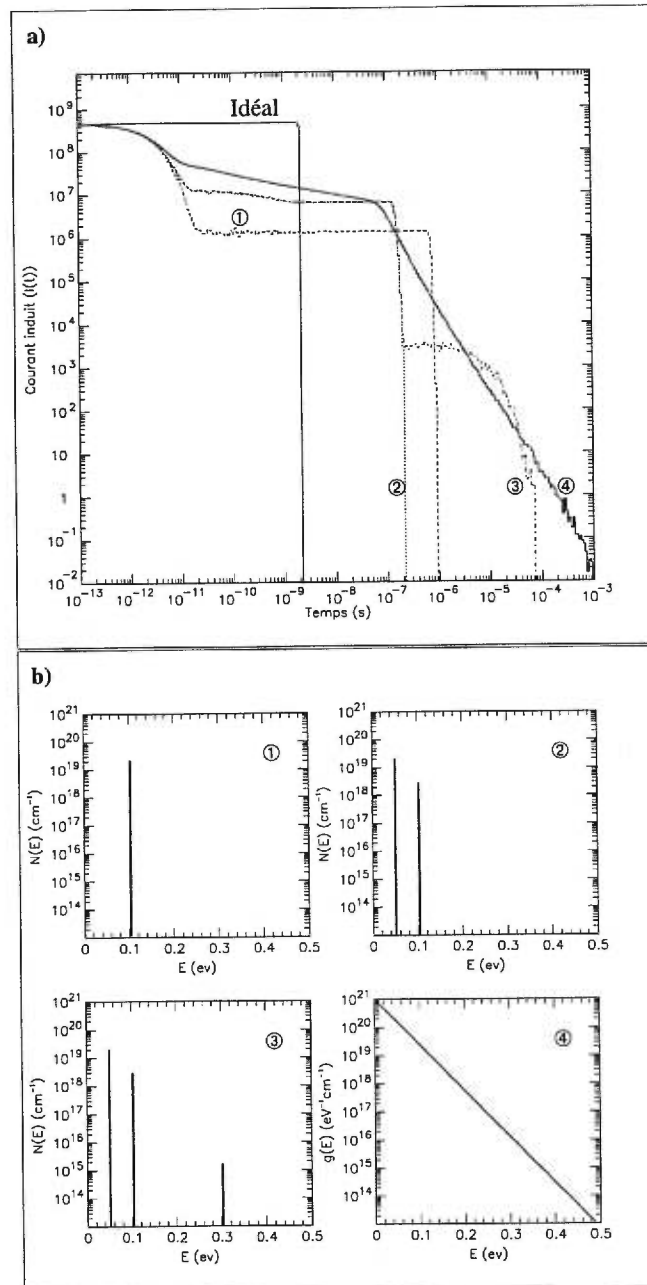


Figure 9. (a) Courant induit obtenu par simulation MC pour un champ électrique uniforme. La numérotation ① à ④ indique différentes discrétisations de la DOS exponentielle utilisée comme montrée à la figure (b). Nous utilisons  $\Delta E = 0.0025$ eV.

## Chapitre 2

### Calculs analytiques et Monte Carlo du transport par piégeage multiple standard

Ce chapitre présente principalement deux articles sur la formation du signal dans un détecteur de particules au a-Si:H et un article sur la modélisation de l'expérience de temps de vol (TOF) pour différents champs électriques et températures. Dans l'article I, nous présentons les calculs analytiques très détaillés du transport de charge pour modéliser le passage d'une particule énergétique dans un détecteur de particules en utilisant la méthode de la transformée de Laplace. Dans l'article II, nous montrons que la simulation MC est en parfait accord avec les calculs analytiques pour le cas particulier où  $\alpha = 0.5$ , avec un champ électrique uniforme et une génération piquée en  $x = x_0$ . La simulation MC reproduit très bien les données expérimentales pour différentes tensions appliquées. Dans l'article III, nous présentons une analyse systématique du modèle de transport par piégeage multiple standard. Nous y montrons qu'à basse température, les calculs MC confirment que les prédictions du calcul analytique avec  $\alpha = T/T_0$  pour  $T < 0.6 T_0$  sont correctes, mais montrent que, à partir de  $T > 0.6 T_0$ , cette relation simple n'est plus valide. Nous montrons ensuite que le modèle standard de transport n'est pas suffisant pour reproduire les données expérimentales des paramètres de dispersion  $\alpha_1$  et  $\alpha_2$ .



## 2.1 Modélisation des détecteurs de particules

### 2.1.1 Introduction au problème

Les détecteurs de particules p-i-n au a-Si:H sont étudiés en détails dans les thèses de Pochet [30] et Dubeau [31]. Le transport des charges dans un détecteur est traité en majeure partie par Pochet [30]. La Fig. 10 montre le schéma représentant un détecteur de particules. On y voit le passage d'une particule ionisante dont la trajectoire est représentée par une flèche. En général, les signaux générés par plusieurs particules sont obtenus à partir d'un oscilloscope de haute résolution pour différentes valeurs de tension appliquée en fonction du temps. Pour expliquer les signaux expérimentaux, le modèle TROK a été modifié en introduisant explicitement la position  $x$  et la position de génération  $x_0$  dans le détecteur. Il a cependant été nécessaire d'introduire une renormalisation des signaux calculés pour que la charge soit égale à 1 à  $t \rightarrow \infty$ . Un calcul analytique avec le modèle de piégeage multiple standard s'avérait alors impossible à cause de la forme du champ et de la génération uniforme dans le détecteur. Nous avons résolu ces problèmes dans les articles I et II.

## 2.2 Choix du champ électrique

Le champ électrique dans un détecteur au a-Si:H peut être obtenu en solutionnant l'équation de Poisson. En une dimension, l'équation s'écrit:

$$\frac{d^2V}{dx^2} = -e\rho(x)/\epsilon, \quad (2.1)$$

où  $V$  est le potentiel électrique,  $e$  est la charge électrique,  $\rho(x)$  est la densité de charge d'espace (en  $\text{cm}^{-3}$ ) et  $\epsilon$  est la constante diélectrique ( $\epsilon = \epsilon_0\epsilon_r$ ). Le détecteur étant opéré en polarisation inverse DC et à tension élevée, la densité de charge d'espace  $\rho(x)$  est alors à peu près uniforme. Le potentiel électrique est

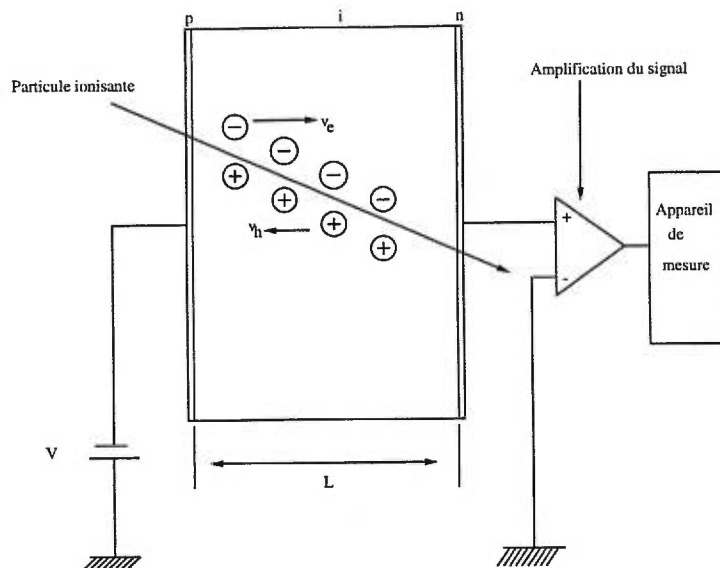


Figure 10. Ce schéma montre le passage d'une particule ionisante dans un détecteur, créant ainsi des paires électron-trou uniformément le long de la trajectoire de la particule. Les trous  $\oplus$  circulent vers la gauche et les électrons  $\ominus$  vers la droite.

alors obtenu en intégrant l'éq. (2.1) sur toute la longueur de l'échantillon,

$$V = \int_0^L F dx, \quad (2.2)$$

où on définit  $F = \frac{dV}{dx}$ . En pratique, pour des tensions appliquées suffisamment élevées, le champ électrique est linéaire  $F(x) = Ax + B$ , où  $A$  et  $B$  sont des constantes.

### 2.2.1 Article I: Calcul analytique du transport des charges dans le a-Si:H

Publié dans Can. J. Phys. **73**, 585 (1995).

# Calcul analytique du transport des charges dans le a-Si:H

Wen Chao Chen et Louis-André Hamel

**Résumé :** Le transport par piégeage multiple des porteurs de charge dans une queue de bande exponentielle est étudié analytiquement pour le cas de porteurs initialement générés en une position arbitraire dans le dispositif et pour un champ électrique variant linéairement avec la position, généralisant ainsi le traitement habituellement fait pour l'analyse d'expériences de temps de vol. Une solution analytique est donnée pour la densité de porteurs libres  $n(x, t)$  pour un paramètre de dispersion  $0 < \alpha < 1$ . Dans le cas  $\alpha = 1/2$ , le courant transitoire  $I(t)$  et la charge induite  $Q(t)$  ont une solution analytique. Ces résultats sont comparés à des calculs antérieurs dans le cas particulier où le champ est uniforme et où les porteurs sont générés à une interface.

**Abstract:** Multitrapping transport of carriers through exponential band tails is studied for carriers generated at an arbitrary position in the device in presence of a linearly varying electric field, thus generalizing the usual treatment of time of flight experiments. An analytical expression is found for the free carrier density distribution  $n(x, t)$  for values of the dispersion parameter  $0 < \alpha < 1$ . In the case  $\alpha = 1/2$ , analytical solutions are given for the transient current  $I(t)$  and the induced charge  $Q(t)$ . Comparison with previous calculations is made for the special case of uniform electric field and carriers initially generated at one interface.

## 1. Introduction

Le transport des charges dans le a-Si:H obéit à l'équation de continuité et peut être décrit par le modèle de piégeage multiple. Cette méthode d'analyse a été développée par Schmidlin [1] et Noolandi [2] indépendamment et a ensuite été reprise par Tiedje [3, 4] pour décrire le mouvement des charges dans un semi-conducteur amorphe. Nous allons suivre de très près les techniques de calculs proposées par Tiedje mais, dans notre cas, nous considérons un champ électrique linéaire  $F(x) = Ax + B$  et une génération en un point  $x_0$  arbitraire entre 0 et  $L$ , généralisant ainsi le calcul de Tiedje qui considère un champ électrique uniforme et une génération à une des extrémités de l'échantillon.

Ces généralisations sont motivées par l'étude du courant transitoire produit par le passage d'une particule chargée énergétique traversant un détecteur nucléaire au a-Si:H [5-11]. Dans ce cas, la charge est générée uniformément le long de la trajectoire de la particule. Le détecteur étant opéré en polarisation inverse (courant continu), il apparaît une charge d'espace  $\rho(x)$  qui est à peu près uniforme à tension de polarisation élevée.

## 2. Solution de l'équation de transport

Les équations qui régissent le mouvement des charges sont

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \sum_{i=1}^{\infty} (K_i^i n_i - K_c^i n) - \frac{\partial f_p}{\partial x} + g(x, t) \quad (1)$$

et

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = K_c^i n - K_i^i n_i \quad (2)$$

où  $n(x, t)$  et  $n_i(x, t)$  sont les densités de population locales dans la bande et dans l'état localisé  $i$ , respectivement, et

$$f_p = \mu_0 F n - D \frac{\partial n}{\partial x}$$

est le flux local des électrons ou trous mobiles avec la constante de diffusion  $D$ .  $K_c^i$  et  $K_i^i$  sont respectivement les taux de capture et de réémission pour l'état localisé  $i$ .  $g(x, t)$  est une fonction de génération-recombinaison. Notre traitement correspond aux hypothèses et simplifications suivantes :

(i) Pas de diffusion des porteurs ( $f_p = \mu_0 F n$ ) qui créerait une dispersion additionnelle négligeable.

(ii) Un type de porteur à la fois (électrons ou trous selon le contexte). Le courant total s'obtiendra en sommant les  $I(t)$  dus aux électrons et aux trous calculés avec des conditions de génération identiques.

(iii) Pas de recombinaison.

(iv) La génération est ponctuelle en  $t = 0^+$ .

(v) La condition initiale est  $n(x, 0) = n_i(x, 0) = 0$ .

Reçu le 10 janvier 1995. Accepté le 30 mars 1995.

W.C. Chen et L.-A. Hamel.<sup>1</sup> Groupe de recherche en physique et technologie des couches minces, Université de Montréal, C.P. 6128, succursale Centre-ville, Montréal, QC H3C 3J7, Canada.

1. Auteur correspondant.

586

Avec ces considérations, nous pouvons réécrire les équations 1 et 2 :

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial(\mu_0 F n)}{\partial x} = \sum_{i=1}^{\infty} (K_r^i n_i - K_c^i n) + g(x, t) \quad (3)$$

et

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = K_c^i n - K_r^i n_i \quad (4)$$

Puisque  $g(x, t) = g(x)\delta(t - 0^+)$  et que les populations initiales sont nulles pour  $t \leq 0$ , les équations différentielles 3 et 4 peuvent être résolues en prenant leurs transformées de Laplace. Nous avons

$$s\bar{n} + \frac{\partial(\mu_0 F \bar{n})}{\partial x} = \sum_{i=1}^{\infty} (K_r^i \bar{n}_i - K_c^i \bar{n}) + g(x) \quad (5)$$

$$\bar{n}_i = \frac{K_c^i \bar{n}}{s + K_r^i} \quad (6)$$

où  $s$  est la variable de Laplace. En substituant (6) dans (5), nous obtenons

$$s\bar{n} + \frac{\partial(\mu_0 F \bar{n})}{\partial x} = -s\bar{n} \sum_{i=1}^{\infty} \frac{K_c^i}{s + K_r^i} + g(x) \quad (7)$$

Posons pour le moment

$$f(s) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{K_c^i}{s + K_r^i} \quad (8)$$

et dérivons le deuxième terme dans l'équation 7 en tenant compte du fait que  $F(x) = Ax + B$ . Nous avons

$$\mu_0(Ax + B) \frac{\partial \bar{n}}{\partial x} + [s + \mu_0 A + s f(s)] \bar{n} = g(x) \quad (9)$$

ou encore

$$\frac{\partial \bar{n}}{\partial x} + \frac{A}{Ax + B} \left( 1 + \frac{s}{\mu_0 A} + \frac{s}{\mu_0 A} f(s) \right) \bar{n} = \frac{g(x)}{\mu_0(Ax + B)} \quad (10)$$

### 3. Génération piquée en $x_0$

Nous examinerons d'abord le cas de la génération piquée en  $x_0$ , c'est-à-dire que

$$g(x) = g \delta(x - x_0)$$

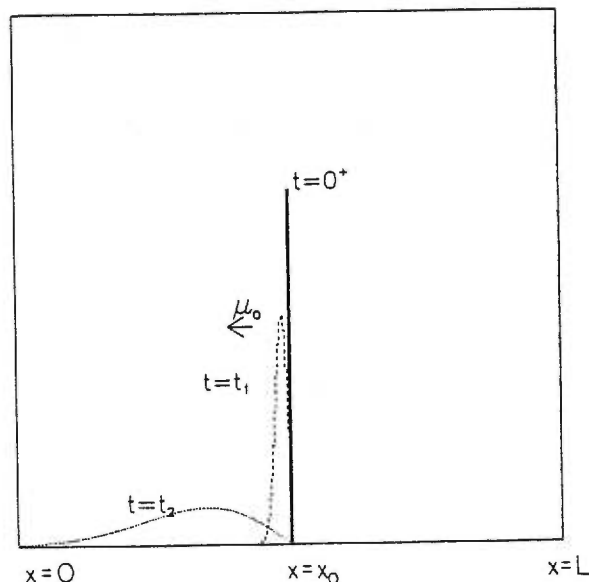
où  $g$  est le nombre de paires électron-trou créées au temps  $t = 0^+$ . La figure 1 illustre bien le phénomène de génération de paires électron-trou à  $t = 0^+$ , et montre la dispersion des porteurs aux temps  $t_1$  et  $t_2$ . La solution de l'équation différentielle 9 avec un terme inhomogène  $g \delta(x - x_0)$  est la transformée de Laplace  $\bar{G}(x, x_0, s)$  de la fonction de Green du problème  $G(x, x_0, t)$ ; il sera donc facile d'obtenir la solution  $n(x, t)$  pour une génération  $g(x)$  arbitraire en convoluant avec  $G(x, x_0, t)$ . L'intégrale dans l'équation 13 contient alors une fonction de Dirac et s'évalue immédiatement

$$\frac{g}{\mu_0} \int_0^x \delta(x' - x_0) (Ax' + B)^{u(s)-1} dx' = \begin{cases} 0, & x < x_0 \\ \frac{g}{\mu_0} (Ax_0 + B)^{u(s)-1}, & x > x_0 \end{cases}$$

On trouve alors

$$\bar{G}(x, x_0, s) = \begin{cases} \gamma(s) (Ax + B)^{-u(s)}, & x < x_0 \\ (Ax + B)^{-u(s)} \left[ \frac{g}{\mu_0} (Ax_0 + B)^{u(s)-1} + \gamma(s) \right], & x > x_0 \end{cases}$$

Fig. 1. Génération de paires électron-trou en  $x = x_0$  à  $t = 0^+$  et évolution temporelle de la distribution des porteurs qui se déplacent vers la gauche.



Posons

$$u(s) = 1 + \frac{s}{\mu_0 A} + \frac{s}{\mu_0 A} f(s) \quad (11)$$

l'équation 10 devient

$$\frac{\partial \bar{n}}{\partial x} + \frac{Au(s)\bar{n}}{Ax + B} = \frac{g(x)}{\mu_0 F} \quad (12)$$

dont la solution est

$$\bar{n} = (Ax + B)^{-u(s)} \left[ \int_0^x \frac{g(x')}{\mu_0} (Ax' + B)^{u(s)-1} dx' + \gamma(s) \right] \quad (13)$$

où  $\gamma(s)$  est une constante d'intégration qui dépend des conditions aux frontières.

### 3.0.1. Conditions aux frontières

On s'intéresse surtout au transport des trous dans les détecteurs au a-Si:H, de sorte que les trous vont dans la direction croissante du champ électrique  $F(x)$ . Par convention, on choisit  $F(x) = Ax + B < 0$ , tel que  $A = e\rho/\varepsilon_0\varepsilon_r > 0$ ,  $B < 0$  et une mobilité  $\mu_0$  positive pour que les trous se dirigent vers la gauche. Pour des porteurs générés en  $x_0$  et qui dérivent vers la gauche, la solution physique doit donner  $\tilde{G}(x, x_0, s) = 0$  pour  $x > x_0$ . Ceci nous permet de calculer la constante  $\gamma(s)$

$$\gamma(s) = -\frac{g}{\mu_0}(Ax_0 + B)^{\mu(s)-1} \quad (14)$$

d'où

$$\tilde{G}(x, x_0, s) = \begin{cases} -\frac{g}{\mu_0}(Ax_0 + B)^{\mu(s)-1}(Ax + B)^{-u(s)}, & x < x_0 \\ 0, & x > x_0 \end{cases}$$

En introduisant la fonction de Heaviside  $H(x_0 - x)$ ,

$$\begin{aligned} \tilde{G}(x, x_0, s) &= -\frac{g}{\mu_0} H(x_0 - x)(Ax_0 + B)^{\mu(s)-1}(Ax + B)^{-u(s)} = -\frac{gH(x_0 - x)}{\mu_0(Ax_0 + B)} \left(\frac{Ax + B}{Ax_0 + B}\right)^{-u(s)} \\ &= -\frac{gH(x_0 - x)}{\mu_0(Ax_0 + B)} \exp\left[-u(s) \ln\left(\frac{Ax + B}{Ax_0 + B}\right)\right] \end{aligned} \quad (15)$$

Pour les électrons qui dérivent vers la droite,  $\gamma(s) = 0$  et la solution pour  $\tilde{G}(x, x_0, s)$  est identique sauf pour un changement de  $H(x_0 - x)$  en  $-H(x - x_0)$

$$\tilde{G}(x, x_0, s) = \frac{gH(x - x_0)}{\mu_0(Ax_0 + B)} \exp\left[-u(s) \ln\left(\frac{Ax + B}{Ax_0 + B}\right)\right] \quad (16)$$

Notons qu'ici, on considère une mobilité négative ( $\mu_0 < 0$ ) pour que  $\mu_0 F$  soit positif de sorte que  $\tilde{G}(x, x_0, s)$  demeure positif. Le reste du développement concerne surtout les trous (éq. 15) mais peut facilement s'appliquer aux électrons avec les changements décrits plus haut.

### 3.0.2. Calcul de $f(s)$ (éq. 8)

Le taux d'émission des porteurs est donné par  $K_i^i(E) = \omega_0 \exp(-E/kT)$  et le taux de capture des porteurs  $K_c(E) = g(E)\sigma\bar{v}$ . La relation entre  $K_c$  et  $K_i$  est obtenue en considérant le bilan détaillé pour une distribution d'états localisés décroissant exponentiellement  $g(E) = g_0 \exp(-E/kT_c)$ ; on trouve  $K_c(E) = (\omega_0/kT) \exp(-E/kT_c)$ . Pour une distribution exponentielle, nous pouvons remplacer la somme dans (7) par une intégrale, car nous considérons une distribution continue d'états.

$$f(s) = \sum_{i=1}^{\infty} \left( \frac{K_c^i}{s + K_i^i} \right) \rightarrow \int_0^{\infty} \frac{\omega_0 \exp(-E/kT_c)}{s + \omega_0 \exp(-E/kT)} \frac{dE}{kT} = \int_0^{\infty} \frac{\exp[(1 - \alpha)E/kT]}{1 + (s/\omega_0) \exp(E/kT)} \frac{dE}{kT}$$

où  $\alpha = T/T_c$  est le paramètre de dispersion. En posant  $u = (s/\omega_0) \exp(E/kT)$ , la dérivée de  $u$  est  $du = u dE/kT$  et

$$u^{1-\alpha} = \left(\frac{s}{\omega_0}\right)^{1-\alpha} \exp\left[(1 - \alpha)\frac{E}{kT}\right] \quad (17)$$

En remplaçant toutes ces expressions dans l'intégrale précédente,

$$f(s) = \left(\frac{s}{\omega_0}\right)^{\alpha-1} \int_{s/\omega_0}^{\infty} \frac{u^{-\alpha}}{1+u} du = \left(\frac{\omega_0}{\alpha s}\right) {}_2F_1\left(1, \alpha, 1 + \alpha, -\frac{\omega_0}{s}\right) \quad (18)$$

où  ${}_2F_1$  est une fonction hypergéométrique. Avec ce  $f(s)$  inséré dans (11) pour  $u(s)$ , l'expression 15 n'a pas de transformée de Laplace inverse analytique, mais nous pouvons faire une approximation physiquement raisonnable dans les cas où  $0 < \alpha < 1$ .

### 3.1. Fonction de Green pour $0 < \alpha < 1$ et champ électrique linéaire

Nous savons que  $\omega_0 \sim 10^{12} \text{ s}^{-1}$ , alors  $s/\omega_0 \sim 0$  pour  $t \gg 10^{-12} \text{ s}^{-1}$ ; cette supposition est valide car le temps de capture de porteur est de l'ordre de  $\omega_0^{-1}$  et nous nous intéressons au temps  $t \gg \omega_0^{-1}$ .

$$f(s) \simeq \left(\frac{s}{\omega_0}\right)^{\alpha-1} \int_0^{\infty} \frac{u^{-\alpha}}{1+u} du = \left(\frac{s}{\omega_0}\right)^{\alpha-1} \left[\frac{\pi}{\sin(\alpha\pi)}\right] \quad (19)$$

En remplaçant l'expression de  $u(s)$  dans (15), nous pouvons réécrire  $\tilde{G}(x, x_0, s)$

$$\tilde{G}(x, x_0, s) = -\frac{gH(x_0 - x)}{\mu_0(Ax + B)} \exp \left\{ - \left[ s + \frac{\pi s^\alpha \omega_0^{1-\alpha}}{\sin(\alpha\pi)} \right] \frac{\ln \left( \frac{Ax + B}{Ax_0 + B} \right)}{\mu_0 A} \right\} \quad (20)$$

Cette expression est similaire à la solution trouvée par Tiedje (éq. A12 de [3] et éq. 6.19 de [4]) et la généralise. De fait l'expression 20 redonne bien la solution de Tiedje lorsque  $A \rightarrow 0$  et que les charges sont générées à l'interface  $x_0 = 0$  et dérivent vers la droite ( $H(x_0 - x)$  remplacé par  $H(x - x_0)$  et signe du champ inversé). Posons

$$r = \frac{1}{\mu_0 A} \ln \left( \frac{Ax + B}{Ax_0 + B} \right) \quad (21)$$

$$p = -\frac{gH(x_0 - x)}{\mu_0(Ax + B)} \quad (22)$$

$$\Omega = \frac{\pi \omega_0^{1-\alpha}}{\sin(\alpha\pi)} \quad (23)$$

Alors,

$$\tilde{G}(x, x_0, s) = p \exp[-r(s + \Omega s^\alpha)] \quad (24)$$

et la transformée de Laplace inverse s'écrit

$$G(x, x_0, t) = \frac{p}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \exp(st) \exp[-r(s + \Omega s^\alpha)] ds = \frac{p}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \exp(st_1) \exp(-r\Omega s^\alpha) ds = \frac{p}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \exp[\phi(s)] ds \quad (25)$$

où nous avons posé  $t_1 = t - r$  et  $\phi(s) = st_1 - b s^\alpha$ , avec  $b = r\Omega$ . Notons que  $r$  est le temps minimum (sans piégeage) pour dériver de  $x_0$  à  $x$  et la transformée inverse n'existe que pour  $r > 0$  ce qui fait intervenir les conventions choisies pour les signes de  $A, B, \mu_0$  et la direction de dérive.

Pour résoudre l'intégrale, nous utilisons la méthode du col (voir par exemple [12]). La fonction  $\phi(s)$  doit être analytique dans le voisinage du point stationnaire. Faisons un changement de variables en posant  $z = st_1$  et  $dz = t_1 ds$ ,

$$\phi(z) = z - \frac{bz^\alpha}{t_1^\alpha}$$

La méthode du col nous permet d'écrire

$$G(x, x_0, t) \sim p \exp[\phi(z_0)] \sqrt{\frac{1}{2\pi\phi''(z_0)}} \quad \text{pour} \quad t_1 > 0 \quad \text{et} \quad \frac{b}{t_1^\alpha} \gg 1$$

(cette méthode peut donner un résultat exact, mais pas en général; dans Kyrala [12], on donne ce genre d'exemple pour le cas  $\alpha = 1/2$ ). La première condition est imposée par le fait que  $G(x, x_0, t) = 0$  pour  $t_1 < 0$ , et la deuxième condition vient du fait que dans la méthode du col,  $\phi(z) = \beta f(z)$  requiert que  $\beta = b/t_1^\alpha$  soit grand. La fonction de Green décrit la propagation du paquet de charges d'une position  $x_0$  à la position  $x$  en un temps  $t = t_1 + r(x, x_0)$  donné. La fonction de Green pour  $0 < \alpha < 1$  s'écrit

$$G(x, x_0, t) = -\frac{gH(x_0 - x)H(t_1)}{\mu_0(Ax + B)t_1} \frac{\exp \left[ -\frac{1-\alpha}{\alpha} \left( \frac{ab}{t_1^\alpha} \right)^{1/(1-\alpha)} \right]}{\sqrt{2\pi(1-\alpha) \left( \frac{t_1^\alpha}{ab} \right)^{1/(1-\alpha)}}} \quad (26)$$

### 3.2. Fonction de Green pour $\alpha = 1/2$ et champ électrique linéaire

Le cas particulier  $\alpha = 1/2$  s'avère intéressant car il correspond approximativement au cas des trous dans le a-Si:H à la température ambiante ( $T_c = 490$  K). De plus,  $\alpha = 1/2$  mène à une forme simplifiée de l'expression 26 qui permettra d'obtenir une solution analytique pour le courant induit  $I(t)$ . On trouve aisément

$$G(x, x_0, t) = -\frac{gH(x_0 - x)H(t_1)\sqrt{\pi\omega_0}}{2\mu_0^2 A(Ax + B)t_1^{3/2}} \ln \left( \frac{Ax + B}{Ax_0 + B} \right) \exp \left[ -\frac{\pi^2 \omega_0 \ln^2 \left( \frac{Ax + B}{Ax_0 + B} \right)}{4\mu_0^2 A^2 t_1} \right] \quad (27)$$

### 3.3. Fonction de Green pour $0 < \alpha < 1$ et champ électrique uniforme

Dans les cas où le champ électrique est uniforme dans l'échantillon, soit que la polarisation soit pulsée ou suffisamment grande pour que la variation relative du champ puisse être négligée, l'expression 26 peut être simplifiée en évaluant la limite lorsque  $A \rightarrow 0$  de  $b = r\Omega$

$$\xi = \lim_{A \rightarrow 0} b = \frac{\pi\omega_0^{1-\alpha}}{\sin(\alpha\pi)} \lim_{A \rightarrow 0} \left[ \frac{1}{\mu_0 A} \ln \left( \frac{Ax+B}{Ax_0+B} \right) \right] = -\frac{\pi\omega_0^{1-\alpha}}{\sin(\alpha\pi)} \left( \frac{x_0-x}{\mu_0 B} \right) \quad (28)$$

$$G(x, x_0, t) = -\frac{gH(x_0-x)H(t_1)}{\mu_0 B t_1} \frac{\exp \left[ -\frac{1-\alpha}{\alpha} \left( \frac{\alpha\xi}{t_1^\alpha} \right)^{1/(1-\alpha)} \right]}{\sqrt{2\pi(1-\alpha)} \left( \frac{t_1^\alpha}{\alpha\xi} \right)^{1/(1-\alpha)}} \quad (29)$$

### 3.4. Fonction de Green pour $\alpha = 1/2$ et champ électrique uniforme

En faisant  $\alpha = 1/2$  dans l'équation précédente, on obtient

$$G(x, x_0, t) = \frac{gH(x_0-x)H(t_1)\sqrt{\pi\omega_0}(x_0-x)}{2\mu_0^2 B^2 t_1^{3/2}} \exp \left[ -\frac{\pi^2 \omega_0 (x_0-x)^2}{4\mu_0^2 B^2 t_1} \right] \quad (30)$$

Cette expression peut être comparée à l'équation 6.20 de [4] en posant  $x_0 = 0$  et en changeant la direction de dérive (signe de  $\mu_0 F$ ). Les deux expressions sont alors identiques sauf pour un facteur  $\pi$  en moins dans [4]. Ce facteur n'affecte ni la forme du courant  $I(t)$  ni le temps de transit déduit de  $I(t)$  (éq. 6.22 et 6.23 de [4]). Seule la grandeur absolue du courant est affectée, ce qui ne cause habituellement pas de difficulté pour les expériences de temps de vol où la quantité totale de charge injectée n'est pas calibrée en absolu. On verra plus loin (section 5) que ce facteur  $\pi$  à l'équation 30 est essentiel pour que la charge induite  $Q(t)$  soit correctement normalisée.

### 3.5. Fonction de Green pour $\alpha = 1$ et champ électrique linéaire

Ce cas particulier correspond au transport des électrons dans un détecteur au a-Si:H à la température ambiante ( $T_c = 310$  K). Pour  $\alpha = 1$ , l'équation 18 devient

$$f(s) = \int_{s/\omega_0}^{\infty} \frac{1}{u(1+u)} du = \ln \left( 1 + \frac{\omega_0}{s} \right)$$

En mettant  $f(s)$  dans  $u(s)$ , nous avons, pour des électrons dérivant vers la droite (éq. 16) et pour  $\alpha = 1$ , la fonction de Green

$$G(x, x_0, t) = \frac{gH(x-x_0)}{\mu_0(Ax+B)} \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \exp \left\{ s \left[ t_1 - r \ln \left( 1 + \frac{\omega_0}{s} \right) \right] \right\} ds$$

Comme dans le cas où  $0 < \alpha < 1$ , nous appliquons la méthode du col en posant  $\phi(s) = s \left[ t_1 - r \ln \left( 1 + \frac{\omega_0}{s} \right) \right]$ . Les dérivées première et seconde sont données par

$$\phi'(s) = t_1 - r \ln \left( 1 + \frac{\omega_0}{s} \right) + \frac{r}{1+(s/\omega_0)} \quad \text{et} \quad \phi''(s) = \frac{r}{s[1+(s/\omega_0)]^2}$$

respectivement.  $f(s)$  est une solution exacte, alors, nous n'avons aucune restriction sur la variable  $s$ , mais pour  $t \gg \omega_0^{-1}$ , nous pouvons faire l'approximation  $s \ll \omega_0$  :

$$\ln \left( 1 + \frac{\omega_0}{s} \right) \sim -\ln \left( \frac{s}{\omega_0} \right) \quad \text{et} \quad \frac{1}{1+(s/\omega_0)} \sim 1$$

Nous obtenons le point stationnaire  $z_0 = \omega_0 \exp(-t/r)$ . Les expressions de  $\phi(z_0)$  et  $\phi''(z_0)$  sont données par

$$\phi(z_0) = \omega_0 \exp \left( -\frac{t}{r} \right) \left[ t_1 - r \ln \left( 1 + \exp \left( \frac{t}{r} \right) \right) \right] \quad \text{et} \quad \phi''(z_0) = \frac{r \exp(t/r)}{\omega_0 [1 + \exp(-t/r)]^2}$$

respectivement. Finalement, la fonction de Green décrivant la propagation du paquet de charges vers la droite pour  $\alpha = 1$  est

$$G(x, x_0, t) = \frac{gH(x-x_0)H(t_1)[1 + \exp(-t/r)]\exp(-t/2r)}{\mu_0(Ax+B)\sqrt{2\pi(r/\omega_0)}} \exp(\omega_0 \exp(-t/r)\{t_1 - r \ln[1 + \exp(t/r)]\}) \quad (31)$$

#### 4. Calcul du courant induit $I(t)$

Le courant induit par les porteurs est donné par

$$I_{\text{ind}}(t) = \frac{e\mu_0}{L} \int_0^L F(x)n(x, t) dx \quad (32)$$

Pour une génération piquée, on remplace  $n(x, t)$  par  $G(x, x_0, t)$ . En général, la solution analytique du courant induit n'existe pas pour un  $\alpha$  quelconque, mais les méthodes numériques peuvent être utilisées pour tracer les courbes du courant induit. Nous nous contentons ici de donner la solution analytique pour le cas  $\alpha = 1/2$  correspondant au transport des trous. On remarque que le produit  $\mu_0 F$  est négatif ce qui donne un courant induit négatif puisque les trous dérivent vers la gauche. On prendra la valeur absolue du courant lorsqu'on tracera les courbes.

##### 4.1. Génération $\delta(x - x_0)$ pour $\alpha = 1/2$ et champ électrique linéaire

Nous présentons le calcul du courant induit pour  $\alpha = 1/2$  avec un champ électrique linéaire  $F(x) = Ax + B$ . Après avoir inséré (27) dans (32), la fonction de Heaviside  $H(x_0 - x)$  nous permet d'intégrer de 0 à  $x_0$  et le courant induit s'écrit

$$I_{\text{ind}}(x_0, t) = -\frac{eg\sqrt{\pi\omega_0}}{2\mu_0AL} \int_0^{x_0} H(t_1)t_1^{-3/2} \ln(\zeta) \exp\left[-\frac{\pi^2\omega_0}{4\mu_0^2A^2t_1} \ln^2(\zeta)\right] dx \quad (33)$$

où  $\zeta = \ln\left(\frac{Ax+B}{Ax_0+B}\right)$ . Faisons le changement de variable  $y = \ln\left(\frac{Ax+B}{Ax_0+B}\right)$  et  $dx = \frac{(Ax_0+B)}{A} \exp(y) dy$  et supposons que  $t_1 \sim t$ , ce qui est valable pour  $t \gg \tau$ . Alors, nous pouvons sortir le facteur  $t^{-3/2}$  de l'intégrale, ce qui donne

$$I_{\text{ind}}(x_0, t) = -\frac{eg\sqrt{\pi\omega_0}(Ax_0+B)}{2\mu_0A^2L^{3/2}} \int_{\ln(B/(Ax_0+B))}^0 y \exp(y) \exp\left(-\frac{\pi^2\omega_0 y^2}{4\mu_0^2A^2t}\right) dy$$

Finalement, en évaluant l'intégrale, le courant est donné par

$$I_{\text{ind}}(x_0, t) = \frac{eg\mu_0(Ax_0+B)}{L\pi^{3/2}\sqrt{\omega_0t}} \left( 1 - \frac{B}{Ax_0+B} \exp\left[-\frac{\pi^2\omega_0}{4\mu_0^2A^2t} \ln^2\left(\frac{B}{Ax_0+B}\right)\right] + \frac{\mu_0A\sqrt{t}}{\sqrt{\pi\omega_0}} \exp\left(\frac{\mu_0^2A^2t}{\pi^2\omega_0}\right) \left\{ \text{Erf}\left(\frac{\mu_0A\sqrt{t}}{\pi\sqrt{\omega_0}}\right) - \text{Erf}\left[\frac{\mu_0A\sqrt{t}}{\pi\sqrt{\omega_0}} - \frac{\pi\sqrt{\omega_0}}{2\mu_0A\sqrt{t}} \ln\left(\frac{B}{Ax_0+B}\right)\right] \right\} \right) \quad (34)$$

##### 4.2. Génération $\delta(x - x_0)$ pour $\alpha = 1/2$ et champ électrique uniforme

Nous vérifions le calcul pour un champ électrique uniforme en faisant  $A \rightarrow 0$  dans l'équation 34; les termes qui contiennent les fonctions d'erreurs sont multipliés par  $A = 0$  et il ne reste que les deux premiers termes :

$$I_{\text{ind}}(x_0, t) = \frac{eg\mu_0B}{L\pi^{3/2}\sqrt{\omega_0t}} \left( 1 - \lim_{A \rightarrow 0} \left\{ \exp\left[-\frac{\pi^2\omega_0}{4\mu_0^2A^2t} \ln^2\left(\frac{B}{Ax_0+B}\right)\right] \right\} \right)$$

En appliquant la règle de l'Hôpital deux fois, nous simplifions l'expression du courant comme suit :

$$I_{\text{ind}}(x_0, t) = \frac{eg\mu_0B}{L\pi^{3/2}\sqrt{\omega_0t}} \left[ 1 - \exp\left(-\frac{\pi^2\omega_0x_0^2}{4\mu_0^2B^2t}\right) \right] \quad \text{pour } \alpha = 1/2 \quad (35)$$

Nous retrouvons l'expression 6.22 de Tiedje [4] pour  $x_0 = L$ , puisqu'on génère les trous en  $x = L$ , sauf pour un facteur de  $\pi$  tel que discuté à la section 3.4.

La figure 2 présente le courant induit tracé en fonction du temps, pour différentes pentes du champ électrique, avec les paramètres suivants :

Mobilité microscopique ( $\mu_0$ )	0,5 cm <sup>2</sup> V <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup>
Longueur de l'échantillon ( $L$ )	3,8 $\mu\text{m}$
Fréquence ( $\omega_0$ )	10 <sup>12</sup> Hz
Tension appliquée ( $V$ )	100 V

La courbe pleine représente le courant à champ uniforme  $\rho = 0$ , et les autres courbes, le courant pour une charge d'espace  $\rho$  de  $1 \times 10^{15}$ ,  $3 \times 10^{15}$  et  $7 \times 10^{15}$  cm<sup>-3</sup>.



Fig. 2. Courant induit (en unités de charges élémentaires par seconde) en fonction du temps pour une génération piquée en  $x_0 = L$ , pour différentes pentes  $A = (\epsilon p / \epsilon_0 \epsilon_r)$  du champ électrique.

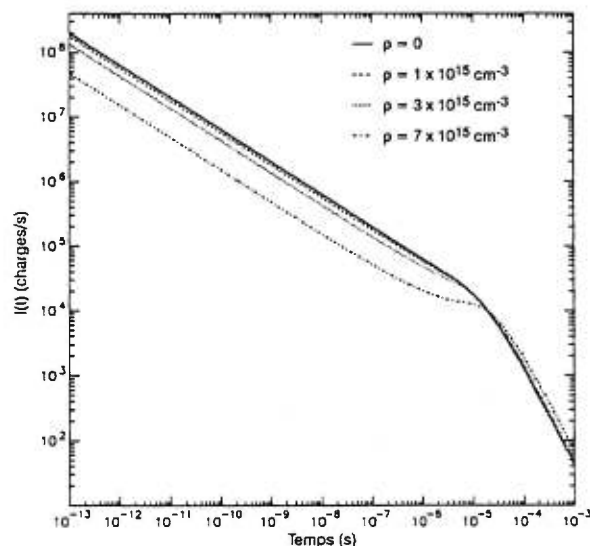
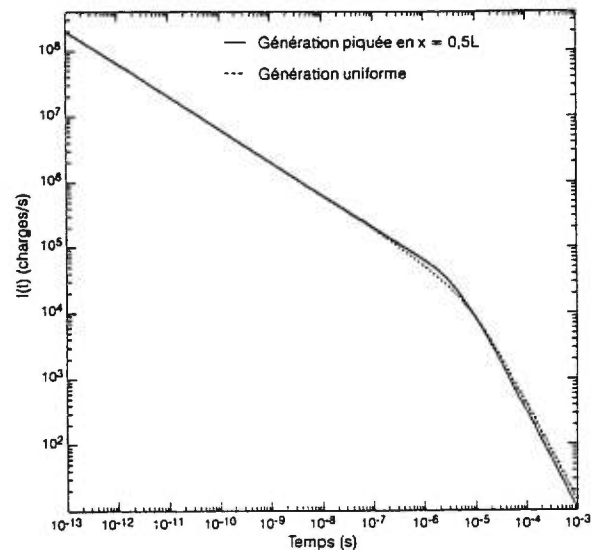


Fig. 3. Courant induit pour une génération piquée et uniforme en fonction du temps pour  $\alpha = 1/2$  et un champ uniforme, avec les paramètres définis à la section 4.2.



#### 4.3. Génération uniforme pour $\alpha = 1/2$ et champ électrique linéaire

Ce calcul s'applique spécifiquement au signal dû aux trous dérivant dans un détecteur suite au passage d'une particule chargée énergétique. La densité des porteurs libres pour une illumination uniforme est

$$n(x, t) = \int_0^L G(x, x_0, t) g(x_0) dx_0 = \frac{1}{L} \int_0^L G(x, x_0, t) dx_0 \quad (36)$$

car  $g(x_0) = 1/L$  pour que la charge totale générée soit égale à 1. Nous utilisons la même méthode que dans le cas de la génération  $\delta(x - x_0)$ ;  $n(x, t)$  peut être facilement déduit en insérant (27) dans (36). Après quelques manipulations algébriques élémentaires, nous obtenons

$$n(x, t) = \frac{g \sqrt{\pi \omega_0}}{2 \mu_0^2 A^2 L t^{3/2}} \int_{\ln[(Ax+B)/B]}^0 y \exp(-y) \exp\left(-\frac{\pi^2 \omega_0 y^2}{4 \mu_0^2 A^2 t}\right) dy \quad \text{pour} \quad t \gg r_{\max} = \frac{1}{\mu_0 A} \ln\left(\frac{Ax+B}{AL+B}\right) \quad (37)$$

$$n(x, t) = \frac{g}{\pi^{3/2} \sqrt{\omega_0} t L} \left( 1 - \frac{B}{Ax+B} \exp\left[-\frac{\pi^2 \omega_0}{4 \mu_0^2 A^2 t} \ln^2\left(\frac{Ax+B}{B}\right)\right] + \frac{\mu_0 A \sqrt{t}}{\sqrt{\pi \omega_0}} \exp\left(\frac{\mu_0^2 A^2 t}{\pi^2 \omega_0}\right) \left\{ \text{Erf}\left(\frac{\mu_0 A \sqrt{t}}{\pi \sqrt{\omega_0}}\right) - \text{Erf}\left[\frac{\mu_0 A \sqrt{t}}{\pi \sqrt{\omega_0}} + \frac{\pi \sqrt{\omega_0}}{2 \mu_0 A \sqrt{t}} \ln\left(\frac{Ax+B}{B}\right)\right] \right\} \right) \quad (38)$$

Le courant induit pour une illumination uniforme peut être calculé en intégrant  $n(x, t)$  sur toute la longueur de l'échantillon, selon l'équation 32

$$I_{\text{ind}}(t) = -\frac{eg\mu_0}{L^2 \pi^{3/2} \sqrt{\omega_0} t} \left( \left( \frac{AL^2}{2} + BL \right) \left[ 1 + \text{Erf}\left(\frac{\mu_0 A \sqrt{t}}{\pi \sqrt{\omega_0}}\right) \right] - \frac{\mu_0 B^2 \sqrt{t}}{2 \sqrt{\pi \omega_0}} \exp\left(\frac{\mu_0^2 A^2 t}{\pi^2 \omega_0}\right) \text{Erf}\left(\frac{\mu_0 A \sqrt{t}}{\pi \sqrt{\omega_0}}\right) + \frac{\mu_0 B^2 \sqrt{t}}{\sqrt{\pi \omega_0}} \right. \\ \times \exp\left(\frac{\mu_0^2 A^2 t}{\pi^2 \omega_0}\right) \left[ 1 - \frac{(AL+B)^2}{2B^2} \right] \text{Erf}\left[\frac{\mu_0 A \sqrt{t}}{\pi \sqrt{\omega_0}} - \frac{\pi \sqrt{\omega_0}}{2 \mu_0 A \sqrt{t}} \ln\left(\frac{AL+B}{B}\right)\right] - \frac{\mu_0 B^2 \sqrt{t}}{2 \sqrt{\pi \omega_0}} \exp\left(\frac{9 \mu_0^2 A^2 t}{\pi^2 \omega_0}\right) \left\{ \text{Erf}\left(\frac{3 \mu_0 A \sqrt{t}}{\pi \sqrt{\omega_0}}\right) \right. \\ \left. \left. - \text{Erf}\left[\frac{3 \mu_0 A \sqrt{t}}{\pi \sqrt{\omega_0}} - \frac{\pi \sqrt{\omega_0}}{2 \mu_0 A \sqrt{t}} \ln\left(\frac{AL+B}{B}\right)\right] \right\} \right) \quad (39)$$

#### 4.4. Génération uniforme pour $\alpha = 1/2$ et champ électrique uniforme

Nous examinons maintenant le cas  $A \rightarrow 0$  dans (38) :

$$n(x, t) = \frac{g}{\pi^{3/2} \sqrt{\omega_0 t} L} \left[ 1 - \exp \left( -\frac{\pi^2 \omega_0 x^2}{4\mu_0^2 B^2 t} \right) \right] \quad (40)$$

L'intégration de la densité des porteurs libres donne le courant induit (éq. 32) :

$$I_{\text{ind}}(t) = \frac{eg\mu_0 B}{L\pi^{3/2} \sqrt{\omega_0 t}} \left[ 1 - \frac{\mu_0 B \sqrt{t}}{\sqrt{\pi \omega_0} L} \text{Erf} \left( \frac{\pi \sqrt{\omega_0} L}{2\mu_0 B \sqrt{t}} \right) \right] \quad (41)$$

On obtient le même résultat de l'équation 39 quand on fait  $A \rightarrow 0$ . La figure 3 montre le courant induit pour une génération piquée en  $x = L/2$  et une génération uniforme dans le détecteur.

#### 5. Charge induite $Q(t)$

L'intégration du courant induit par rapport au temps nous donne la charge induite dans le circuit externe :

$$Q(t) = \int_0^t I(t') dt' \quad (42)$$

La valeur absolue de  $Q(t)$  et, en particulier, la valeur asymptotique  $Q(t \rightarrow \infty)$  est une mesure du nombre de porteurs générés, c'est-à-dire de l'énergie déposée dans un détecteur par une particule ionisante. C'est pourquoi la normalisation absolue de  $Q(t)$  est importante.

##### 5.1. Génération $\delta(x - x_0)$ pour $\alpha = 1/2$ et champ électrique linéaire

Dans cette section, nous voulons calculer la charge induite par les trous pour une génération  $\delta$  et un champ électrique  $F = Ax + B$ . Pour simplifier les calculs, nous calculons d'abord l'intégrale par rapport au temps et, ensuite, par rapport à la position. En insérant l'équation 33 dans (42) et après avoir interchangé les variables d'intégration,

$$\begin{aligned} Q(x_0, t) &= -\frac{eg\sqrt{\pi\omega_0}}{2\mu_0 AL} \int_0^{x_0} \ln(\zeta) \int_0^{t_1} t_1^{-3/2} \exp \left[ -\frac{\pi^2 \omega_0 \ln^2(\zeta)}{4\mu_0^2 A^2 t_1} \right] dt_1 dx = -\frac{eg}{L} \int_0^{x_0} \left\{ 1 - \text{Erf} \left[ \frac{\pi \sqrt{\omega_0} \ln(\zeta)}{2\mu_0 A \sqrt{t_1}} \right] \right\} dx \\ &= -\frac{eg}{L} \left[ x_0 - \frac{Ax_0 + B}{A} \int_{\ln[B/(Ax_0+B)]}^0 y \exp(y) \text{Erf} \left( \frac{\pi \sqrt{\omega_0}}{2\mu_0 A \sqrt{t_1}} y \right) dy \right] \end{aligned}$$

On peut vérifier que lorsque  $t \rightarrow \infty$ , la charge induite  $Q \rightarrow -egx_0/L$ , ce qui correspond bien à la normalisation des charges,  $g$  charges ayant effectué un déplacement  $-x_0$ . Ceci est conforme au théorème de Ramo selon lequel une charge qui parcourt une distance  $x$  induit une charge  $ex/L$ . Sans le facteur  $\pi$  dans l'équation 41, la normalisation de la charge ne serait donc pas respectée. En faisant l'hypothèse que  $t_1 \sim t$ , la charge induite est simplifiée à

$$\begin{aligned} Q(x_0, t) &= -\frac{eg}{L} \left[ x_0 - \left( -\frac{B}{A} \left[ \ln \left( \frac{B}{Ax_0 + B} \right) - 1 \right] \text{Erf} \left[ \frac{\pi \sqrt{\omega_0}}{2\mu_0 A \sqrt{t}} \ln \left( \frac{B}{Ax_0 + B} \right) \right] \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{2\mu_0(Ax_0 + B)\sqrt{t}}{\pi^{3/2} \sqrt{\omega_0}} \left\{ 1 - \frac{B}{Ax_0 + B} \exp \left[ -\frac{\pi^2 \omega_0 \ln^2 \left( \frac{B}{Ax_0 + B} \right)}{4\mu_0^2 A^2 t} \right] \right\} + \frac{2\mu_0^2 A(Ax_0 + B)t}{\pi^2 \omega_0} \left( 1 - \frac{\pi^2 \omega_0}{2\mu_0^2 A^2 t} \right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \times \exp \left( \frac{\mu_0^2 A^2 t}{\pi^2 \omega_0} \right) \left\{ \text{Erf} \left( \frac{\mu_0 A \sqrt{t}}{\pi \sqrt{\omega_0}} \right) - \text{Erf} \left[ \frac{\mu_0 A \sqrt{t}}{\pi \sqrt{\omega_0}} - \frac{\pi \sqrt{\omega_0}}{2\mu_0 A \sqrt{t}} \ln \left( \frac{B}{Ax_0 + B} \right) \right] \right\} \right] \right] \quad (43) \end{aligned}$$

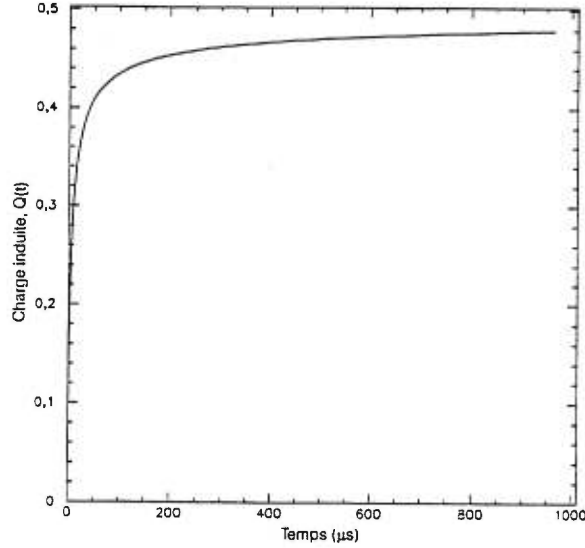
##### 5.2. Génération $\delta(x - x_0)$ pour $\alpha = 1/2$ et champ électrique uniforme

Lorsque le champ électrique est uniforme, la charge induite par les trous devient simplement

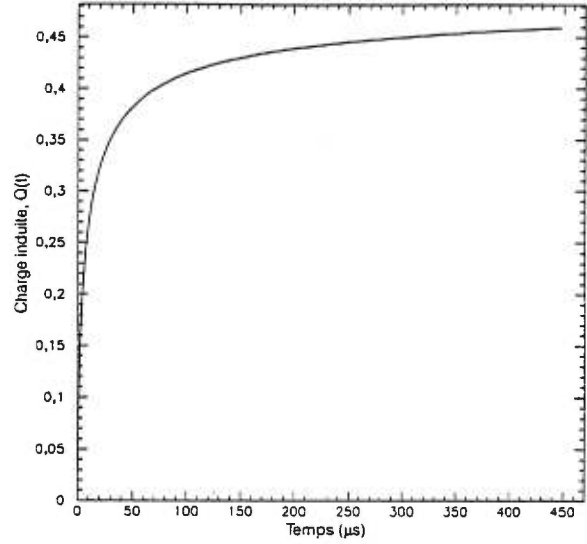
$$Q(x_0, t) = -\frac{eg\mu_0 B}{L\pi^{3/2} \sqrt{\omega_0}} \left\{ 2\sqrt{t} \left[ 1 - \exp \left( -\frac{\pi^2 \omega_0 x_0^2}{4\mu_0^2 B^2 t} \right) \right] + \frac{\pi^{3/2} \sqrt{\omega_0} x_0}{\mu_0 B} \left[ 1 - \text{Erf} \left( \frac{\pi \sqrt{\omega_0} x_0}{2\mu_0 B \sqrt{t}} \right) \right] \right\} \quad (44)$$

On voit que, dans la figure 4, la charge induite tend vers 0,5, car les porteurs générés en  $x_0 = L/2$  n'ont traversé que la moitié de l'échantillon.

**Fig. 4.** La charge induite est tracée en fonction du temps pour une génération piquée en  $x_0 = L/2$  pour  $\alpha = 1/2$  et un champ uniforme.



**Fig. 5.** La charge induite par les trous est tracée en fonction du temps pour une génération uniforme et un champ uniforme.



### 5.3. Génération uniforme pour $\alpha = 1/2$ et champ électrique uniforme

Nous allons calculer la charge induite pour le cas le plus simple,  $\alpha = 1/2$  et  $A = 0$ . L'intégration de l'équation 41 donne

$$Q(t) = \frac{eg\mu_0 B}{L^2 \pi^{3/2} \sqrt{\omega_0}} \left\{ -2L\sqrt{t} - \frac{\pi^{3/2} \sqrt{\omega_0} L^2}{2\mu_0 B} \left[ 1 - \frac{2\mu_0 B \sqrt{t}}{\pi^{3/2} \sqrt{\omega_0} L} \exp\left(-\frac{\pi^2 \omega_0 L^2}{4\mu_0^2 B^2 t}\right) \right] + \frac{\mu_0 B t}{\sqrt{\pi \omega_0}} \left( 1 + \frac{\pi^2 \omega_0 L^2}{2\mu_0^2 B^2 t} \right) \operatorname{Erf}\left(\frac{\pi \sqrt{\omega_0} L}{2\mu_0 B \sqrt{t}}\right) \right\} \quad (45)$$

La charge induite à  $t \rightarrow \infty$  est

$$Q(t \rightarrow \infty) = \frac{eg\mu_0 B}{L^2 \pi^{3/2} \sqrt{\omega_0}} \left\{ -2L\sqrt{t} - \frac{\pi^{3/2} \sqrt{\omega_0} L^2}{2\mu_0 B} + 2L\sqrt{t} \right\} = -\frac{eg}{2} \quad (46)$$

Pour une génération uniforme, la charge induite par les trous ou les électrons est  $-eg/2$  puisque, en moyenne, chaque porteur traverse la moitié de l'échantillon. La somme de ces charges induites donne une charge induite totale  $-eg$ , tel qu'attendu. La figure 5 montre la charge induite pour une génération uniforme.

## 6. Conclusion

Le transport de charge par piégeage multiple dans une distribution d'états localisés décroissant exponentiellement a été étudié pour un champ électrique variant linéairement ( $F(x) = Ax + B$ ) à l'intérieur du détecteur. En utilisant la transformée de Laplace, nous avons trouvé la fonction de Green qui décrit la propagation de charge du système considéré; nous avons aussi remarqué que la méthode du col permet de résoudre la transformée inverse de Laplace facilement. Pour  $\alpha = 1/2$  correspondant au cas des trous à la température ambiante dans le a-Si:H, nous avons obtenu une expression analytique du courant induit pour une génération piquée ou une génération uniforme, ainsi que pour la charge induite qui est déduite du courant. Nous avons vérifié que la normalisation de charge est respectée en calculant la valeur asymptotique  $Q(t \rightarrow \infty)$ . Par ailleurs, ces calculs ont été

comparés, dans le cas  $\alpha = 1/2$ , avec une simulation Monte-Carlo [13], l'accord entre les deux calculs, pour les courbes  $n(x, t)$ ,  $I(x, t)$  et  $Q(t)$ , s'avérant exceptionnel [13]. Ces calculs ont permis de reproduire les signaux générés par le passage d'une particule dans un détecteur p-i-n au a-Si:H [13].

## Remerciements

Les auteurs tiennent à remercier A. Yelon de son intérêt pour ce travail et ses commentaires lors de la lecture de ce manuscrit. Ce travail a été supporté par le Conseil de recherches en sciences naturelles et en génie du Canada et le Fonds pour la formation des chercheurs et l'aide à la recherche du Québec.

## Bibliographie

1. F.W. Schmidlin. Phys. Rev. B: Condens. Matter, **16**, 6 (1977).
2. J. Noolandi. Phys. Rev. B: Condens. Matter, **16**, 10 (1977).
3. T. Tiedje. Information about band-tail states from time-of-flight experiments. Éditeur : J.I. Pankove. Academic Press Inc., New York. 1984. pp. 207-237.
4. T. Tiedje. Time-resolved charge transport in hydrogenated amorphous silicon. Éditeur : J. Joannopoulos et G. Lucovsky. Springer-Verlag, New York. 1984. pp. 261-300.

5. S.N. Kaplan, J.R. Morel, V. Perez-Mendez et G. Schnurmacher. *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **NS-33**, 351 (1986).
6. T. Pochet, J. Dubeau, L.A. Hamel, B. Equer et A. Karar. *J. Non-Cryst. Solids*, **115**, 72 (1989).
7. S. Qureshi, V. Perez-Mendez, S.N. Kaplan, I. Fujieda, C. Cho et R.A. Street. *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **149**, 649 (1989).
8. S. Qureshi, V. Perez-Mendez, S.N. Kaplan, I. Fujieda, C. Cho et R.A. Street. *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **NS-36**, 194 (1989).
9. L.A. Hamel, J. Dubeau, T. Pochet et B. Equer. *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **38**, 251 (1991).
10. J. Dubeau, T. Pochet, L.A. Hamel, B. Equer et A. Karar. *Nucl. Instrum. Methods*, **B54**, 458 (1991).
11. T. Pochet. Thèse de Ph.D., Département de physique, Université de Montréal, Montréal. 1991.
12. A. Kyrala. *Applied functions of a complex variable*. John Wiley & Sons, New York. 1972.
13. L.A. Hamel et W.C. Chen. *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **NS-42** août 1995. Sous presse.

**2.2.2 Article II: Charge transport in a-Si:H detectors: Comparison of analytical and Monte Carlo simulations**

Publié dans IEEE Trans. Nucl. Sci. **42**, 235 (1995).

# Charge Transport in a-Si:H Detectors: Comparison of Analytical and Monte Carlo Simulations<sup>1</sup>

Louis-André Hamel and Wen Chao Chen

Groupe de recherche en physique et technologie des couches minces  
 Département de physique, Université de Montréal  
 P.O. Box 6128, Downtown Station  
 Montréal, Québec, Canada, H3C 3J7

## Abstract

To understand the signal formation in hydrogenated amorphous silicon (a-Si:H) p-i-n detectors, dispersive charge transport due to multiple trapping in a-Si:H tail states is studied both analytically and by Monte Carlo simulations. An analytical solution is found for the free electron and hole distributions  $n(x, t)$  and the transient current  $I(t)$  due to an initial electron-hole pair generated at an arbitrary depth in the detector for the case of exponential band tails and linear field profiles; integrating over all e-h pairs produced along the particle's trajectory yields the actual distributions and current; the induced charge  $Q(t)$  is obtained by numerically integrating the current. This generalizes previous models used to analyze time-of-flight experiments. The Monte Carlo simulation provides the same information but can be applied to arbitrary field profiles, field dependent mobilities and localized state distributions. A comparison of both calculations is made in a simple case to show that identical results are obtained over a large time domain. A comparison with measured signals confirms that the total induced charge depends on the applied bias voltage. The applicability of the same approach to other semiconductors is discussed.

## I. INTRODUCTION

The electric signal produced by a semiconductor particle detector is related to the electric properties of the base material. The ultimate performance of such detectors then depends on our detailed understanding of these properties. Of main interest are, on one hand, the ionized impurity or defect concentrations in the reversed biased detector that determine the electric field profile and, on the other hand, the carriers' transport properties i.e. the mobilities, the trapping rates to various trap states and the detrapping rates from these localized states.

An analytical solution to the charge transport problem in crystalline semiconductors with trapping and detrapping on a single trap state has been found independently, using different approaches, by Tefft [1] and by Zanio, Akutagawa and Kikuchi [2]. A solution appropriate to a-Si:H has been given

by Tiedje [3,4] by considering a continuous distribution of localized states decreasing exponentially from the band edge into the mobility gap. All these investigations were restricted to the case where the electric field is uniform in the detector and where the free carriers are generated at one interface, a situation well suited for the analysis of time-of-flight experiments in which the transient signal due to a short pulse of strongly absorbed light in a pulsed biased junction are analysed in order to determine the material's electronic properties. A more general analytical solution, appropriate to a-Si:H detectors, is given in section II, considering exponential band tails, a linearly varying electric field and electron-hole pair generation at arbitrary depths.

For more general cases of electric field profiles or localized state distributions, analytical solutions are impractical and a Monte Carlo approach is appropriate. A Monte Carlo program has thus been written to study transient signals in a semiconductor detector by simulating the transport of charge carriers in an arbitrary electric field with trapping and detrapping in an arbitrary energy and position distributions of trap states. The algorithm of our Monte Carlo and some results are presented in section III.

A direct comparison of both approaches in the simple case where there exists an analytical solution is made in section IV and a comparison with experimental data is made in section V. A short discussion of these results in a-Si:H and of similar results in other materials of interest is found in section VI.

## II. ANALYTICAL SOLUTION

The transport of carriers produced by an ionizing radiation in a-Si:H is calculated under the assumptions of exponential band tails, no recombination during the transport and no diffusion which would only add negligible dispersion compared to the multi-trapping process. The evolution of the density distribution is then determined by the one-dimensional transport equations

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}[\mu_0 F n] = \sum_i (k_t^i n_i - k_c^i n) + g(x, t) \quad (1)$$

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = k_c^i n - k_t^i n_i$$

<sup>1</sup> This work is supported by the Natural Sciences and Engineering Research Council of Canada and the Fonds Québécois pour la Formation des Chercheurs et l'Aide à la Recherche.

where  $n(x, t)$  is the free carrier density distribution,  $n_i(x, t)$  the density of carriers trapped in the level  $i$ ,  $k_c^i$  and  $k_r^i$  the capture and release rates to and from level  $i$  and  $g(x, t)$  the generation function.  $\mu_0$  is the mobility of free carriers and  $F(x)$  is the electric field. The solution follows the same lines as used by Tiedje [3,4] but is generalized to the case of a linearly varying electric field  $F(x) = ax+b$  and an initial generation of carriers at an arbitrary depth in the detector. We first find the solution for a single carrier generated at a depth  $x_0$  in the detector, i.e.  $g(x, t) = \delta(x - x_0) \delta(t - 0^+)$  with initial conditions  $n(x, 0) = n_i(x, 0) = 0$ . The solution for this particular case provides  $G(x, x_0, t)$ , the system's Green function. The general solution for an arbitrary initial generation  $g(x)$  will then be found by integrating  $G(x, x_0, t)$  over the detector's length  $L$

$$n(x, t) = \int_0^L G(x, x_0, t) g(x_0) dx_0. \quad (2)$$

For a-Si:H with exponential distributions of localized states  $g(E) = g_0 \exp(-E/kT_c)$ , the sum in eq. (1) becomes an integral. The trapping rate on level  $E$  is  $k_c(E) = g(E) \sigma \langle v \rangle$  where  $\sigma$  is the capture cross section and  $\langle v \rangle$  is the free carrier's mean velocity. The detrapping rate is  $k_r(E) = \omega_0 \exp(-E/kT)$  with  $\omega_0$  the attempt-to-escape frequency. Detailed balance requires that  $\omega_0 = g_0 \sigma \langle v \rangle k T$ . Electrons and holes in a-Si:H show very different transport properties due mainly to their different band tail characteristic temperatures  $T_c$ ; at room temperature, the dispersion parameter  $\alpha = T/T_c$  is found to be nearly 1 for electrons and 1/2 for holes. Electron transport is then mainly non dispersive with typical transit times in the nanosecond range while holes are strongly dispersive and transit times of many microseconds produce ballistic deficits that affect the resolution. Although a general solution has been found which will be published elsewhere, for the present purpose, we will only consider holes and results are thus given only for the case  $\alpha = 1/2$ . In this specific case, we find

$$G(x, x_0, t) = \frac{-H(x_0-x) H(t_1) \sqrt{\pi} \omega_0 \ln \xi}{2 \mu_0^2 a (ax+b) t_1^{3/2}} \exp \left[ \frac{-\pi^2 \omega_0 \ln^2 \xi}{4 \mu_0^2 a^2 t_1} \right] \quad (3)$$

with  $t_1 = t - \frac{1}{\mu_0 a} \ln(\xi)$  and  $\xi = \frac{ax+b}{ax_0+b}$ , a solution which is valid for  $t \gg \omega_0^{-1}$ . In the uniform field limit  $a \rightarrow 0$  and using  $x_0 = 0$ , eq. (6.20) of Tiedje [3] is found, except for a factor  $\pi$ . While this factor is usually unimportant for time of flight experiments in which only the shape of  $I(t)$  is needed, it is essential that the charge induced in a particle detector be properly normalized in order to provide energy information.

Fig. 1a shows the evolution of  $G(x, x_0, t)$  for  $\alpha = 1/2$  at different times for one carrier generated at  $x_0 = L/2$  and drifting to the left. The numerical values for the various parameters for figures 1, 2 and 3 are:

$$\begin{aligned} \mu_0 &= 0.5 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1} \\ \sigma &= 10^{-15} \text{ cm}^2 \\ \langle v \rangle &= 10^7 \text{ cm s}^{-1} \\ g_0 &= 4.7 \cdot 10^{21} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-3} \\ \omega_0 &= 10^{12} \text{ s}^{-1} \\ \alpha &= 1/2 \\ V &= 100 \text{ V} \\ L &= 3.8 \text{ } \mu\text{m}. \end{aligned}$$

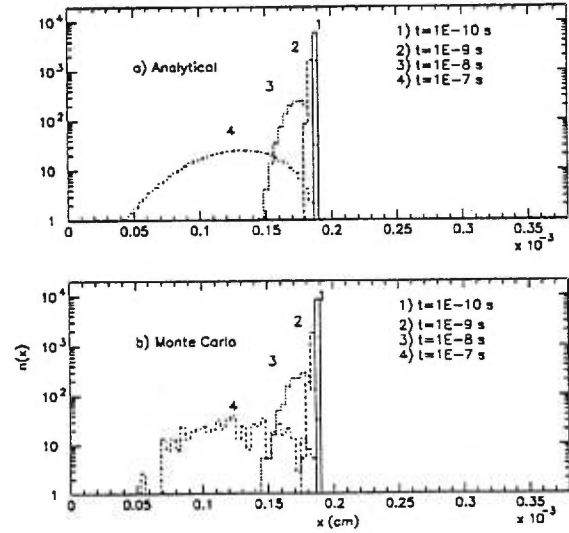


Fig. 1 The evolution of the free density distribution  $G(x, x_0, t)$  of a single hole initially generated at position  $L/2$  and drifting to the left as calculated a) analytically and b) by Monte Carlo.

The current  $I(t)$  induced in the external circuit by the moving carrier is given by Ramo's theorem and integrating  $I(t)$  yields the induced charge  $Q(t)$

$$I(t) = \frac{e \mu_0}{L} \int_0^L n(x, t) F(x) dx \quad (4)$$

$$Q(t) = \int_0^t I(t') dt'. \quad (5)$$

Closed form solutions are found for  $I(t)$  and  $Q(t)$  in the case  $\alpha = 1/2$ ,  $F(x) = ax + b$  and charge generation which is either localized at  $x = x_0$  or uniform across the detector. Fig. 2 shows  $I(t)$  and  $Q(t)$  for the same carrier as in Fig. 1a generated at  $x_0 = L/2$ . Note that  $Q(t)$  asymptotically reaches 1/2 unit of charge when the carrier has travelled a distance  $L/2$ , indicating that our expressions are correctly normalized. This constitutes a major improvement over our earlier analysis [5,7] in which a generation position dependent factor  $N(x_0)$  was needed to ensure proper charge normalization i.e. that a carrier travelling a distance  $d$  in the detector induce a charge  $ed/L$ , an

inconvenience that was later found to have arisen from a missing factor  $1/\pi$  in one of the asymptotic expressions for the current, eq. (A16) of ref. [4], on which our model was based, causing an  $x_0$  dependent underestimation of the transit time  $t_T$  and an overestimation of the current before  $t_T$ . These difficulties are solved by the present calculation.

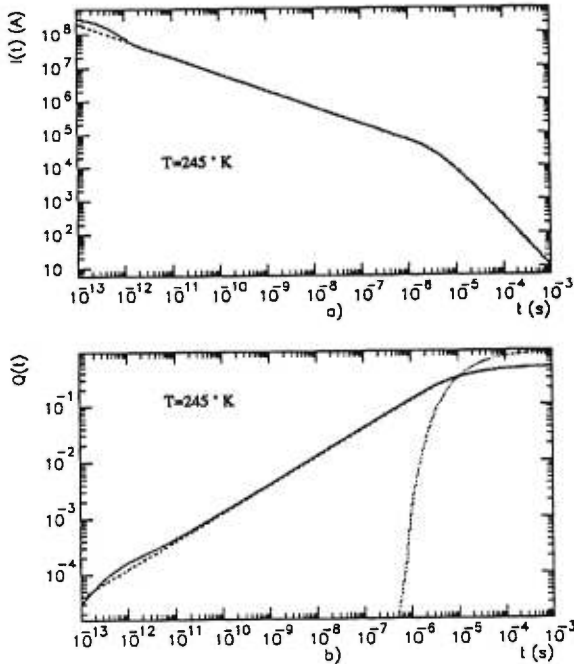


Fig. 2 The current (a) and the charge (b) induced per hole initially generated at position  $L/2$  and drifting to the left as calculated analytically (dashed line) and by Monte Carlo (full line). Also shown in (b) is the actual charge collected on the electrode (dots).

### III. MONTE CARLO SIMULATION

In our Monte Carlo simulation, carriers are generated one at a time at a given position  $x$  which may be a fixed value  $x_0$  or be randomly generated according to a generation function  $g(x)$ . Each carrier's history is recorded when it travels across the detector through numerous cycles of randomly generated events of 1) free carrier transport in the extended states, 2) trapping into a localized state and 3) thermal detrapping from this localized state into the band. Free carriers drift at a velocity  $v = \mu_0 F$  and contribute a current  $I = e v/L$ . The time before the next trapping event  $t_c$  is randomly generated from an exponentially decreasing probability distribution of characteristic time  $\tau = k_c^{-1}$  where  $k_c$  is the total capture rate integrated over all trap states. With  $R_1$  a random number uniformly generated between 0 and 1,  $t_c = -\tau \ln(1 - R_1)$ . The trap energy is selected by a second random number  $R_2$

according to the density of localized states. For exponential band tails,  $E = -k T_c \ln(1 - R_2)$ . The thermal detrapping time is then selected by a third random number according to  $t_d = -\omega_0^{-1} \exp(E/kT) \ln(1 - R_3)$ . The cycle is repeated until the carrier is collected and a new carrier is generated. All those expressions and the algorithm can be easily modified to introduce various physical processes as diffusion, field dependent mobilities, field enhanced detrapping, hopping between two localized states, arbitrary field profiles and arbitrary tail state distributions, variable cross sections, etc. Such simulations for various band tail distributions and detrapping probabilities have been made but to establish a comparison with the analytical solution, we will restrict ourselves with the simple case discussed in section II and with the same choice of parameters.

By generating a large number of carriers, typically  $10^6$ , and summing their histories, histograms of the free carrier distribution  $n(x, t)$ , the distribution into various traps  $n_i(x, t, E)$ , the current  $I(t)$ , the induced charge  $Q(t)$  and any other desired information are produced. Fig. 1b shows the density distribution in the valence band for a hole initially generated at position  $L/2$  and drifting to the left. Fig. 2 shows a) the current  $I(t)$  and b) the charge  $Q(t)$  induced by this same carrier. The actual collected charge that has reached the left electrode is also given in Fig. 2b. One sees that the break in the current decay at the so-called transit time occurs when a significant fraction of the carriers have been collected.

Fig. 3 presents the evolution of the probabilities of occupation for the valence band and for five energy intervals into the band tail. The time spent in the band decreases steeply at short times and the occupation probability for each energy interval peaks at a time which is shorter for shallower traps; as time goes on, the carriers move deeper into the band tail.

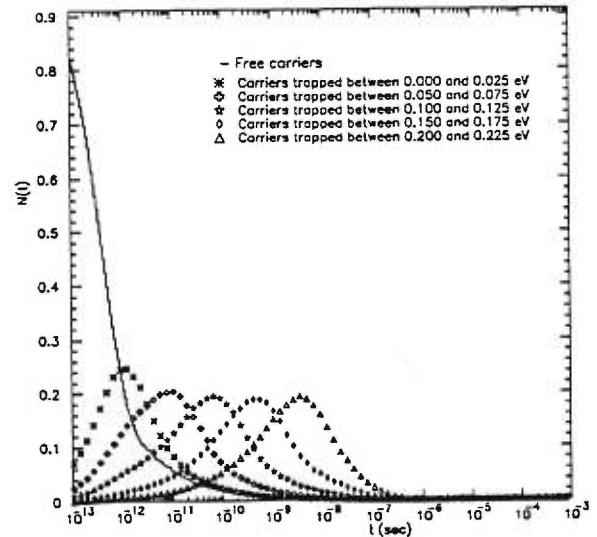


Fig. 3 The evolution of the fraction of time spent in the valence band and various trap levels for a single hole initially generated at  $L/2$ .



#### IV. COMPARISON OF DIFFERENT APPROACHES

Since the same set of parameters was used in the analytical and Monte Carlo calculations presented on all figures, these can be directly compared and it is clear that both calculations provide identical results on a wide time interval. The free carrier density distributions shown on Fig. 1 appear to be identical both in shape and absolute values. The obvious advantage of an analytical solution when available is observed when comparing the density distributions at large  $t$  where the Monte Carlo statistical fluctuations are important although this particular Monte Carlo simulation ran for a few hundred hours on an Apollo DN 10000 computer while the analytical solution is obtained in a few minutes.

When the current and induced charge are compared on Fig. 2, we find perfect agreement for times larger than  $\omega_0^{-1}$  i.e. over a range much wider than the range of practical interest for nuclear detectors. The discrepancy at earlier times is due to approximations made in the analytical calculations which are no longer valid. For times larger than  $10^{-12}$  s, the agreement is not affected by the lack of statistical precision for  $n(x, t)$  in the Monte Carlo at large times since  $I(t)$  only depends on the integral of  $n(x, t)$ . As a consequence, short Monte Carlo runs of  $10^4$  carriers are sufficient to calculate  $I(t)$  and  $Q(t)$  which are the main quantities of interest.

Similar Monte Carlo simulations have been made in the past by Marshall [8] and Silver, Cohen and Adler [9] but such an agreement with analytical results had not been obtained due to either the analytical model used for the comparison or the Monte Carlo or both. Difficulties in the Monte Carlo simulations may arise from statistical uncertainties or numerical truncation errors when summing a large number of small values especially at times larger than the transit time or from the use of a set of parameters that fail to satisfy detailed balance.

#### V. COMPARISON WITH MEASURED SIGNALS

Transient charge signals produced by the passage of charged particle through a-Si:H p-i-n detectors of thicknesses of 5.7 and 18  $\mu\text{m}$  had previously been measured [5-7]. These measurements were made at grazing angles both to increase the deposited energy and to minimize columnar recombination. For thin detectors, charge generation is almost uniform across the detector and electrons and holes should contribute equally to the transient signal. Indeed, experimental signals indicated a fast ( $< 15$  ns) component due to electron collection followed by a much slower (few microseconds) hole signal, both components being of the same amplitude. This slow hole collection is responsible for significant ballistic deficits and poor energy resolution when standard nuclear electronics with shaping times of a few microseconds are used although the resolution could be partially restored by proper shaping or waveform analysis if the expected response of such detectors is well understood.

Fig. 4 shows that the shape of experimental signals are well reproduced by the present calculations applied to the case of uniform generation. Various signals at different applied bias voltages could be reproduced with the same set of physically reasonable parameters. The agreement with measured signals is better with this model than with a simpler model that was previously used [5,7]. But as was the case with our previous model, in order to reproduce the absolute amplitude of signals for different applied bias voltages, a normalization factor increasing with the electric field must still be introduced, indicating that the charge collection efficiency is field dependent. Possible explanations for this phenomenon are the same as previously reported [5,7] i.e. a field dependent initial recombination of electron-hole pairs which would be well described by Onsager's theory of geminate recombination with a critical radius of 34 angstroms or a fast non-geminate recombination of electrons and holes in the column of high carrier density produced by the charged particle [7].

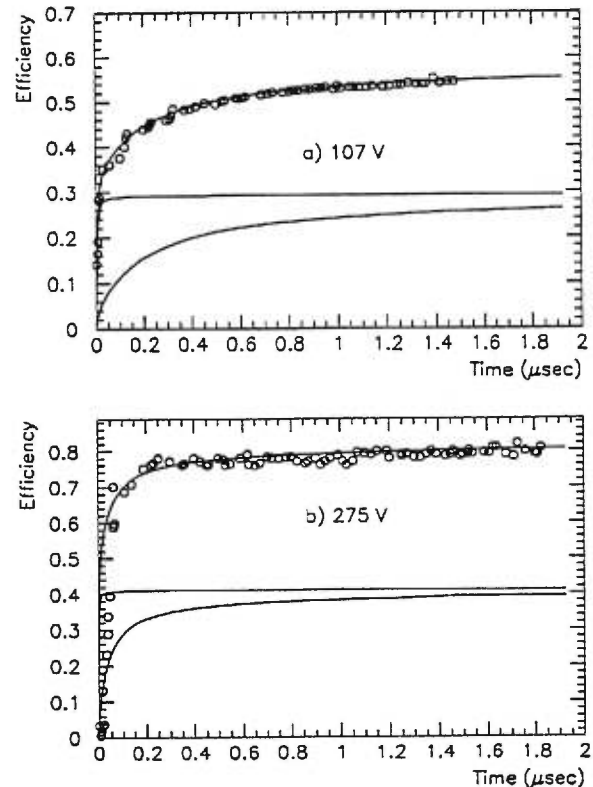


Fig. 4 Comparison of calculated and measured signals in a 5.7  $\mu\text{m}$  detector at a) 107 V and b) 275 V [7]. Calculated contributions from electrons and holes show that holes are responsible for the slow component. The efficiency scale is normalized to the signal measured in a c-Si detector.

## VI. DISCUSSION

The perfect agreement between results obtained from these two very different approaches gives us better confidence in both methods. Although the analytical calculation is much faster, the Monte Carlo is easier to adapt to new situations or materials and can be applied to more general cases to study various physical processes that can not be solved analytically. It has recently been used to study the effect of different band tail distributions and of the Meyer-Neldel compensation rule [10] by introducing attempt to escape frequencies that are larger for deeper localized states.

The same approach has also been applied to crystalline materials. An analytical solution for the transport in presence of a single trap has been obtained for the case of a linearly varying electric field and charge generation at arbitrary positions in the detector which generalizes the results found in ref. [1,2]. This solution has been compared to experimental signals in CdTe and radiation damaged Si detectors and a waveform analysis algorithm is being developed in order to improve the resolution of CdTe detectors. Only minor modifications were needed to adapt our Monte Carlo to crystalline detectors to study cases where more general field profiles and field dependent mobilities must be considered. In crystalline materials, reliable Monte Carlo results are obtained in a few minutes.

## VII. CONCLUSION

Detailed analysis of charge transport in a-Si:H has been made both analytically and by Monte Carlo. The analytical solution obviously provides faster results but is restricted to a few simple cases while the Monte Carlo can be applied to virtually any situation. In cases that can be solved analytically, both techniques give identical results.

This provides a better understanding of signal formation in a-Si:H particle detectors. In addition, the Monte Carlo is a useful tool to study various physical processes of practical and fundamental interest in a-Si:H and similar materials.

The same approach provides similarly good results in crystalline materials. These new tools will prove to be particularly useful to study the response of semiconductor detectors in presence of trapping as in CdTe or radiation damaged silicon detectors.

## VIII. ACKNOWLEDGEMENTS

We wish to thank Dr. R. Bornais and Dr. B. Lorazo from the Groupe de physique des particules for providing access to the Group's computing resources that have been essential to this work. Mr. M. Bergeron's assistance in implementing both algorithms into computer programs is gratefully acknowledged.

## IX. REFERENCES

- [1] W. E. Tefft, *J. Appl. Phys.* **38** (1967) 5265.
- [2] K. R. Zanio, W. M. Akutagawa and R. Kikuchi, *J. Appl. Phys.* **39** (1968) 2818.
- [3] T. Tiedje, in *Physics of Hydrogenated Amorphous Silicon II*, ed. by J. Joannopoulos and G. Lucovski, Springer-Verlag, 1984, pp. 261-300.
- [4] T. Tiedje, in *Semiconductor and Semimetals*, ed. by J. I. Pankove, Academic Press, 1984, pp. 207-237.
- [5] L. A. Hamel, J. Dubeau, T. Pochet and B. Equer, *IEEE Trans. on Nuclear Science* **38** (1991) 251.
- [6] J. Dubeau, T. Pochet, L.A. Hamel, B. Equer and A. Karar, *Nucl. Instr. and Meth. B* **54** (1991) 458.
- [7] T. Pochet, Ph. D. Thesis, Université de Montréal, 1991.
- [8] J. M. Marshall, *Phil. Mag. B* **36** (1977) 959.
- [9] M. Silver, L. Cohen and D. Adler, *Appl. Phys. Lett.* **40** (1982) 261.
- [10] W. Meyer and H. Neldel, *Z. Tech. Phys.* **12** (1937) 588.

### 2.2.3 Comparaison entre les calculs analytiques et Monte Carlo: Suite

Nous avons présenté à la section précédente une comparaison entre les calculs analytiques et Monte Carlo pour le cas particulier où  $\alpha = 1/2$  avec une génération piquée au centre du détecteur et un champ électrique uniforme. Nous faisons ici une nouvelle comparaison entre les calculs analytiques et Monte Carlo avec un champ électrique linéaire,  $F(x) = Ax + B$ , et une génération en  $x = L$  pour les trous. La Fig. 11 montre la comparaison entre le calcul analytique représenté par la ligne pointillée selon l'Éq. (34) de l'article I, et le Monte Carlo représenté par la ligne pleine pour  $\rho = 7 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ . L'accord peut être considéré parfait pour  $t > \nu_0$  tel qu'on s'y attendait. Cette section complète une série de comparaisons entre les calculs analytique et Monte Carlo. Ces calculs ont démontré que les deux approches donnaient les mêmes résultats pour  $t > 1/\nu_0$ . Par contre, pour  $t < 1/\nu_0$ , le calcul analytique n'est plus valide à cause de l'approximation  $s/\nu_0 \sim 0$  dans l'Éq. (18) de l'article I.

## 2.3 Modélisation de l'expérience de temps de vol (TOF)

Nous commençons ici notre étude systématique sur le modèle de transport par piégeage multiple (MT) standard pour différents champs électriques et températures dans le a-Si:H.

### 2.3.1 Introduction

Sans approximations, les équations de transport de charge, présentées au chapitre 1 à la section 1.3.1.2, ne possèdent pas de solution analytique exacte. En principe l'article I de ce chapitre suffit à nous convaincre qu'une solution analytique générale pour  $I(t)$  et  $Q(t)$  est très difficile à obtenir, pour ne pas dire impossible. Seul pour le cas  $\alpha = 1/2$ , une solution analytique pour  $I(t)$  existe

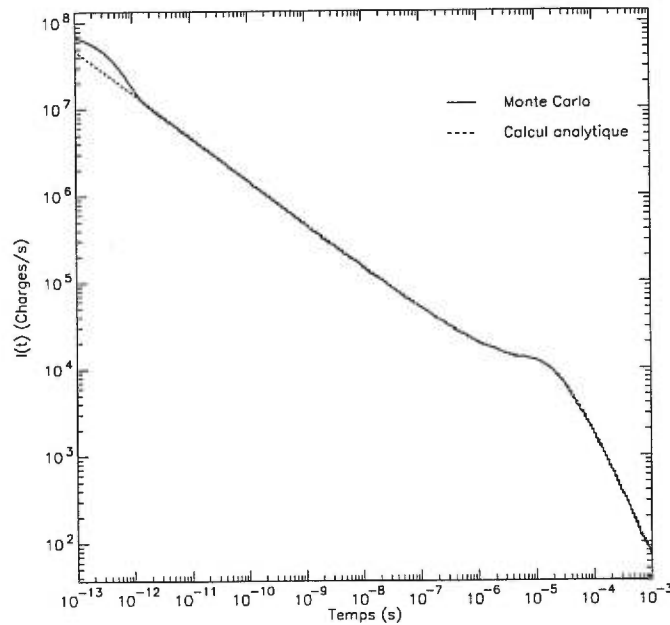


Figure 11. Comparaison entre les calculs analytique (ligne pointillée) et Monte Carlo (ligne pleine) pour le courant induit,  $I(t)$ , pour un champ électrique linéaire. L'éq. (34) de l'article I a été utilisée pour le calcul analytique. Nous avons utilisé les mêmes paramètres que dans le tableau I de l'article I. Nous avons pris  $\rho = 7 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ .

et est en parfait accord avec les calculs MC pour  $t > 1/\nu_0$ . Nous résolvons alors ce problème de transport par méthode Monte Carlo. Les calculs Monte Carlo permettent également de vérifier la validité des approximations dans les calculs analytiques. Pour tester le présent modèle, nous comparerons les calculs MC aux données expérimentales pour les électrons et les trous. Les données datent des années '80 et ont été obtenues par différents groupes de recherche oeuvrant dans le domaine du silicium amorphe. Les références sont données dans l'article.

Les modèles de transport doivent être capables de reproduire les paramètres de dispersion  $\alpha_1$  et  $\alpha_2$ , respectivement avant et après le temps de transit et la mobilité de dérive avec le même ensemble de paramètres de départ. Ce critère

constitue une difficulté majeure pour les modèles de transport dans le a-Si:H. Rappelons que nous utilisons d'abord les mêmes hypothèses physique que les calculs analytiques et que la simulation MC ne contient aucune autre approximation présente dans les calculs.

### **2.3.2 Article III: Monte Carlo simulation of transient currents in a-Si:H**

Publié dans *Amorphous Silicon Technology – 1996*, ed. by M. Hack, E.A. Schiff, S. Wagner, R. Schropp and A. Matsuda (Materials Research Society, Pittsburgh, 1996) p. 759.

# MONTE CARLO SIMULATION OF TRANSIENT CURRENTS IN a-Si:H

WEN CHAO CHEN AND LOUIS-ANDRÉ HAMEL

Groupe de recherche en physique et technologie des couches minces (GCM)

Université de Montréal, PO Box 6128 Downtown Station, Montréal (QC), Canada, H3C 3J7

Email: chen@lps.umontreal.ca, hamel@lps.umontreal.ca

## ABSTRACT

Multi-trapping transient currents through pure exponential band tails are calculated by Monte Carlo simulations of unprecedented accuracy. The time and energy dependent carrier distributions, the current and the charge signals are obtained. The transit time  $t_T$  and the dispersion parameters  $\alpha_1$  and  $\alpha_2$ , before and after the transit time, are extracted from the simulated currents. Results are presented for the expected temperature dependence of  $\alpha_1$  and  $\alpha_2$  and of the drift mobility  $\mu_D$  for electrons and holes in a-Si:H. At low temperature,  $\alpha_1 = \alpha_2 = T/T_0$  is found, but above  $T \approx 0.6T_0$ ,  $\alpha_1$  bends downwards to saturate at 1 at high temperature while  $\alpha_2$  bends upwards, clearly improving the agreement with the experimental data. The temperature dependence of the drift mobility  $\mu_D$  is well reproduced for holes with a microscopic mobility of  $\mu_0 = 0.5 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ . For electrons, the agreement is also excellent but the surprisingly low value of  $\mu_0 = 4 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$  is found.

## INTRODUCTION

Transient currents for electrons and holes in a-Si:H from Time-of-Flight (TOF) experiments are known to be well described by power laws both before and after the transit time. On a log-log plot, this shows as two straight lines, over many decades in time, that intersect at a point which is taken as the measured transit time  $t_T$ . Writing the time dependence of  $I(t)$  as  $\sim t^{-1+\alpha_1}$  and as  $\sim t^{-1-\alpha_2}$  before and after the transit time, respectively, it is observed that  $\alpha_1 \approx \alpha_2 \approx T/T_0$  where  $T_0$  is a characteristic temperature.

These experimental facts have long been interpreted as evidence for multiple trapping transport through an exponential distribution of localized states

$$g(E) = g_0 \exp(-E/kT_0). \quad (1)$$

Analytical models based on these simple assumptions could indeed reproduce a power law behavior for the transient currents with the dispersion parameters strictly obeying the relation  $\alpha_1 = \alpha_2 = T/T_0$ .<sup>1,2</sup> The temperature dependence of the drift mobility

$$\mu_D = L^2/Vt_T, \quad (2)$$

where  $L$  is the sample thickness and  $V$  is the bias voltage, is also reproduced by the model.

Deviations of experimental data from those predictions are nevertheless observed, either in the shape of the current curves or in the temperature dependence of the dispersion parameters or of the drift mobility. These deviations can be interpreted as evidence for oversimplifications in the model, in particular in the shape of the localized states distributions, or also for effects other than pure multiple trapping, as hopping or Meyer-Neldel effect. But differences between the experiments and the model predictions can also arise, not from the deficiency of the starting assumptions, but from approximations in subsequent calculations.

A Monte Carlo program has been written to provide simulated transient currents that would be free of the limitations encountered with other approaches. In particular, the shape of the localized state distributions, the expressions for the various trapping and detrapping rates, and the electric field profile can be easily modified. Various physical processes as hopping, Meyer-Neldel effect, field dependent mobilities, field enhanced detrapping and so on can also be incorporated by rewriting the transition probabilities. In the simplest cases, the Monte Carlo simulations can be compared with predictions of analytical models having

identical physical assumptions and parameters to check the robustness of those predictions. The simulations can also be compared with actual data to decide whether the hypotheses are confirmed and to determine the set of parameters that better describes the data in the framework of a given set of hypotheses.

In the present paper, we only consider pure multitrapping transport in exponential band tails. Time-of-Flight experiments are simulated at various temperatures for electrons and holes. The dispersion parameters and the transit times are extracted from the current curves. The temperature dependences of the dispersion parameters and of the drift mobility are compared with the predictions of an analytical model and with some data.

The Monte Carlo algorithm is shortly described in the next section. Results of the simulations are then presented. A discussion and conclusions follow.

## MONTE CARLO SIMULATION MODEL

In our Monte Carlo, in order to simulate Time-of-Flight experiments, a large number of carriers are generated, one at a time, at position  $x = 0$  and each carrier's history is recorded when it travels across the sample through numerous cycles of randomly generated events of 1) free carrier transport in the extended states, 2) trapping into a localized state and 3) thermal release from this localized state into the band. Free carriers drift at a velocity  $v = \mu_0 V/L$  and contribute a current  $I = ev/L$ . The time before the next trapping event  $t_c$  is randomly generated from an exponentially decreasing probability distribution of characteristic time  $k_c^{-1}$  where  $k_c$  is the total capture rate integrated over all trap states

$$k_c = \int k_c(E) dE = \int g(E) \sigma \bar{v} dE, \quad (3)$$

where  $\sigma$  is the cross section and  $\bar{v}$  is the free carrier mean velocity. With  $R_1$  a random number uniformly generated between 0 and 1,  $t_c = -k_c^{-1} \ln(1 - R_1)$ . The trap energy is selected by a second random number  $R_2$  according to the density of localized states; for exponential band tails (eq.1),  $E = -kT_0 \ln(1 - R_2)$ . The thermal release rate from level  $E$

$$k_r(E) = \nu_0 \exp(-E/kT), \quad (4)$$

where  $\nu_0$  is the attempt-to-escape frequency, is simulated by selecting the detrapping time  $t_d$  from a third random number according to  $t_d = -\nu_0^{-1} \exp(E/kT) \ln(1 - R_3)$ . The cycle is repeated until the carrier is collected.

## RESULTS OF THE SIMULATION

Monte Carlo simulations have been made for temperatures ranging from 100 K to 300 K for electrons and from 180 K to 360 K for holes. In those simulations, the attempt-to-escape frequency had been set to  $\nu_0 = 10^{11} \text{s}^{-1}$  for electrons and  $\nu_0 = 10^{12} \text{s}^{-1}$  for holes.<sup>1</sup> The product  $g_0 \sigma \bar{v}$  is then automatically selected by the condition of detailed balance; assuming  $N_0 \approx g_0 kT$ , where  $N_0$  is the effective density of band states,  $g_0 \sigma \bar{v} = \nu_0/kT$ . The values of the microscopic mobilities  $\mu_0$  and of the characteristic temperatures  $T_0$  can then be adjusted to the data. We first start with values usually reported in the literature:  $\mu_0 = 13 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$  and  $T_0 = 310 \text{ K}$  for electrons and  $\mu_0 = 0.5 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$  and  $T_0 = 490 \text{ K}$  for holes.

Figure 1 presents simulated transient currents for electrons at low (160 K) and high (260 K) temperatures for a 3.8  $\mu\text{m}$  thick sample biased at 16 V. The currents are given in number of elementary charges per second and are normalized to a single electron-hole pair generated at  $x = 0$  at  $t = 0$ . The dashed lines are the short ( $t \ll t_T$ ) and long ( $t \gg t_T$ ) time asymptotic approximations in the analytical calculations.<sup>1,3</sup> At low temperature, i.e. for  $T/T_0 \lesssim 0.6$ , the Monte Carlo and approximate analytical solutions are in good agreement except at very short times  $t < \nu_0^{-1}$  and near the transit time. The transit time is very small



when  $\mu_0 = 13 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$  is used. In the case  $T/T_0 = 1/2$ , for which  $I(t)$  and  $n(x, t)$  can be calculated exactly for  $t \gg \nu_0^{-1}$ , it had been shown<sup>4</sup> that the Monte Carlo and analytical calculations of  $I(t)$  and  $n(x, t)$  were in excellent agreement. But at higher temperatures, systematic discrepancies appear in the slopes, in the absolute value of  $I(t)$  and in the position of the transit time.

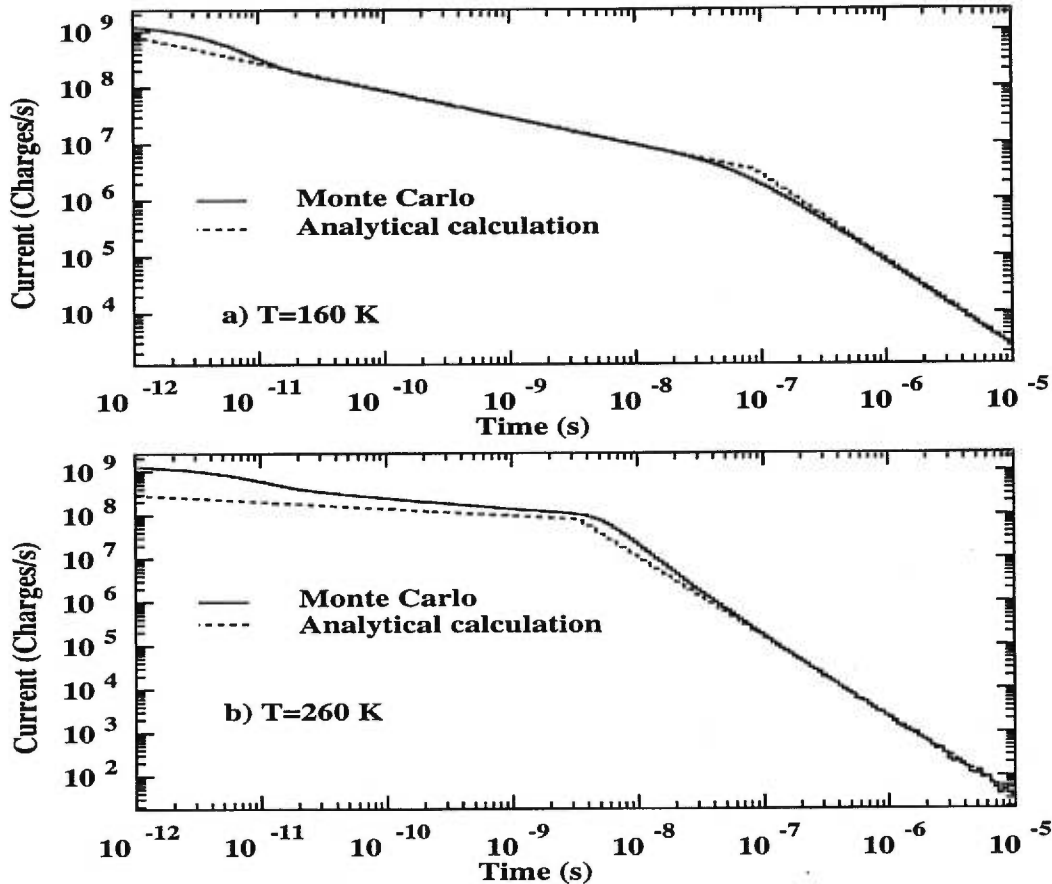


Fig. 1. Comparison of Monte Carlo and analytical calculations of transient currents for electrons at a)  $T = 160 \text{ K}$  and b)  $T = 260 \text{ K}$ .

The electron distributions  $n(E)$  in the localized states are also given by the Monte Carlo. They are shown at various times in Fig. 2, again for  $T = 160 \text{ K}$  and  $T = 260 \text{ K}$ . The total number of trapping events into a given trap state is also shown. Since the cross section is energy independent, this is simply proportional to  $g(E)$ . At low temperature,  $n(E)$  is in good agreement with the predictions of the TROK model.<sup>5,6</sup> The distributions are clearly peaked at the demarcation energy  $E_d(t) = kT \ln(\nu_0 t)$  as indicated by arrows in Fig. 2. The demarcation energy at the transit time  $E_d(t_T)$  is also indicated. For  $t < t_T$ , the distributions are clearly separated by the demarcation energy between deep states  $E > E_d$  for which  $n(E)$  is proportional to  $g(E)$  and shallow states  $E < E_d$  that have reached thermodynamic equilibrium and for which  $n(E) \sim g(E) \exp(E/kT)$ . For  $t > t_T$ , electrons, when released from states shallower than  $E_d$ , can be removed from the sample, then breaking the equilibrium. It is also observed that  $n(E_d)$  is fairly constant before  $t_T$ . At higher temperature, the distributions are much broader and are peaked at energies somewhat lower than  $E_d$ . It is then clear that charge transport at higher  $T$  cannot be described by a single dominant level at  $E_d$ .

Figure 3 presents a comparison of experimental,<sup>1,2,7</sup> Monte Carlo and analytical values of the dispersion parameters  $\alpha_1$  and  $\alpha_2$  for electrons and holes. Monte Carlo values were extracted by fitting power laws over as many decades as possible as was done for the experimental data.<sup>1,2</sup> The dashed lines show the prediction  $\alpha_1 = \alpha_2 = T/T_0$  from the analytical



models. At low temperature, both  $\alpha_1$  and  $\alpha_2$  obtained from the Monte Carlo, for electrons and holes, agree with the analytical prediction. But for temperatures above  $0.6T_0$ ,  $\alpha_1$  is observed to bend downwards; this is especially visible for electrons. At the same time,  $\alpha_2$  from the Monte Carlo is seen to increase faster than  $T/T_0$ . Looking at the data, we see that neither the Monte Carlo nor the analytical model can reproduce the values of  $\alpha_1$  at very low temperature, especially for electrons. At high temperature, on the other hand, the Monte Carlo is doing much better than the analytical models. In particular,  $\alpha_1$  for electrons and  $\alpha_2$  for holes are fairly well reproduced, although there are too few data points for holes that are well above  $0.6T_0$  to conclude.

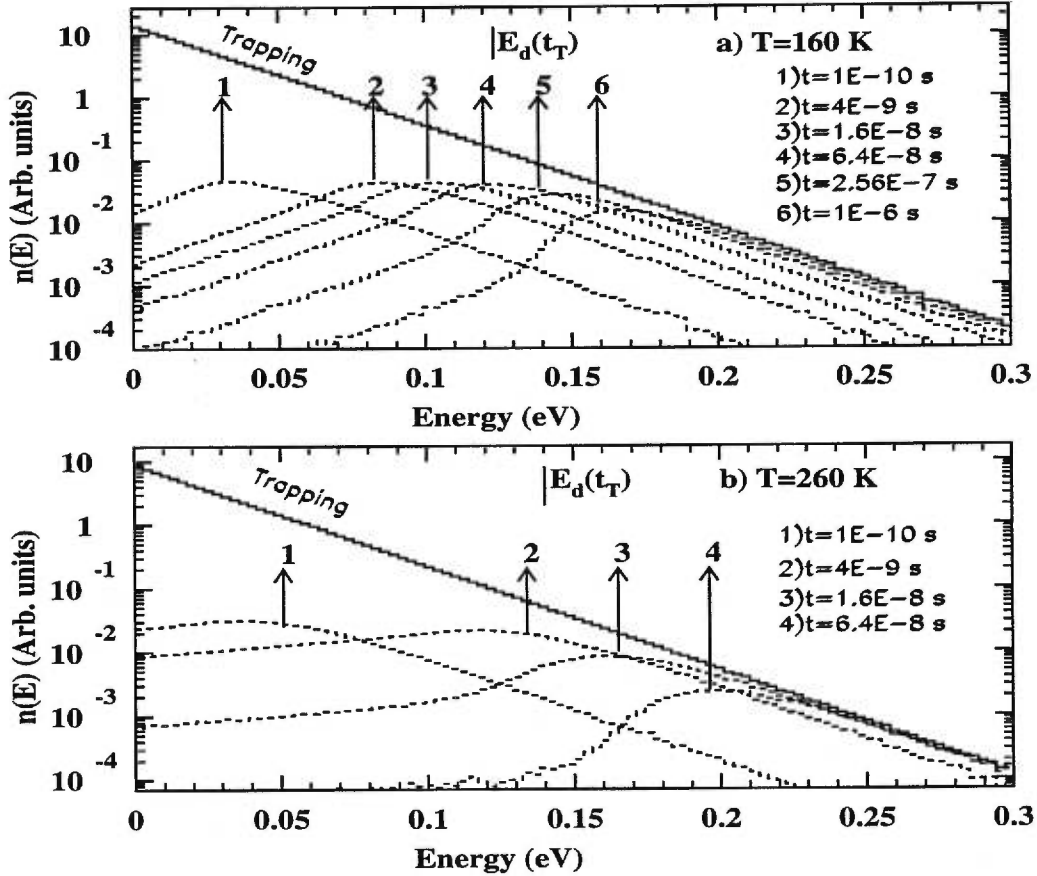


Fig. 2. Time evolution of the energy distribution of trapped electrons, simulated by Monte Carlo at a)  $T = 160$  K and b)  $T = 260$  K. Arrows indicate the demarcation energies  $E_d(t)$ .

The drift mobilities extracted from the transient signals are shown in Fig. 4 for a) electrons and b) holes. The experimental values<sup>1,2</sup> of  $\mu_D$  for holes for a  $1\ \mu\text{m}$  thick sample are well reproduced by the Monte Carlo simulations with the usual value of the microscopic mobility  $\mu_0 = 0.5\ \text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ . On the other hand, the MC results for electrons for a  $3.8\ \mu\text{m}$  thick sample are one order of magnitude too high when  $\mu_0 = 13\ \text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$  is used. The best fit to the data is obtained with the surprising low value  $\mu_0 = 4\ \text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ . Simulations have also been made at  $T = 1000$  K and  $T = 5000$  K to verify that the extrapolated value of  $\mu_D$  from the Monte Carlo is equal to  $\mu_0$ .

## DISCUSSION

The high temperature behavior of the experimental dispersion parameters  $\alpha_1$  and  $\alpha_2$ , when they are departing from the  $T/T_0$  value, is at least qualitatively reproduced by the Monte Carlo and can then be considered as a natural result of multi-trapping. This behavior

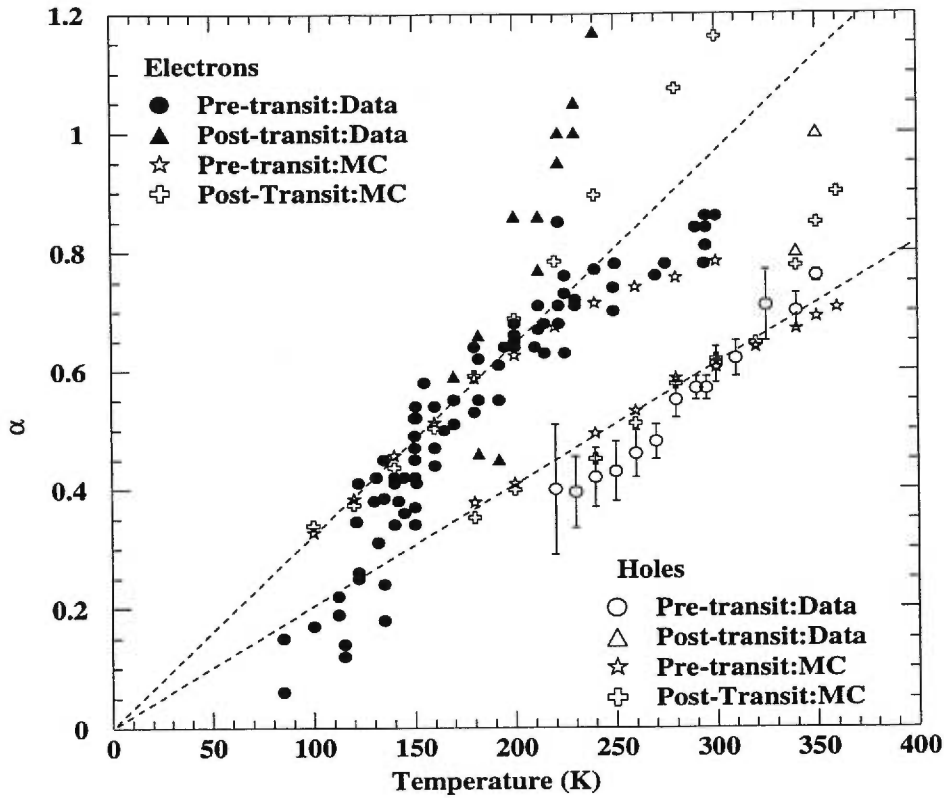


Fig. 3. Comparison of calculated and measured dispersion parameters as a function of temperature for electrons  $T_0 = 310$  K (upper dashed line) and holes  $T_0 = 490$  K (lower dashed line). The dashed lines indicate the prediction  $\alpha_1 = \alpha_2 = T/T_0$  from previous models.

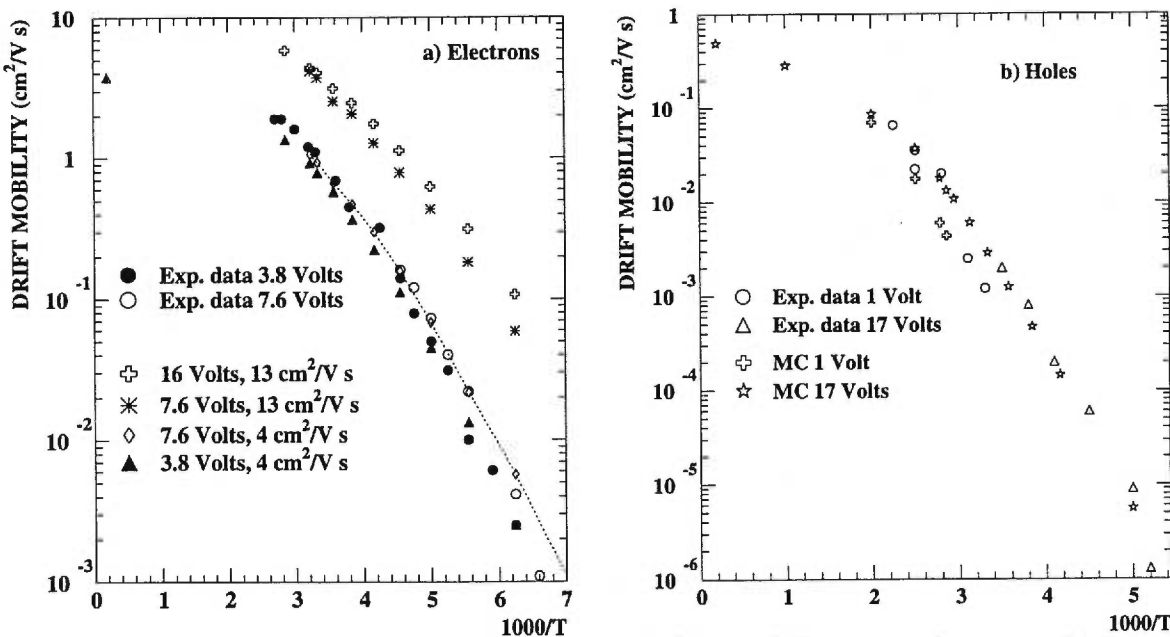


Fig. 4. Comparison of calculated and measured drift mobilities as a function of temperature for a) electrons and b) holes. Calculations are presented for different values of the bias voltage. For electrons, calculations are shown for two values of  $\mu_0$ . The dotted line is to guide the eye through Monte Carlo results at  $V = 7.6$  Volts for  $\mu_0 = 4 \text{ cm}^2/\text{V s}$  and  $\nu_0 = 10^{11} \text{ s}^{-1}$ .

is a simple consequence of the transport becoming less dispersive at high  $T$ . Indeed, MC simulations at  $T = 1000$  K and  $T = 5000$  K have shown that  $\alpha_1 \rightarrow 1$  and  $\alpha_2 \rightarrow \infty$  at high  $T$ . MC points on Fig. 3 represent the best fit to the data in the framework of the present model of pure multi-trapping through exponential band tails with  $T_0 = 310$  K and  $T_0 = 490$  K for electrons and holes, respectively,  $T_0$  being here the only free parameter. These MC results differ from those obtained by Marshall, Michiel and Adriaenssens.<sup>8</sup> For exponential band tails, they found  $\alpha_1 \sim T/T_0$  for  $T/T_0$  as high as 0.8 with no indication of saturation although this was not the case with other localized states distributions. While values of  $\alpha_2$  in ref. 8 are different from the present ones, similar results are given in ref. 8 for  $\alpha_2$  measured over more decades, at least for  $T/T_0 \leq 1/2$ . The low temperature behavior of  $\alpha_1$  for electrons and the remaining discrepancy at high  $T$  cannot be explained by the present model and some new processes or different distributions of localized states<sup>8,9</sup> must be considered. Other MC simulations<sup>10</sup> have shown that Meyer-Neldel<sup>11</sup> effect can greatly improve the agreement with the data, both at low and high temperatures, for  $\alpha_1$  and  $\alpha_2$ .

Once  $T_0$  has been adjusted from the slopes,  $\mu_0$  and  $\nu_0$  are the only remaining free parameters to fit the drift mobility measurements. Though no actual fitting was performed, a few trials could yield values of  $\nu_0$  and  $\mu_0$  that closely fit the data. Best results were obtained with  $\mu_0 = 4 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$  and  $\nu_0 = 10^{11}\text{s}^{-1}$  for electrons and  $\mu_0 = 0.5 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$  and  $\nu_0 = 10^{12}\text{s}^{-1}$  for holes. Since changing  $\mu_0$  and  $\nu_0$  have quite different effects on the drift mobility curve,  $\nu_0$  strongly affecting the slope, one cannot change both parameters and leave the fit unaffected so that both parameters can be determined from the data. We are then confident that the values of  $\mu_0$  and  $\nu_0$  reported here are close to the optimal values in the framework of that particular model. It is clear that a value  $\mu_0 = 13 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$  is then incompatible with the data in the simple model of pure multi-trapping through exponential band tails.

## CONCLUSIONS

The Monte Carlo method has been found to be a powerful tool for studying transient currents in a-Si:H. The Monte Carlo is indeed more flexible than analytical models and its results are found more reliable than approximate analytical calculations. For multi-trapping through exponential band tails, MC and analytical predictions are identical for  $T \lesssim 0.6T_0$ . Above  $0.6T_0$ , the transition to non-dispersive transport is correctly predicted by the MC and the agreement with the data is improved. From a comparison of MC and experimental drift mobilities, microscopic mobilities of  $\mu_0 = 4 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$  and  $\mu_0 = 0.5 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$  are found in a-Si:H, for electrons and holes, respectively.

## ACKNOWLEDGMENTS

We wish to thank A. Yelon, E. Schiff and T. Tiedje for stimulating discussions.

## REFERENCES

1. T. Tiedje, in *Semiconductors and Semimetals*, edited by J. Pankove (Academic Press, New York, 1984) Vol. 21C, p.207.
2. T. Tiedje, in *Physics of Hydrogenated Amorphous Silicon*, edited by J. D. Joannopoulos and G. Lucovsky (Springer, New York, 1984), Vol. 2, p. 261.
3. W.C. Chen, L.A. Hamel, *Can. J. Phys.* **73**, 585 (1995).
4. L.A. Hamel, W.C. Chen, *IEEE Trans. on Nuclear Science* **42**, 235 (1995).
5. T. Tiedje, A. Rose, *Solid State Commun.* **37**, 49 (1980).
6. J. Orenstein, M. Kastner, *Phys. Rev. Lett.* **46**, 1421 (1981).
7. C.E. Nebel, G.H. Bauer, *Phil. Mag. B* **59**, 463 (1989).
8. J.M. Marshall, H. Michiel, G.J. Adriaenssens, *Phil. Mag. B* **47**, 211 (1983).
9. J.M. Marshall, D. Allan, *Phil. Mag. B* **40**, 71 (1979).
10. W.C. Chen, L.A. Hamel, A. Yelon, to be published.
11. H.M. Branz, A. Yelon, B. Movaghar, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* **336**, 159 (1994).

## 2.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié le transport standard par piégeage multiple dans une queue de bande exponentielle analytiquement et par simulation Monte Carlo. Nous avons d'abord obtenu une solution analytique générale pour la fonction,  $G(x, x_0, t)$ , qui est valide pour  $0 < \alpha < 1$ , aux équations de transport de charge avec un champ électrique linéaire. Nous avons aussi obtenu une solution analytique pour  $I(t)$  et  $Q(t)$  dans le cas particulier où  $\alpha = 1/2$ . Nous avons ensuite montré que les résultats obtenus par les calculs analytiques et Monte Carlo étaient en parfait accord. Ces comparaisons nous permettaient non seulement de tester le bon fonctionnement de notre programme Monte Carlo mais aussi de vérifier la validité de nos calculs analytiques. Les deux méthodes sont complémentaires l'une à l'autre. Dans la limite où les calculs analytiques sont valides, il est possible de les utiliser pour modéliser les détecteurs de particules au a-Si:H et l'expérience du TOF dans le a-Si:H.

Dans les cas où les calculs analytiques sans approximations n'existaient pas, nous avons simulé l'expérience du temps de vol par méthode Monte Carlo pour différents champs électriques et températures. Ces simulations ont clairement démontré que le modèle de transport standard par piégeage multiple reproduisait les données expérimentales de la mobilité de dérive  $\mu_D$  pour différents champs électriques et températures et, par contre, ne pouvait pas prédire le comportement des  $\alpha_1$  et  $\alpha_2$  à basse température et des  $\alpha_2$  à haute température avec une queue de bande exponentielle. Pour remédier à ce problème, il est raisonnable de penser à deux possibilités de changements: (i) changer la densité d'états (DOS) et (ii) garder la même DOS et chercher à inclure un nouvel effet qui est observé dans le a-Si:H à partir d'autres expériences. Ces changements seront discutés au chapitre 3.

## Chapitre 3

### Simulation MC de l'effet Meyer-Neldel dans le a-Si:H

Nous avons vu que le modèle de transport standard ne pouvait pas expliquer les comportements des  $\alpha_1$  et  $\alpha_2$  observés expérimentalement à basse température, et de  $\alpha_2$  à haute température. Nous avons aussi indiqué qu'il y a deux possibilités pour remédier à ce problème: (i) modifier la DOS et (ii) inclure des effets nouveaux. Dans le a-Si:H, il est raisonnable de faire l'hypothèse d'une queue de bande exponentielle pour les raisons mentionnées à la section 1.2 du chapitre 1. Dans l'article IV, nous introduisons l'effet Meyer-Neldel (MN) dans le but de mieux expliquer les comportements de  $\alpha_1$  et  $\alpha_2$ .

Dans ce qui suit, nous allons expliquer les différentes observations de l'effet Meyer-Neldel dans le a-Si:H et faire un lien avec l'expérience TOF. L'effet Meyer-Neldel a été observé dans les données expérimentales de la conductivité DC pour le a-Si:H avec dopants, sans dopant et soumis à une forte illumination (light soaked) [2]. Les analyses détaillées de la conductivité DC expérimentales avec la relation

$$\sigma = \sigma_0 \exp(-E_a/kT) \quad (3.1)$$

montrent que le préfacteur de conductivité,  $\sigma_0$ , est fortement corrélé à l'énergie d'activation,  $E_a$ , par la formule

$$\sigma_0 = \sigma_{00} \exp(-E_a/E_{MN}), \quad (3.2)$$

où  $\sigma_{00}$  est le préfacteur de Meyer-Neldel (MN) et  $E_{MN}$  est l'énergie de MN. Ce résultat s'appelle l'effet MN. Ces analyses fournissent deux informations importantes: (i) l'énergie d'activation (obtenue à partir de la pente de  $\log(\sigma)$  vs  $10^3/T$ )

et (ii) le préfacteur de la conductivité  $\sigma_0$  (obtenue en extrapolant  $\sigma$  à  $1/T \rightarrow 0$ ). Si on trace  $\log(\sigma_0)$  en fonction de  $E_a$ , on obtient une droite. Cette droite nous renseigne sur l'énergie de MN ( $E_{MN}$ ). La valeur typique de  $E_{MN}$  obtenue est environ 40 meV dans les expériences de conductivité. Cette valeur est comparable à la valeur obtenue dans cette thèse pour les électrons. Par contre, pour les trous, nous avons obtenu, pour la première fois, une valeur de  $E_{MN} = 60$  meV.

L'effet Meyer-Neldel décrit également le temps d'émission,  $t_E$ , à partir des défauts [32, 33]. Il est à noter que  $t_E$  est environ 5 et 3 ordres de grandeurs plus grand que le temps de transit,  $t_T$  dans l'expérience de collecte des charges [32] et dans l'expérience de courant limité par les charges d'espace (Space-charge-limited current, SCLC) [33] respectivement. Le taux d'émission est l'inverse du temps d'émission et s'écrit:

$$1/t_E = \nu_0 \exp(-E_a/kT). \quad (3.3)$$

$\nu_0$  est relié à  $E_a$  par la relation

$$\nu_0 = \nu_{00} \exp(E_a/E_{MN}) \quad (3.4)$$

où  $\nu_{00}$  est le préfacteur de MN. La figure 12 montre les données expérimentales de Antoniadis et Schiff (AS) obtenues à partir de l'expérience de collecte des charges [32] et de Yan et Adriaenssens (YA) obtenues à partir de l'expérience SCLC [33]. Dans tous ces cas, l'énergie d'activation calculée en utilisant l'équation 3.3 varie entre 0.4 à 0.6 eV. Antoniadis et Schiff ont trouvé une valeur de  $E_{MN} = 26$  meV et de  $\nu_{00} = 5 \times 10^2$  Hz et Yan et Adriaenssens ont trouvé une valeur de  $E_{MN} = 30$  meV et de  $\nu_{00} = 1 \times 10^5$  Hz. Dans la même figure, nous avons calculé  $\nu_0$  en utilisant l'équation 3.4 avec nos valeurs  $E_{MN} = 40$  eV et  $\nu_{00} = 5 \times 10^9$  Hz obtenues en ajustant les  $\alpha$  et les mobilités de dérive, et une énergie d'activation  $E_a = 0.14$  eV. Les courbes sont calculées avec l'équation 3.4 pour les trois différents cas mentionnés ci-hauts.

Puisque l'effet MN est observé dans les autres expériences sur le a-Si:H, il est alors raisonnable d'inclure l'effet Meyer-Neldel dans le modèle de piégeage

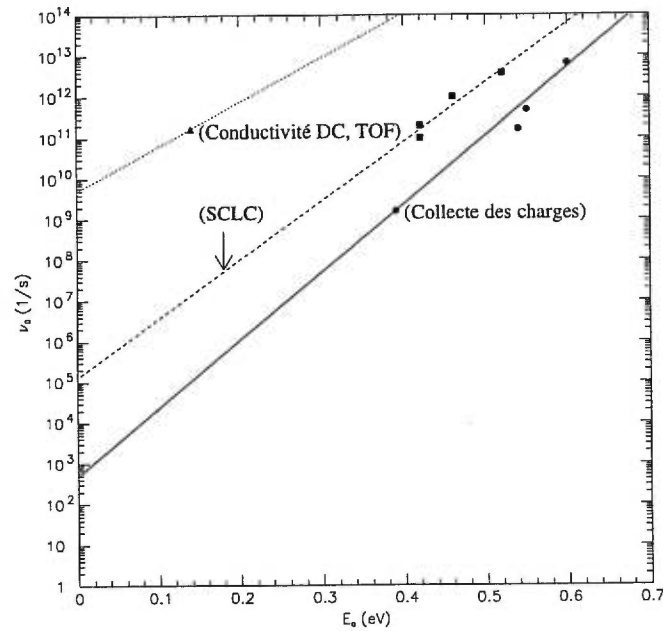


Figure 12. Préfacteur de fréquence ( $\nu_0$ ) obtenu par différentes méthodes expérimentales en fonction de l'énergie d'activation ( $E_a$ ).

multiple afin de mieux modéliser l'expérience TOF. La modification du modèle de piégeage multiple standard pour inclure l'effet MN est détaillé dans l'article.

Il est important de mentionner que l'effet MN ne change pas la mobilité microscopique  $\mu_0$  obtenue dans l'article précédent. Nous croyons que ce modèle possède les ingrédients nécessaires pour expliquer les données expérimentales du temps de vol en faisant l'hypothèse d'une queue de bande exponentielle.

### 3.1 Article IV: Monte Carlo simulation of Meyer-Neldel effect on carrier time-of-flight in a-Si:H

Publié dans J. Non-Cryst. Solids **220**, 254 (1997).



ELSEVIER

Journal of Non-Crystalline Solids 220 (1997) 254–260

---



---

 JOURNAL OF  
 NON-CRYSTALLINE SOLIDS
 

---



---

# Monte Carlo simulations of Meyer–Neldel effect on carrier time-of-flight in a-Si:H

Wen Chao Chen <sup>a</sup>, Louis-André Hamel <sup>a,\*</sup>, Arthur Yelon <sup>b</sup>

<sup>a</sup> *Groupe de recherche en physique et technologie des couches minces (GCM), Département de Physique, Université de Montréal C.P. 6128, Succursale centre-ville, Montréal, Que., Canada H3C 3J7*

<sup>b</sup> *Groupe de recherche en physique et technologie des couches minces (GCM), Département de Génie Physique, École Polytechnique de Montréal C.P. 6079, Succursale centre-ville, Montréal, Que., Canada H3C 3A7*

Received 31 October 1996; revised 6 May 1997

---

## Abstract

We present Monte Carlo simulations of multiple-trapping transport with Meyer–Neldel effect in a-Si:H assuming exponential band tails. The transit time,  $t_T$ , and the dispersion parameters,  $\alpha_1$  and  $\alpha_2$ , before and after the transit time, are extracted from the simulated currents. The simulations show that including the Meyer–Neldel effect improves the agreement of  $\alpha_1$  and  $\alpha_2$  with experimental data, both at low and high temperatures and fits the time-of-flight drift mobility measurements. Best fits to the data yield  $T_0 = 263$  K,  $T_{MN} = 464$  K,  $\nu_{00} = 5 \times 10^9$  s<sup>-1</sup> and  $\mu_0 = 4$  cm<sup>2</sup> V<sup>-1</sup> s<sup>-1</sup> for electrons and  $T_0 = 409$  K,  $T_{MN} = 809$  K,  $\nu_{00} = 6.5 \times 10^{10}$  s<sup>-1</sup> and  $\mu_0 = 0.5$  cm<sup>2</sup> V<sup>-1</sup> s<sup>-1</sup> for holes. © 1997 Elsevier Science B.V.

PACS: 72.01.A

---

## 1. Introduction

We have recently presented calculations of transient currents in time-of-flight (TOF) experiments on hydrogenated amorphous silicon (a-Si:H) using Monte Carlo (MC) simulations of multiple-trapping (MT) transport, assuming exponential band tails of localized states [1]:

$$g(E) = g_0 \exp(-E/kT_0), \quad (1)$$

where  $T_0$  is the characteristic temperature. The temperature dependence of the dispersion parameters,  $\alpha_1$

and  $\alpha_2$ , before and after the transit time, and of the drift mobilities were obtained for electrons and holes. The MC calculation yields a significant improvement over the TROK [2,3] calculation which has been used in the past. The TROK calculation is analytical, but it is approximate, assuming a single demarcation energy. In agreement with TROK, we found that  $\alpha_1 = \alpha_2 = T/T_0$  for  $T \leq 0.6T_0$ . Above  $0.6T_0$ , we found that  $\alpha_1 \neq \alpha_2$ , and that  $\alpha_1 \rightarrow 1$  and  $\alpha_2 \rightarrow \infty$  when  $T \rightarrow \infty$ , in agreement with experiment, but in disagreement with TROK which predicts  $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha = T/T_0$  for all temperatures. However, our MC calculation could not explain the experimentally observed departure of  $\alpha_1$  and  $\alpha_2$  from the linear behavior which was still predicted at low tempera-

---

\* Corresponding author. Tel.: +1-514 343 6204; fax: +1-514 343 6215; e-mail: hamel@lps.umontreal.ca.



tures. Our prediction for the variation of  $\alpha_2$  at high temperature was slower than that of the experimental data. To improve the fit, it is necessary either to introduce additional effects into the model as will be done here, or to modify the density of states, as has been done by Marshall [4], Marshall et al. [5] and Michiel et al. [6] for electrons and Marshall and Allan [7] for holes.

It is now well established [8] that electronic conduction in amorphous semiconductors obeys the Meyer–Neldel (MN) or Compensation Rule [9–11]. This rule states that if a kinetic process  $X$  obeys the equation

$$X = X_0 \exp(-E/kT), \quad (2)$$

then  $X_0$  and  $E$  obey the equation

$$X_0 = X_{00} \exp(E/E_{MN}). \quad (3)$$

In Eq. (3),  $X_{00}$  is a positive constant,  $E_{MN}$  is a characteristic energy, approximately the energy of the excitations which are absorbed in order to provide the energy  $E$  ( $\gg E_{MN}$ ) [10–13].  $E_{MN}$  may also be described in terms of a MN temperature,  $T_{MN} = E_{MN}/k$ .

Since the MN rule (MNR) applies to transport in a-Si:H, it should be included in models for TOF experiments. This has been done by Branz et al. [12], who modified the TROK model, by modifying the prefactor, as in Eq. (3). They predicted a behavior similar to that predicted by TROK:

$$I(t) \sim \begin{cases} (\nu_{00}t)^{-1+\alpha}, & t < t_T \\ (\nu_{00}t)^{-1-\alpha}, & t > t_T \end{cases} \quad (4)$$

In Eq. (4),  $\nu_{00}$  is an effective attempt-to-escape frequency, and  $t_T$  is the mean carrier transit time. Branz et al. [12] found that

$$\alpha = \frac{T_{MN} - T_0}{T_{MN} - T} \frac{T}{T_0}. \quad (5)$$

This result is consistent with the approximate analytical solution of the transport equations obtained by Arkhipov et al [14] when MNR is included, but is in disagreement with much of the experimental data.

MC simulation has been shown [1,4,5,7,15,16] to be an effective way of investigating electronic transport in amorphous semiconductors. We have per-

formed a MC simulation of multiple-trapping transport in a-Si:H, assuming exponential band tails, and including a prefactor,  $\exp(E/kT_{MN})$ , as in Eq. (3), in the trapping and release rates, in order to take account of the MNR. The details of the modification from our previous MC calculations [1,16] will be presented in the next section. We then present the results for transient currents, temperature dependence of dispersion parameters and drift mobilities for electrons and holes.

## 2. Model and algorithm

The multiple-trapping model of carrier transport considers trapping into localized states with a capture rate,  $k_c(E) = \sigma \bar{v} g(E)$ , where  $\sigma$  is the cross section,  $\bar{v}$  is the mean velocity of free carriers and  $g(E)$  is the density of localized states (Eq. (1)), and release into the conduction band by thermal activation at a rate of  $k_r(E) = \nu_0 \exp(-E/kT)$ , where  $\nu_0$  is the attempt-to-escape frequency. Applying the MN rule (Eqs. (2) and (3)) to the release rate,  $k_r(E)$  is now written as

$$k_r(E) = \nu_{00} \exp(E/kT_{MN}) \exp(-E/kT). \quad (6)$$

Detailed balance requires that the capture rate should be modified to

$$k_c(E) = \nu_{00} \exp(E/kT_{MN}) \exp(-E/kT_0)/kT. \quad (7)$$

The probability that a carrier is trapped between  $t_c$  and  $t_c + dt_c$  is

$$P(t_c) dt_c = k_c \exp(-k_c t_c) dt_c, \quad (8)$$

where  $k_c = \int k_c(E) dE$  is the total capture rate. In the MC simulation, the capture time,  $t_c$ , is calculated, with the probability given by Eq. (8), from a random number,  $R_1$ , uniformly generated between 0 and 1. The relation between  $R_1$  and  $t_c$  is  $t_c = -k_c^{-1} \ln(1 - R_1)$ . The free charge drifts at the velocity  $v_d = \mu_0 F$  and contributes to the induced current,  $I(t) = ev_d/L$  (where  $\mu_0$  is the microscopic mobility,  $F$  is the electric field and  $L$  is the sample thickness). The carrier drifts a distance  $d = v_d t_c$  within a time  $t_c$ , before it is trapped. Another random number  $R_2$  is

drawn to determine the trap energy level. For the capture rate  $k_c(E)$  of Eq. (7),

$$E = -kT_0(T_{MN}/(T_{MN} - T_0))\ln(1 - R_2). \quad (9)$$

The carrier remains trapped for a time  $t_r$ , given by a third random number  $R_3$ ,  $t_r = -[k_r(E)]^{-1} \ln(1 - R_3)$ . The cycle is repeated until the carrier is collected. A new carrier is then injected and the whole process is repeated a large number of times.

### 3. Results

The Monte Carlo simulations of TOF transient currents with and without MNR at low (160 K) and high (260 K) temperature for electrons are shown in Fig. 1 for the simulation parameters in Table 1. The dashed curves are calculated with  $\nu_{00} = 10^{11} \text{ s}^{-1}$  for the standard MT model. The solid curves include the MN effect. The currents are given in units of elementary charges per second and are normalized to a single electron-hole pair generated at  $x = 0$  at time zero. The transit time,  $t_T$ , is obtained from the

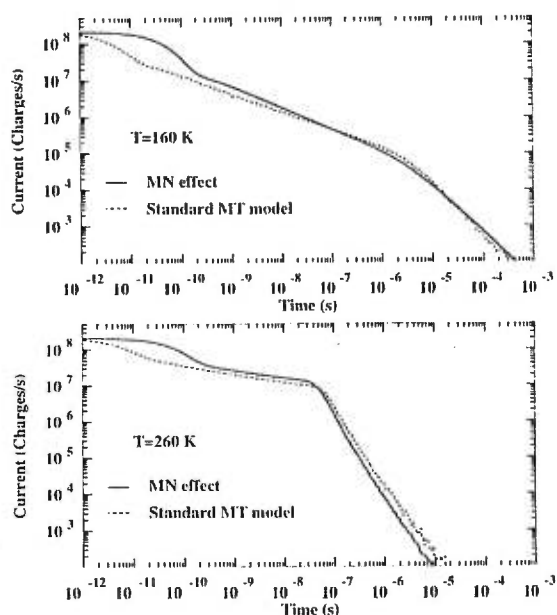


Fig. 1. Simulated transient currents for electrons at  $T = 160 \text{ K}$  and  $T = 260 \text{ K}$  with MN effect ( $T_{MN} = 464 \text{ K}$ ,  $T_0 = 263 \text{ K}$  and  $\nu_{00} = 5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ ) and without MN effect ( $T_0 = 310 \text{ K}$  and  $\nu_{00} = 10^{11} \text{ s}^{-1}$ ). Other simulation parameters are shown in Table 1. The experimental parameters are those of Refs. [17,18].

Table 1  
Simulation parameters for electrons and holes

	Electrons	Holes
Characteristic temperature ( $T_0$ )	263 K	409 K
Meyer–Neldel temperature ( $T_{MN}$ )	464 K	809 K
Microscopic mobility ( $\mu_0$ )	$4 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$	$0.5 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$
Sample thickness ( $L$ )	$3.8 \text{ }\mu\text{m}$	$1 \text{ }\mu\text{m}$
Effective attempt-to-escape frequency ( $\nu_{00}$ )	$5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$	$6.5 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$
Bias voltage (V)	7.6 V	17 V

intersection of two straight lines on the log–log curve, as in Ref. [17,18]. The MN simulation yields  $t_T = 4.2 \times 10^{-6} \text{ s}$  for  $T = 160 \text{ K}$ , and  $t_T = 4.0 \times 10^{-8} \text{ s}$  for  $T = 260 \text{ K}$ .

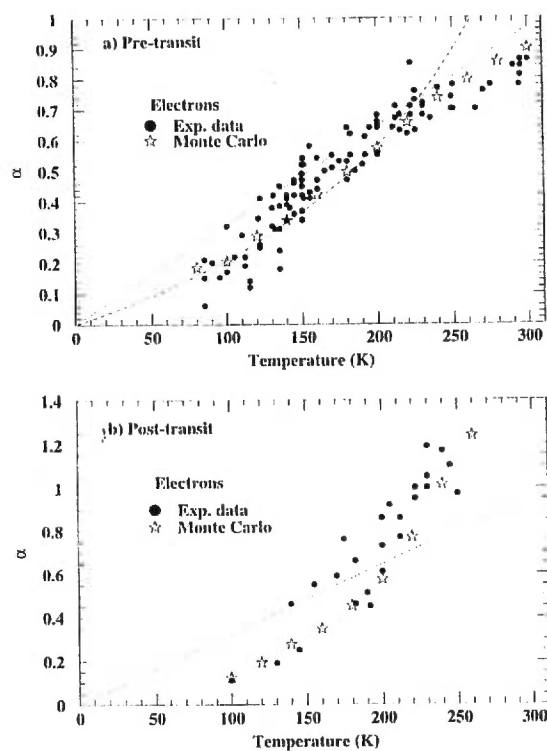


Fig. 2. Temperature dependence of the dispersion parameters for electrons. (a) before the transit time ( $\alpha_1$ ), (b) after the transit time ( $\alpha_2$ ). Data are taken from Refs. [17–20]. The dotted line represents  $\alpha = T/T_0$  with  $T_0 = 310 \text{ K}$ . The dashed curve for  $\alpha_1$  (Eq. (5)) and Monte Carlo values are calculated with  $T_{MN} = 463 \text{ K}$  and  $T_0 = 263 \text{ K}$ .

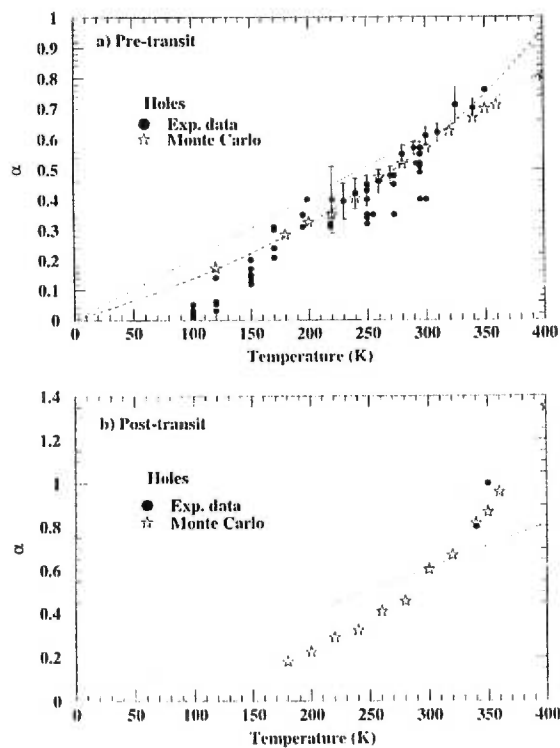


Fig. 3. Temperature dependence of the dispersion parameters for holes. (a) before the transit time ( $\alpha_1$ ). (b) after the transit time ( $\alpha_2$ ). Data are taken from Refs. [17,18,21]. The dotted line represents  $\alpha = T/T_0$  with  $T_0 = 490$  K. The dashed curve for  $\alpha_1$  (Eq. (5)) and Monte Carlo values are calculated with  $T_{\text{MIN}} = 809$  K and  $T_0 = 409$  K.

The dispersion parameters  $\alpha_1$  and  $\alpha_2$ , before and after the transit time are shown in Fig. 2 for electrons and in Fig. 3 for holes. The experimental data for electrons are taken from Tiedje [17,18], Kirby and Paul [19] and Nebel and Bauer [20], and for holes from Tiedje [17,18] and Kristensen and Hvam [21]. Monte Carlo results, including MNR, are found to be in good agreement with the data, and exhibit the expected temperature behavior; that is both  $\alpha_1$  and  $\alpha_2$  increase with  $T$ , with  $\alpha_1 \rightarrow 1$  and  $\alpha_2 \rightarrow \infty$  when  $T \rightarrow \infty$ . The best numerical values were found to be  $T_{\text{MIN}} = 464$  K and  $T_0 = 263$  K for electrons, and  $T_{\text{MIN}} = 809$  K and  $T_0 = 409$  K for holes. The dashed curves are calculated from Eq. (5). The dotted lines represent  $\alpha = T/T_0$ , with  $T_0 = 310$  K for electrons and  $T_0 = 490$  K for holes.

Once  $t_T$  is extracted from the transient current curves, the drift mobilities are obtained from

$$\mu_d = L^2/Vt_T, \quad (10)$$

where  $L$  is the sample thickness and  $V$  is the bias voltage. The results are shown in Fig. 4 for electrons and in Fig. 5 for holes using the simulation parameters and in Table 1. The drift mobility data for electrons are taken from Tiedje [17,18] and Nebel and Bauer [20], and for holes from Tiedje [17,18] for fields up to  $150 \text{ kV cm}^{-1}$ . For Tiedje's data  $t_T$  is defined as the intersection of two straight lines on the log–log curve. For the Nebel and Bauer data it is defined as the time at which 50% of the charge has been induced in the external circuit. Since changing  $\nu_{00}$  affects only the slopes of the drift mobilities, it can be adjusted to yield the experimental activation energies. The best values are  $\nu_{00} = 5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$  for electrons, and  $\nu_{00} = 6.5 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$  for holes. Our MC simulation cannot reproduce the Nebel and Bauer

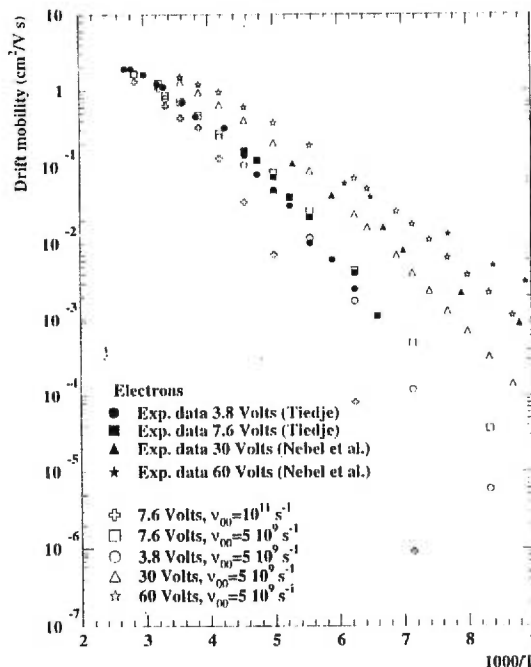


Fig. 4. Temperature dependence of electron drift mobilities. Experimental data (Refs. [17,18,20]) and Monte Carlo results are shown for different values of the bias voltage and  $\nu_{00}$ ; The sample thickness of Ref. [20] is  $4 \mu\text{m}$ . Other simulation parameters are given in Table 1.

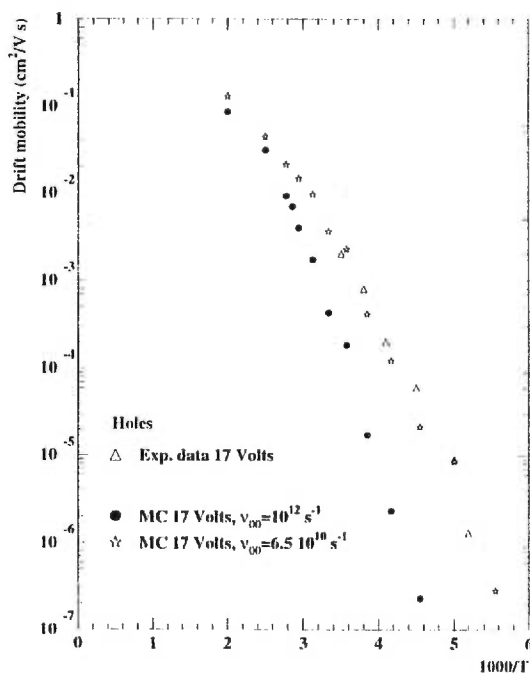


Fig. 5. Temperature dependence of hole drift mobilities. Experimental data (Refs. [17,18]) and Monte Carlo results are shown for  $V = 17$  V,  $\nu_{00} = 10^{12}$  s $^{-1}$  and  $\nu_{00} = 6.5 \times 10^{10}$  s $^{-1}$ . Other simulation parameters are given in Table 1.

[20] data at high field ( $F = 75$  and  $150$  kV cm $^{-1}$ ) and low  $T$  with a constant value of  $\nu_{00} = 5 \times 10^9$  s $^{-1}$  for electrons because field-enhanced trapping and detrapping are important in these circumstances [22,23]. In addition to the best fit values, we show the results for  $\nu_{00} = 10^{11}$  s $^{-1}$  for electrons, and  $\nu_{00} = 10^{12}$  s $^{-1}$  for holes, the values used for  $\nu_0$  by Tiedje [17,18].

#### 4. Discussion

When we include the MNR in the MT model for TOF experiments, we then introduce two new parameters,  $T_{MN}$  and  $\nu_{00}$  (which replaces  $\nu_0$  as an adjustable parameter). Varying  $T_{MN}$  and  $T_0$  affects the slopes of the transient currents; varying  $\nu_{00}$  modifies the shapes of early transient currents and the activation energy. Figs. 1–5 give a good idea of these changes. By comparing the results with experimental data, the best choice of the physical parameters was found. At the starting point of the simula-

tions, the parameters reported in Ref. [1] were used. The only parameters which were allowed to vary were  $T_{MN}$ ,  $T_0$  and  $\nu_{00}$ . This variation allowed us to correctly fit  $\alpha_1$  and  $\alpha_2$ , and the drift mobility measurements for electrons and holes. The best fit values are summarized in Table 1. The values of  $T_{MN}$ ,  $T_0$  and  $\nu_{00}$  appear to be physically reasonable. The choice is not unique. The order of magnitude of  $\nu_{00}$  is  $10^9$  s $^{-1}$  for electrons and  $10^{10}$  s $^{-1}$  for holes. For electrons,  $360$  K  $< T_{MN} < 500$  K, with  $464$  K as the best fit. The range cited in the literature [8,24–26] is between  $406$  and  $638$  K, with most values close to  $464$  K ( $40$  meV). We find  $240$  K  $< T_0 < 300$  K, with a best fit of  $263$  K, not very different from the value of  $310$  K, without MNR [1,17,18]. For holes, we find  $350$  K  $< T_0 < 490$  K, with the best fit at  $409$  K, which is to be compared with  $490$  K obtained without MNR [1,17,18]. Finally, we believe that we have obtained the first determination of  $T_{MN}$  for holes. The possible range is  $460$  K  $< T_{MN} < 850$  K, with  $809$  K as the best fit. However, we note that Eq. (5) makes no sense if  $T_{MN} < T_0$ . It would be necessary to introduce a cutoff in the exponential density of states in this case. Otherwise, some carriers would drop into ever lower energy traps, and would never be collected. Clearly, more experimental results for  $\alpha_2$  for holes, especially at low temperature, would be useful to test the model and to improve the determination of  $T_{MN}$ .

The effect of changing  $\mu_0$  is the same as for the standard MT model and the value we obtain for the electron mobility,  $\mu_0 = 4$  cm $^2$  V $^{-1}$  s $^{-1}$ , is the same as in our previous analysis of TOF experiments [1]. However, such a small value is inconsistent with the results of PL experiments which show no evidence of geminate recombination at room temperature [27]. If these results are correct, the microscopic mobility should be much greater than  $4$  cm $^2$  V $^{-1}$  s $^{-1}$  [27,28]. This inconsistency may be resolved by including relaxation of the trapped carriers [29].

Our simulation provides the electron distributions,  $n(E)$ , in the localized states. These are shown in Fig. 6a at  $T = 160$  K for different times. The mean energy  $\langle E(t) \rangle$  is shown in Fig. 6b for two temperatures. In Fig. 6a we also show the total number of trapping events into the trap states, indicated by the full line; this number is proportional to  $k_c(E)$ . In the TROK model,  $\langle E(t) \rangle$  is assumed to be at a demarca-

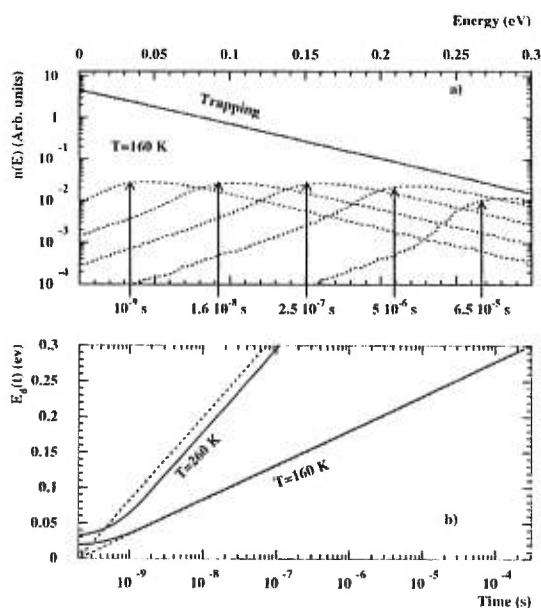


Fig. 6. (a) Time evolution of the energy distribution of trapped electrons, simulated by Monte Carlo at  $T = 160$  K. Arrows indicate the demarcation energy  $E_d(t)$  (Eq. (11)) at a given time. (b) Demarcation energy  $E_d(t)$  calculated from Eq. (11) (dotted line) and mean energy  $\langle E(t) \rangle$  obtained from the MC calculation (full line) for  $T = 160$  K and  $T = 260$  K.

tion energy.  $E_d(t)$ , which is the separation between shallow and deep states. Using simple physical arguments, the value of the demarcation energy, including MNR, is given by [12]

$$E_d(t) = kT \frac{T_{MN}}{T_{MN} - T} \ln(\nu_{00}t), \quad (11)$$

before the transit time  $t_T$ . In Eq. (11) and in Fig. 6,  $E = 0$  at the mobility edge, and increases towards the Fermi energy,  $E_F$ . The MC electron distribution,  $n(E)$ , before the transit time (here  $t_T = 4.2 \times 10^{-6}$  s) is proportional to  $k_c(E)$  in deep states ( $E > E_d$ ), and to  $g(E) \exp(E/kT)$  in shallow states ( $E < E_d$ ), as in the TROK model. In Fig. 6a,  $E_d(t)$  is indicated by an arrow for each of the distributions. Our results for  $E_d$  are consistent with the TROK model including MNR [12] just as our previous results for this quantity [1] were consistent with TROK for the standard MT model. However, this agreement is only for low temperature [1]. Fig. 6b shows a comparison of the demarcation energy (Eq. (11)) and the MC calculations of the average energy  $\langle E(t) \rangle$  at  $T = 160$  K and  $T = 260$  K. MC agrees with Eq. (11) at low

$T$ , but departs from it at high  $T$ , although the slopes are parallel. Before  $t = 1/\nu_{00}$ , the peak position is independent of time; between  $1/\nu_{00}$  and  $10^{-9}$  s, the peak moves slowly down in energy; after  $10^{-9}$  s, the peak moves down logarithmically with time as predicted by TROK. From Figs. 2 and 3 it is clear that the TROK model including MNR gives the same prediction as MC for  $\alpha_1$  at low temperature, that is, up to  $\alpha = 0.6$  both for electrons and for holes. However, only MC provides accurate predictions for  $\alpha_2$ . Finally, we note that despite the agreement between MC and TROK for  $E_d$ , the values deduced for  $\mu_0$  are quite different [17,18,30].

## 5. Conclusion

Monte Carlo simulations incorporating the MNR into the MT model can correctly predict the temperature dependence of the dispersion parameters  $\alpha_1$  and  $\alpha_2$ , before and after the transit time, over a wide range of temperature, assuming exponential band tails. Comparison with experimental data has been made both for electrons and holes. We obtain good agreement; the fits of both  $\alpha_1$  and  $\alpha_2$  are much improved compared with previous MC simulations [1] of MT without MNR. The best numerical values of the transport parameters, summarized in Table 1, are physically reasonable, and in reasonable agreement with previously reported values, except for  $\mu_0$ , for which our results, in agreement with Ref. [1], are quite different from generally accepted values [17,18,30]. We believe that these results support the proposal [12] that MN rule, which has been shown to be important in transport in a-Si:H [8], should be included in the analysis of experiments such as TOF.

## Acknowledgements

We are grateful to M. Kemp and to H. Branz for helpful discussions.

## References

- [1] W.C. Chen, L.A. Hamel, in: *Amorphous Silicon Technology* – 1996, ed. M. Hack, E.A. Schiff, S. Wagner, R. Schropp

- and A. Matsuda (Materials Research Society, Pittsburgh, PA, 1996) p. 759.
- [2] T. Tiedje, A. Rose, *Solid State Commun.* 37 (1980) 49.
- [3] J. Orenstein, M. Kastner, *Phys. Rev. Lett.* 46 (1981) 1421.
- [4] J.M. Marshall, *Philos. Mag.* B36 (1977) 959.
- [5] J.M. Marshall, H. Michiel, G.J. Adriaenssens, *Philos. Mag.* B47 (1983) 211.
- [6] H. Michiel, G.J. Adriaenssens, E.A. Davis, *Phys. Rev.* B34 (1986) 2486.
- [7] J.M. Marshall, D. Allan, *Philos. Mag.* B40 (1979) 71.
- [8] H. Overhof, P. Thomas, *Electronic Transport in Hydrogenated Amorphous Semiconductors* (Springer, New York, 1989).
- [9] W. Meyer, H. Neldel, *Z. Tech. Phys.* 12 (1937) 588.
- [10] A. Yelon, B. Movaghar, *Phys. Rev. Lett.* 65 (1990) 618.
- [11] A. Yelon, B. Movaghar, H.M. Branz, *Phys. Rev.* B46 (1992) 12244.
- [12] H.M. Branz, A. Yelon, B. Movaghar, *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* 336 (1994) 159.
- [13] G. Boisvert, L.J. Lewis, A. Yelon, *Phys. Rev. Lett.* 75 (1995) 469.
- [14] V.I. Arkhipov, M.S. Iovu, A.I. Rudenko, S.D. Shutov, *Phys. Stat. (a)*54 (1979) 67.
- [15] M. Silver, L. Cohen, D. Adler, *Appl. Phys. Lett.* 40 (1982) 261.
- [16] L.A. Hamel, W.C. Chen, *IEEE Trans. Nucl. Sci.* 42 (1995) 235.
- [17] T. Tiedje, in: *Physics of Hydrogenated Amorphous Silicon*, Vol. 2, ed. J.D. Joannopoulos and G. Lucovsky (Springer, New York, 1984) p. 261.
- [18] T. Tiedje, in: *Semiconductors and Semimetals*, ed. J. Pankove, Vol. 21C (Academic Press, New York, 1984) p. 207.
- [19] P.B. Kirby, W. Paul, *Phys. Rev.* B29 (1984) 826.
- [20] C.E. Nebel, G.H. Bauer, *Philos. Mag.* B59 (1989) 463.
- [21] I.K. Kristensen, J.M. Hvam, *Solid State Commun.* 50 (1984) 845.
- [22] C.E. Nebel, R.A. Street, N.M. Johnson, J. Kocka, *Phys. Rev.* B46 (1992) 6789.
- [23] W.C. Chen, L.A. Hamel, A. Yelon, to be published.
- [24] R. Schumacher, P. Thomas, K. Weber, W. Fuhs, *Solid State Commun.* 62 (1987) 15.
- [25] R. Schumacher, P. Thomas, K. Weber, W. Fuhs, *Properties of Amorphous Silicon*, 2nd Ed. (The Institution of Electrical Engineers, London, 1989).
- [26] V. Kirbs, R. Druessedau, H. Fiedler, *J. Phys.: Condens. Matters* 2 (1990) 7473.
- [27] M. Silver, D. Adler, in: *Optical Effects in Amorphous Semiconductors*, ed. P.C. Taylor and G. Bishop, *AIP Conf. Proc.* No. 120, Snowbird, UT, 1984, p. 197.
- [28] E.A. Schiff, *J. Non-Cryst. Solids* 190 (1995) 1.
- [29] W.C. Chen, M. Kemp, L.A. Hamel, A. Yelon, to be published.
- [30] W.E. Spear, in: *Advances in Disordered Semiconductors*, Vol. 1, ed. H. Fritzsche (World Scientific, Singapore, 1989) p. 271.

### 3.2 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons montré que l'effet Meyer-Neldel permettait d'améliorer l'accord entre les prédictions théoriques et les données expérimentales de mobilité de dérive ( $\mu_d$ ) et les paramètres de dispersion  $\alpha_1$  et  $\alpha_2$  avant et après le temps de transit respectivement. Les comparaisons de la simulation MC avec les données expérimentales nous permettaient aussi d'extraire des nouveaux paramètres pour le a-Si:H tel que  $\mu_0$ ,  $T_0$ ,  $T_{MN}$ , et  $\nu_{00}$  pour les électrons et les trous.  $T_{MN}$  est comparable à la valeur donnée dans la littérature pour les électrons. Par contre, les valeurs de  $T_{MN}$  et  $\nu_{00}$  sont différentes de nos valeurs tel qu'illustré par la figure 12, parce que les expériences et phénomènes (SCLC) sont différents.

## Chapitre 4

### Transport des charges à haut champ

En présence de hauts champs, le transport des charges est fondamentalement différent de celui à bas champs. La théorie standard de transport par piégeage multiple présentée au chapitre 1 ne suffit plus pour expliquer les phénomènes non-linéaires observés à champ élevé [32-40], et ceci même en incluant l'effet Meyer-Neldel tel que vu dans l'article IV qui suit. Pour résoudre ce problème, nous proposons d'inclure le dépiégeage assisté par le champ ("diagonal jump model (DJM)") dans le modèle de transport standard. Les détails de la modification sont donnés dans l'article V. Par non-linéarité, nous entendons le fait que la mobilité de dérive  $\mu_d$ , tracée en  $\log(\mu_d)$  vs  $F$ , n'est pas une droite. Pour le modèle MT standard,  $\mu_d(F)$  est de la forme [11]:

$$\mu_d \sim F^{(1-1/\alpha)} \quad (4.1)$$

où  $\alpha$  est le paramètre de dispersion défini entre 0 et 1. Pour le modèle MT standard, dans la version la plus simple  $\alpha = T/T_0$ , où  $T_0$  est la température caractéristique.

Pour les mesures de la mobilité de dérive  $\mu_d$  à haut champ, tous les groupes de recherche [34-42] s'entendent sur le fait que  $\mu_d$  augmente d'au moins un ordre de grandeur à basse  $T$  pour  $F \gtrsim 10^5 \text{ Vcm}^{-1}$ . À haut  $T$ ,  $\mu_d$  est augmenté d'un peu moins qu'un ordre de grandeur [41]. Cependant, il y a encore controverse dans l'interprétation des données expérimentales des  $\alpha$ . Certains groupes ont observé expérimentalement que les  $\alpha$  dépendent à la fois de la température et du champ électrique [37, 39, 40]. D'autres groupes n'ont par contre pas observé



de dépendance des  $\alpha$  avec le champ [36, 38, 42, 9]. Un premier modèle MT de transport à haut champ a été proposé par Esipov [8]. Ce modèle ne donne cependant pas de résultats physiquement raisonnables dans les calculs des paramètres de dispersions,  $\alpha_1$  et  $\alpha_2$ , avant et après le temps de transit, et de la température effective à cause du fait que le bilan détaillé est traité séparément pour le piégeage et dépiégeage thermique et le piégeage et dépiégeage assisté par le champ. Pour que le bilan détaillé soit bien respecté, il faut traiter les quatre processus en même temps. Ces difficultés seront discutées en détail dans la Sec. 4.2. Ce modèle ne peut pas en outre reproduire les données expérimentales récentes.

Nous proposons donc un modèle de transport à haut champ qui permet de remplacer le modèle d'Esipov. L'idée de base de notre modèle est que les porteurs dépiègent avec un taux de dépiégeage maximum selon le chemin diagonal. Ce qui veut dire que la façon la plus facile de dépiéger vers le seuil de mobilité, qui dépend de la position, est par l'effet tunnel assisté thermiquement ("thermally assisted tunnelling") au lieu de dépiéger verticalement (thermiquement seulement) ou horizontalement (effet tunnel seulement) comme dans le cas d'Esipov. Le résultat final ne sera pas tellement différent si nous incluons tous les autres chemins de piégeages et dépiégeages. Ce nouveau modèle explique la dépendance observée des  $\alpha$  en  $T$  et  $F$  et reproduit les données expérimentales sur les mobilités de dérive [9, 35, 40] avec la même longueur de localisation  $a = 8 \text{ \AA}$ . Cependant, notre modèle ne peut pas reproduire quantitativement les mesures des  $\alpha$  pour les électrons (voir Sec. 5 et Fig. 8 dans l'article qui suit pour les détails sur la discussion et la comparaison).

**4.1 Article V: Multiple-trapping model with field-dependent effect on carrier time of flight in a-Si:H**

Accepté pour publication dans *J. Non-Cryst. Solids*, (mars, 1999).

# Multiple-trapping Model with Field-dependent Effects on Carrier Time of Flight in a-Si:H

Wen Chao Chen<sup>a</sup>, Louis-André Hamel<sup>a</sup>, Arthur Yelon<sup>b</sup>

<sup>a</sup> *Groupe de recherche en physique et technologie des couches minces (GCM), Département de Physique, Université de Montréal C.P. 6128, Succursale centre-ville, Montréal, Québec H3C 3J7, Canada*

<sup>b</sup> *Groupe de recherche en physique et technologie des couches minces (GCM), Département de Génie Physique, École Polytechnique de Montréal C.P. 6079, Succursale centre-ville, Montréal, Québec H3C 3A7, Canada*

We have performed Monte Carlo (MC) calculations of the temperature ( $T$ ) and field ( $F$ ) dependence of the behavior of the multiple-trapping model assuming exponential band tails of localized states with two different models for field-dependent effects for high field carrier transport. The properties calculated are the effective temperature,  $T_{eff}$ , the drift mobility,  $\mu_d(T, F)$ , and the dispersion parameters  $\alpha_1(T, F)$  and  $\alpha_2(T, F)$ , before and after the transit time,  $t_T$ . The calculation with elastic tunnelling clearly shows a separation of the field and temperature effects in the dispersion parameters  $\alpha(T, F)$ . In this case,  $T_{eff}$  is not clearly defined from the electron distribution function,  $f_i(E)$ , in localized states. The calculation with field-assisted detrapping (diagonal jump from localized states to the band) shows a smooth transition in the  $\alpha(T, F)$  and a well-defined effective temperature. We suggest that this model is more appropriate for charge transport in the presence of high field. Our MC results for  $\alpha$  and drift mobility are compared with high field time-of-flight (TOF) experimental data for temperatures ranging from 100 K to 400 K, with very acceptable agreement with the diagonal jump model (DJM).

## 1 Introduction

Low field time-of-flight (TOF) experiments on hydrogenated amorphous silicon (a-Si:H) are reasonably well described by the multiple-trapping (MT) model [1–5] assuming exponential band tails of localized states:

$$g(E) = g_0 \exp(-E/kT_0), \quad (1)$$

where  $k$  is the Boltzmann constant and  $T_0$  is the characteristic temperature of the exponential distribution. The agreement between theory and experiment is improved when the Meyer-Neldel rule (MNR) is included [6]. In the presence of high electric field, the transient currents in the TOF experiments can still be described by a power law:

$$I(t) \sim \begin{cases} (\nu_0 t)^{-1+\alpha_1(T,F)} & t < t_T \\ (\nu_0 t)^{-1-\alpha_2(T,F)} & t > t_T \end{cases}, \quad (2)$$

where  $\nu_0$  is an attempt to escape frequency,  $T$  the temperature,  $F$  the electric field, and  $t_T$  the transit time. In contrast to the low field case, the dispersion parameters  $\alpha_1(T, F)$  and  $\alpha_2(T, F)$  depend not only upon  $T$ , but also upon  $F$ . In addition,  $t_T$  decreases with increasing  $T$  and  $F$ , while the drift mobility

$$\mu_d(T, F) = L/Ft_T \quad (3)$$

(where  $L$  is the sample length) increases. This is true both for electrons [7–13] and holes [14].

For field-dependent hopping, Shklovskii et al. [15] proposed that the electric field,  $F$ , can play the role of temperature and obtained, at  $T = 0$ , an effective temperature,  $T_{eff} = eaF/2k$ , where  $e$  is the elementary charge and  $a$  is the localization length. At finite temperature, Marianer and Shklovskii [16] found  $T_{eff}^2 = T^2 + (0.67eaF/k)^2$ , by fitting the tail of the electron distribution,  $f_i(E)$ , with a Boltzmann distribution  $\exp(-E/kT_{eff})$  which is calculated using the Monte Carlo (MC) method under steady-state conditions. For the MT model including elastic tunnelling, Esipov [17]

found an approximate analytical solution for the dispersion parameters  $\alpha = \alpha_1 = \alpha_2 = eaF/2kT_0$  for  $\beta = 2kT/eaF < 1$ , and  $\alpha = T/T_0$  for  $\beta > 1$ , and defined  $T_{eff} = \max(T, eaF/2k)$  from the dispersion parameters. This effective temperature was not calculated from the electron distribution as in Ref. [16], and had not been tested by replacing  $T$  by  $T_{eff}$  in the low field MT model. We present such tests in what follows.

We consider two versions of the MT model with exponential band tails of localized states and applied fields. First, we treat elastic tunnelling, as proposed by Esipov [17]. As we shall show, this model is not intuitively satisfying, and leads to physically unreasonable results. We therefore propose an alternative model which combines the temperature and field dependence in the detrapping rate. We believe that this represents an improvement over the elastic tunnelling model. We calculate the high field electron drift mobility,  $\mu_d(T, F)$ , the dispersion parameters  $\alpha_1(T, F)$  and  $\alpha_2(T, F)$ , before and after  $t_T$ , from the transient current, using Monte Carlo (MC) simulation. We also obtain  $T_{eff}$  from the electron distribution function  $f_i(E)$  and from the dispersion parameters. In addition, we directly verify the effective temperature  $T_{eff}$  concept from the standard MT model using the same set of simulation parameters.

## 2 Multiple-trapping models for high field transport

In this section, we describe two versions of the high field MT model: elastic tunnelling and field-assisted detrapping (diagonal jump from localized states to the band). We apply these to carrier transport, in order to model TOF experiments. These are simulated using MC algorithms, described in the next section.

### 2.1 Elastic tunnelling model (ETM)

Fig. 1(a) shows the MT model with elastic tunnelling, indicating trapping and detrapping processes by arrows. This model will be referred to as the ETM in what follows. Carrier occupation of state  $i$  follows a distribution function,  $f_i(x, t, E) =$

$n_i(x, t, E)/g(E)$ , where  $n_i(x, t, E)$  is the trapped carrier population in the localized states  $i$ . The evolution of  $f_i(x, t, E)$  is given by [17]

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} - (\Delta x)_i K_c^t(E) \frac{\partial n}{\partial x} = (K_c^0(E) + K_c^t(E)) \frac{n}{g(E)} (1 - f_i) - (K_r^0(E) + K_r^t(E)) f_i \quad (4)$$

In Eq. (4),  $n(x, t)$  represents the free carrier population and  $\Delta x$  is the elastic tunnelling distance. The factor  $(1 - f_i(x, t, E))$  assures that the final state is empty, and is normally neglected in the model for TOF experiments. We utilize the same release rates and slightly modified capture rates as in Ref. [17]. From the standard MT model, the thermal capture and release rates are:

$$K_c^0(E) = \frac{\nu_0}{kT} \exp(-E/kT_0) \quad (5)$$

and

$$K_r^0(E) = \nu_0 \exp(-E/kT) \quad (6)$$

In Eqs. (5) and (6),  $\nu_0$  is an attempt to escape frequency. They satisfy detailed balance, assuming an effective density of band tail states [2]  $N_{eff} \approx g_0 kT$ . The tunnelling release rate is

$$K_r^t(E) = \nu_0 \exp(-2E/eaF) \quad (7)$$

In Eq. (7),  $a$  is the localization length. By detailed balance, the tunnelling capture rate is:

$$K_c^t(E) = \frac{\nu_0}{kT} \exp(-E/kT_0) \exp(-2E/eaF) \quad (8)$$

The assumptions of the ETM are not intuitively satisfying. First, it is not clear why only elastic tunnelling should be allowed, and why all paths other than horizontal or vertical on Fig. 1(a) should be excluded. Further, it does not appear reasonable that detailed balance should apply to the tunnelling and trapping processes individually. Finally, as we shall see in Sec. 4, this model leads to unphysical predictions.

It is more satisfying to assume that trapping takes place as in the standard model, but that detrapping is dominated by the easiest, most favorable, path. We present such a model in what follows.

## 2.2 Field-assisted detrapping: Diagonal jump model (DJM)

In this case, we assume that carriers escape from band tail states by field assisted detrapping (or thermally assisted tunnelling). Except under extreme conditions of very high temperature and of very low field or of very low temperature and very low field, such processes will be favored over purely thermal emission or of purely elastic tunneling. In order to simplify the calculation, we further assume that this process involves only the most favorable path. We believe that the result is not very different from what it would be if we took account of all of the possible paths both for trapping and detrapping. We show in Fig. 1(b) the capture and the field-assisted detrapping processes for a carrier. The model is referred to as the DJM. As in the ETM, the capture rate is assumed to obey Eq. (5). Defining  $a$  in the same way as Shklovskii et al [15], we assume the release rate for a diagonal jump to be

$$K_r^F(E, \Delta x) = \nu_0 \exp(-\sqrt{(2\Delta x/a)^2 + (\Delta E/kT)^2}). \quad (9)$$

Here  $\Delta E = E - e\Delta x F$  represents the shift of the mobility edge due to the electric field. We minimize the exponent of Eq. (9) to find the optimal release rate:

$$K_r^F(E) = \nu_0 \exp(-E/\sqrt{(kT)^2 + (eaF/2)^2}) \quad (10)$$

One may see that Eq. (10) reduces to the standard MT release rate (Eq. (6)) when  $2kT \gg eaF$  and the tunnelling release rate (Eq. (7)) when  $2kT \ll eaF$ . Since  $K_c^0(E)$  and  $K_r^F(E)$  are the dominant processes; we neglect any others. Detailed balance requires that

$$\frac{n}{g(E)} K_c^0(E) = K_r^F(E) \frac{f_{eq}(E)}{1 - f_{eq}(E)}. \quad (11)$$

The equilibrium distribution function ( $f_{eq}(E)$ ) is then obtained by substituting Eqs. (5) and (10) into Eq. (11), again assuming

$$N_{eff} \approx g_0 kT; \quad (12)$$

$$f_{eq}(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{(E_F - E)/\sqrt{(kT)^2 + (eaF/2)^2}}{kT}\right)}, \quad (13)$$

where  $E_F$  is the effective Fermi level. By comparing Eq. (13) with the Fermi-Dirac distribution, we may define the effective temperature as

$$T_{eff} = \sqrt{T^2 + (eaF/2k)^2}. \quad (14)$$

This equation connects the temperature and field. The result is similar to the hopping effective temperature obtained by Marianer and Shklovskii [16]. For  $eaF/2kT \gg 1$ , Eq. (14) reduces to  $eaF/2k$ , which is the expression found by Esipov for the ETM.

### 3 Monte Carlo Simulations

In this section, we describe the modification of our low field MC algorithm for the simulation of time-of-flight experiments [5] to incorporate the high field effects of the ETM and DJM. The MC procedure consists of:

- (i) Generating a carrier at  $t = 0$  at one interface ( $x = 0$  for electrons or  $x = L$  for holes) or uniformly in the sample.
- (ii) Calculating the free flight time,  $t_c = K_c^{-1} \ln(1 - R_1)$ , where  $K_c$  is the total capture rate and  $R_1$  is a random number. Moving the carrier a distance  $d = v_d t_c$ , where  $v_d$  is the velocity  $v_d = \mu_0 F$  ( $\mu_0$  is the microscopic mobility), under the influence of the electric field. This carrier contributes a current  $I_{ind} = ev_d/L$ .
- (iii) Calculating the energy level  $E_i$ , in which the carrier will be trapped, using a random number  $R_2$  according to the capture rates  $K_c(E)$ . For the ETM, the



trapping path is selected by using a random number  $R_3$ . If

$$R_3 < \exp(-2E_i/eaF)/(1 + \exp(-2E_i/eaF)),$$

then the trapping process is vertical; otherwise it is horizontal. In the latter case, the distance is updated to  $d = d - \Delta x$  with  $\Delta x = E_i/eF$  and the backward tunnelling contributes a current  $I_t = -(e/L)(\Delta x/\Delta t)$ , where  $\Delta t$  is the time step. The contribution of the tunnelling current is normally negligible. For the DJM, there is only one capture path, as indicated in Fig. 1(b).

- (iv) Calculating the release time,  $t_d = K_r^{-1}(E) \ln(1 - R_4)$ , where  $K_r(E)$  is the total release rate and  $R_4$  is a random number. For the ETM, the detrapping path is selected by using another random number  $R_5$ . The condition for tunnelling to occur is

$$R_5 < \exp(-2E_i/eaF)/(\exp(-2E_i/eaF) + \exp(-E_i/kT)).$$

For the DJM, there is again only one allowed path. For both models, we add a distance  $\Delta x$  to  $d$  if the detrapping path is horizontal, contributing a tunnelling current  $I_t = (e/L)(\Delta x/\Delta t)$ .

- (v) Recording the history of the carrier while steps ii to iv are repeated until the carrier is collected.
- (vi) Repeating all the steps with many carriers. The total current is the average of all contributions.

We have introduced only one new parameter: the localization length  $a$ . Since carrier transport calculations are very sensitive to the choice of the simulation parameters,  $\mu_0$ ,  $\nu_0$ ,  $T_0$ , and  $a$ , we assume that the previous values of  $\mu_0$ ,  $\nu_0$ , and  $T_0$  [5] remain unchanged in the presence of high field. The following values are used for electrons:  $\mu_0 = 4 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ ,  $\nu_0 = 1 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$  and  $T_0 = 310 \text{ K}$ ; and for holes:  $\mu_0 = 0.5 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ ,  $\nu_0 = 1 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$  and  $T_0 = 490 \text{ K}$ .

## 4 Results

While it is not certain that it can be defined in all cases [18], the effective temperature,  $T_{eff}$ , is a useful concept in high field carrier transport. The idea is that  $T$ , in the low field regime, can be replaced by  $T_{eff}$ , obtained from the high field regime, to describe high field carrier transport.  $T_{eff}$  should be defined, fundamentally, from the carrier distribution  $f_i(E)$ . In Fig. 2, we show  $f_i(E)$  for the two models.  $E = 0$  is the conduction band edge, and higher energies represent deeper traps. In Fig. 2 (a) we show results for the ETM and in (b) we show results for the DJM, at  $T = 100$  K and  $T = 180$  K for  $t = 100$  ps and  $t = 1$  ns with  $a = 8$  Å and  $F = 4.5 \times 10^5$  Vcm<sup>-1</sup>. We also indicate the demarcation energy,  $E_d(t)$ , at  $T = 100$  K (solid arrows) and at  $T = 180$  K (dashed arrows). The demarcation energy is calculated from  $E_d(t) = kT \ln(\nu_0 t)$  for  $\beta > 1$  and  $E_d(t) = eaF/2 \ln(\nu_0 t)$  for  $\beta < 1$  for the ETM, and from  $E_d(t) = kT_{eff} \ln(\nu_0 t)$ , where  $T_{eff}$  is defined in Eq. (14), for the DJM. Before the transit time, the carriers above the demarcation energy ( $E < E_d(t)$ ) are in equilibrium with those in the band [2]. That is, the slopes of  $f_i(E)$  are unchanged at different times  $t$ . The value of  $T_{eff}$  determined from  $f_i(E)$  is shown in Fig. 3 (a) for the ETM and (b) for the DJM. For the ETM, the distribution function  $f_i(E)$  is not well defined near the origin (not a Boltzmann distribution). That is, the slope of  $\log(f_i(E))$  vs  $E$  is not constant as may be seen in Fig. 2 (a). As a result, the effective temperature for the ETM cannot be clearly defined from the carrier distribution. The values of  $T_{eff}$  in Fig. 3 (a) are calculated between  $0.01$  eV  $< E < 0.04$  eV. There is an unphysical minimum in  $T_{eff}$  as a function of  $T$  in Fig. 3 (a), which was not noted by Esipov [17] due to the nature of his approximations. While, as noted above, it is not certain that the distribution will always be given by the Fermi-Dirac function of an effective temperature; the minimum leads to unphysical forms for the field dependence of mobility and of dispersion parameters, and to serious disagreement with experiment, as we show below. This difficulty arises due to the way that detailed balance was treated by Esipov. The solid curve is the best fit to  $T_{eff}^x = T^x + (eaF/2k)^x$ , with  $x = 5$ ; this expression is different from the approximate analytical MT effective

temperature obtained by Esipov. For  $\beta \ll 1$ ,  $T_{eff} = eaF/2k$ , which is the result obtained by Esipov, as expected. For the DJM, the effective temperatures calculated from  $f_i(E)$  are exactly those given by  $T_{eff}^2 = T^2 + (eaF/2k)^2$ , as expected. We have also verified that the  $T_{eff}$  calculated from  $f_i(E)$  in Fig. 3(b) are the same as those calculated from the definition [9]  $\alpha_1(T_{eff}, F = 0) = \alpha_1(T, F)$ .

In Fig. 4, we compare the prediction for  $f_i(E)$  from DJM with that obtained when the temperature,  $T$ , in the standard MT model is replaced by  $T_{eff}$  (Eq. (14)), as proposed by Marianer and Shklovskii [16] for the hopping model, by calculating the transient current and electron distribution. The solid curves are calculated at  $T = 100$  K in (a), and at  $T = 180$  K in (b) with  $F = 4.5 \times 10^5$  Vcm $^{-1}$  with the high field effect included. The dashed curves are calculated with the standard MT model but with  $T = T_{eff} = 237$  K in (a) and  $T = T_{eff} = 275$  K in (b). Clearly, the DJM yields the Fermi-Dirac carrier distribution at the temperature,  $T_{eff}$ , as defined by Eq. (14). As indicated above, we cannot do the same with the ETM, for which  $T_{eff}$  is not even well defined for some parts of  $f_i(E)$ . Further, when we take the  $T_{eff}$  which gives the best fit to model the dispersion parameters  $\alpha$  for the ETM, it again yields unphysical minima, as it does for  $f_i(E)$  in Fig. 2. As a result, we shall concentrate on the DJM in what follows.

Calculated transient currents  $I(t)$  for electrons are shown in Fig. 5 for  $L = 10$   $\mu$ m,  $F = 450$  kV/cm,  $a = 8$   $\text{\AA}$ , and different temperatures, indicated in the figure caption. These currents are given in units of elementary charges per second and are normalized to a single electron-hole pair generated at  $x = 0$  at time zero. At very short times ( $t \lesssim \nu_0^{-1}$ ), currents are high because most carriers are still free. Carriers enter the multiple-trapping regime at  $t \sim \nu_0^{-1}$ . The position of the second knee represents the average transit time  $t_T$ .

In Fig. 6, we show the dispersion parameters  $\alpha_1$  and  $\alpha_2$ , before and after the transit time, obtained from plots like Fig. 5, as a function of  $T$ , with the electric field as a parameter. The solid line represents the standard MT analytical prediction

[2,3]  $\alpha = T/T_0$  and the stars represent the standard MT result obtained by MC simulation [5]. The dashed curves represent  $\alpha(T, F) = T_{eff}/T_0$ , where  $T_{eff}$  is given by Eq. (14). These are in good agreement with MC results up to 400 kV/cm for  $\beta \ll 1$ . First, we see that the results from the DJM converge to the standard MT results when the field is reduced, as expected. Furthermore, most of the observations made from the standard MT [5] can easily be extended to the DJM by replacing  $T$  in the MT model by  $T_{eff}$ . In particular, we see that: (1)  $\alpha_1 = T_{eff}/T_0$  when  $T_{eff}/T_0 \lesssim 0.6$  and (2)  $\alpha_1 \rightarrow 1$  and  $\alpha_2 \rightarrow \infty$  as  $T_{eff} \rightarrow \infty$ . As a special case of observation (1),  $\alpha_1 \approx eaF/2kT_0$  when  $T \rightarrow 0$  as previously noted [9,17] but only when  $eaF/2kT_0 \lesssim 0.6$ .

In Fig. 7, we compare the currents predicted by the high field model with that obtained when  $T$  in the low field model is replaced by  $T_{eff}$ . This is analogous to the comparison of the prediction for  $f_i(E)$ , in Fig. 4. The two calculations yield the same slopes of  $\log(I)$  vs  $\log(t)$ , that is the same  $\alpha$ 's. However, we note that the absolute values of the current, and thus, the values of  $t_T$ , are not the same in the two calculations. This may be understood relatively easily. From Eqs. (12) and (13), we recognize that the free electron density,  $n$ , at  $E = 0$ , is given by

$$n \approx g_0 kT \exp(-E_F/kT_{eff}) \quad (15)$$

before the transit time. From Fig. 4, we see that  $E_F = E_F(T_{eff}, t)$ . Thus, for two sets of temperature and field,  $T_1, F_1$  and  $T_2, F_2$  corresponding to the same value of  $T_{eff}$ ,

$$\frac{n_1}{n_2} \approx \frac{T_1}{T_2}, \quad (16)$$

before the transit time. Since  $I = ne\mu_0 F$ , this implies that

$$\frac{I_1}{I_2} \approx \frac{T_1}{T_2}. \quad (17)$$

In particular, we find, from Fig. 7(a),

$$\frac{I(T = 237 \text{ K}, T_{eff} = 237 \text{ K}, F = 450 \text{ kVcm}^{-1})}{I(T = 100 \text{ K}, T_{eff} = 237 \text{ K}, F = 450 \text{ kVcm}^{-1})} \approx 2.4,$$

and from Fig.7(b), that

$$\frac{I(T = 275 \text{ K}, T_{eff} = 275 \text{ K}, F = 450 \text{ kVcm}^{-1})}{I(T = 180 \text{ K}, T_{eff} = 275 \text{ K}, F = 450 \text{ kVcm}^{-1})} \approx 1.5,$$

as expected. This explicit dependence of the current and the transit time on both  $T$  and  $T_{eff}$  explains why Nebel et al. [9] did not obtain the same values of  $T_{eff}$  from  $\alpha(T_{eff}, F = 0) = \alpha(T, F)$  and from  $\mu_d(T_{eff}, F = 0) = \mu_d(T, F)$ .

## 5 Comparison with experiment; discussion

We assume that the low field transport parameters values ( $\mu_0$ ,  $\nu_0$  and  $T_0$ ) can be used in the presence of high electric field for electrons and holes to model high field TOF experiments. The localization length,  $a$ , is then the only adjustable parameter. Fig. 6 shows predictions for  $\alpha_1$  and  $\alpha_2$  as a function of the temperature for different electric fields with a given localization length ( $a = 8 \text{ \AA}$ ). In Fig. 8, we compare the prediction for  $F = 350 \text{ kV/cm}$  in Fig. 6(a) to the experimental data for  $\alpha_1$  for electrons obtained by Nebel et al. [9] and by Nakata et al. [11]. Several conclusions may be drawn from Fig 8. First, we note that the results from the two laboratories are inconsistent. The values at relatively low field [11] increase more rapidly, and saturate at  $\alpha = 1$  more quickly than do the high field values [9]. This is in contrast to experiments at very low field [1–5], which are fairly consistent among themselves. Second, our MC prediction is somewhat higher than the experiment of Nebel et al. [9] at low temperature, and lower than experiment at high temperature. This is again in contrast with the situation at very low field, for which we were able to obtain very good agreement [5]. While we would expect this discrepancy to decrease somewhat if Meyer-Neldel Rule were included in our model [6], this would not be likely to eliminate it completely.

These difficulties may arise from several sources. First, it is possible that the localization length,  $a$ , unlike  $\mu_0$ ,  $\nu_0$  and  $T_0$  is highly sensitive to sample preparation.

It has been proposed [19] that  $a$  should be a function of  $E$ , which would also make it an effective function of  $T$ . Second, the application of high field decreases the experimental time scale by more than an order of magnitude, making measurements difficult. It may be that the experimental uncertainties in determining the values of  $\alpha$ , which requires determining the slopes of linear portions of the  $\log(I(t))$  vs  $\log(t)$  curve, are greater than has previously been assumed. These questions require further investigation.

In Fig. 9, we compare the calculated and measured [14] values of  $\alpha_2$  for a  $1.2\ \mu\text{m}$  thick sample at  $T = 80\ \text{K}$ , for holes, with  $a = 10\ \text{\AA}$ . We also show the theoretical prediction of  $\alpha = T_{eff}/T_0$ , where once again  $T_{eff}$  is given by Eq. (14). We note that according to the standard MT model, for  $T/T_0 < 0.6$ ,  $\alpha_1$  should be equal to  $\alpha_2$  [5]. The calculation is in good agreement with the data of Nebel and Street [14] for electric fields above  $150\ \text{kVcm}^{-1}$ . At lower fields, the MC calculation cannot reproduce the experimental data. At fields  $F < 80\ \text{kV/cm}$ , the calculation shows that  $\alpha_2$  approaches the low field value of  $\alpha_2 = T/T_0 = 0.163$ , but does not approach zero, as does the experimental value. This discrepancy between predicted and measured values of  $\alpha_2$  is analogous to the one observed at low  $T$  in low field TOF experiments [5,6] and should be resolved if the MN effect is included in the calculation [6]. In this case, the calculation should yield lower values of  $\alpha_2$  [6], in better agreement with the experiment. We also note that since  $\mu_0$  for holes is nearly an order of magnitude smaller than for electrons, the application of high fields brings the measurement times into a relatively convenient range in this case.

In the experimental literature, the transit time,  $t_T$ , and the drift mobility,  $\mu_d$ , have been defined in a number of different ways. In what follows we present the calculated drift mobility using three different definitions, and compare it with experimental values obtained with the same definition. In Fig. 10, we show the electron drift mobility measurements of Gu et al. [12] with solid symbols. The drift mobility,  $\mu_d$ , is calculated from the transient current at 30 ns and is given by  $I(t)L/eF$ ; this definition of  $\mu_d$  has been used by Antoniadis and Schiff [7] and by Gu et al. [12]. The drift mobility calculated in this way, as predicted by DJM with  $a = 12\ \text{\AA}$  and  $a = 8\ \text{\AA}$  are shown.

It decreases for fields greater than  $250 \text{ kVcm}^{-1}$ , since the measurement times are then longer than  $t_T$  under these circumstances. The predictions of ETM for 100 K,  $a = 8 \text{ \AA}$  and  $a = 12 \text{ \AA}$ , are shown by solid lines. It is clear that, at low temperature, where the field effect is more important, ETM, using reasonable parameters, does not provide a satisfactory description of the experiment. DJM gives a far better description. However, as may be seen from Fig. 10, the experimental values increase more rapidly with temperature than the model predictions for constant  $a$ , although calculated and experimental slopes are in good agreement. Possible modifications of the model to yield better agreement are discussed in the next section.

In Fig. 11,  $t_T$  is defined as the intersection of two straight lines in the log-log plot of the transient currents (see Fig. 5a). We show the experimental values of Juška et al. at 295 K [13], along with calculated values for the standard MT model (solid curves) and for DJM (dashed curves) at  $T = 140 \text{ K}$  and  $T = 300 \text{ K}$ . At high temperature, where the field effect is small, the MC results agree reasonably well with the experimental data. Varying  $a$  between  $7 \text{ \AA}$  and  $9 \text{ \AA}$  will not affect the agreement between the experimental data and the MC calculation. At low temperature, a strong field dependence is predicted, with  $\mu_d$  increasing by more than one order of magnitude compared with the standard MT model. We also predict that for  $F \rightarrow \infty$ ,  $\mu_d \rightarrow \mu_0$ , just as  $\mu_d \rightarrow \mu_0$  when  $T \rightarrow \infty$  in the low field case [5]. At low field, the model gives the same results as the standard MT model, as expected.

Fig. 12 shows the comparison of the experimental data of Nebel and Bauer [10] and the calculated (with  $a = 8 \text{ \AA}$ ) temperature dependence of electron drift mobility for  $V = 30, 40, 60$  and  $70 \text{ V}$ , and  $L = 4 \mu\text{m}$ . The transit time  $t_T$  is defined as the time at which 50% of the charge has been induced in the external circuit. It is shown in Ref. [6] that the MT model including Meyer-Neldel (MN) effect, but without field-assisted detrapping, cannot reproduce these data with the best choice of simulation parameters. Taking account of field-assisted detrapping allows us to reproduce the data for  $F > 10^5 \text{ Vcm}^{-1}$ . We note however, that in the transition region, this calculation underestimates the experimental data at low temperature. It is

possible that consideration of both MN and field effect might improve the agreement.

In this section, we have fit the data for electrons using  $a = 8 \text{ \AA}$  in Figs. 11 and 12, but  $a = 12 \text{ \AA}$  in Fig. 10. This is not unreasonable since  $a$  could depend on sample preparation conditions, or upon  $E$  and  $T$  as discussed above. For holes, we found  $a = 10 \text{ \AA}$ . This value is very similar to the values obtained for electrons. The range of values used appears to be quite plausible for a material like a-Si:H.

## 6 Conclusion

We have shown that the elastic tunneling model for field dependent effect in multiple-trapping time-of-flight experiment is physically counter-intuitive. It is also unable to provide an adequate account of the results for such experiments. In contrast, we believe that the field-assisted detrapping model is intuitively satisfying. It leads to a simple, and reasonable expression for the effective temperature. The field-assisted detrapping model is able to reproduce experimental results quite adequately, even when the values of three transport parameters,  $\mu_0$ ,  $\nu_0$ , and  $T_0$  are restricted to the values which were previously obtained for low field transport [5]. The only parameter which we have permitted to vary in the present analysis is the localization length,  $a$ .

At high temperature, the MC calculation of the drift mobility is in good agreement with the experimental data of Juška et al. [13] and Nebel and Bauer [14] with  $a = 8 \text{ \AA}$ . At low temperature, we found  $a = 12 \text{ \AA}$  at  $T = 100 \text{ K}$  to be the best fit to the data of Gu et al. [12]. The fit to their data for higher temperatures is not entirely satisfactory. A number of modifications could be made in the present model, in order to make it more complete, and to improve agreement with the experiment:

- (i) Allowing  $T_0$ ,  $\mu_0$  and  $\nu_0$  be adjustable, along with  $a$  (but limiting ourselves to one set of values). This is expected to improve the agreement with the experiment for  $\alpha$  for electrons.
- (ii) Including a dependence of  $a$  upon  $T$ . Mott [19] has proposed that  $a$  will increase



as the energy of a band tail state approaches the mobility edge. This will effectively make the localization length a function of temperature. However, using this model would result in the introduction of two additional parameters.

- (iii) Including the Meyer-Neldel effect. This will surely improve the agreement between theory and experiment both for electrons and holes, especially at low temperatures.
- (iv) Including the relaxation of trapped carriers [20], in order to analyze its impact on carrier transport at high field regime.
- (v) Combining two or several, of the modification (i)-(iv).

In addition, as we have noted above, the inconsistencies among experiments need to be resolved. Thus, at the present time there is no reason to believe that a sufficiently complete version of the MT model cannot describe TOF transport in a-Si:H under all conditions of temperature, thermal and optical treatment, and field, both for electrons and for holes.

## References

- [1] J.M. Marshall, Rep. Prog. Phys. **46**, 1235 (1983).
- [2] T. Tiedje, in Physics of Hydrogenated Amorphous Silicon, edited by J. D. Joannopoulos and G. Lucovsky (Springer, New York, 1984), Vol. 2, p. 261.
- [3] T. Tiedje, in Semiconductors and Semimetals, edited by J. Pankove (Academic Press, New York, 1984), Vol. 21C, p.207.
- [4] W.E. Spear, in Advances in Disordered Semiconductors, Vol 1, ed. H. Fritzsche (World Scientific, Singapore, 1989) p.271.
- [5] W.C. Chen and L.A. Hamel, in Amorphous Silicon Technology - 1996, ed. by M. Hack, E.A. Schiff, S. Wagner, R. Schropp and A. Matsuda (Materials Research Society, Pittsburgh, 1996) p.759.
- [6] W.C. Chen, L.A. Hamel and A. Yelon, J. Non-Cryst. Solids **220**, 254 (1997).
- [7] H. Antoniadis and E.A. Schiff, Phys. Rev B **43**, 13957 (1991).
- [8] H. Antoniadis, R.I Devlen, S. Esipov, S. Guha, E.A. Schiff and J. Tauc, J. Non-Cryst. Solids, **137-138**, 407 (1991).
- [9] C.E. Nebel, R.A. Street, N.M. Johnson and J. Kocka, Phys. Rev. B **46**, 6789 (1992).

- [10] C.E. Nebel, G.H. Bauer, *Phil. Mag. B* **59**, 463 (1989).
- [11] J.I. Nakata, S. Nakajima, S. Imao, and Y. Inuishi, *Jpn. J. Appl. Phys.* **33**, 5640 (1994).
- [12] Qing Gu, E.A Schiff, J.B. Chévrier and B. Equer, *Phys. Rev. B* **52**, 5695 (1995).
- [13] G. Juška, K. Arlauskas and J. Kocka, *J. Non-Cryst. Solids*, **189-200** 202 (1996).
- [14] C.E. Nebel and R.A. Street, *Phil. Mag. B* **67**, 407 (1993).
- [15] B.I. Shklovskii, E.I Levin, H. Fritzsche and S.D. Baranovskii, in *Advances in Disordered Semiconductors*, Vol 3, ed. H. Fritzsche (World Scientific, 1990), p.161.
- [16] S. Marianer and B.I. Shklovskii, *Phys. Rev. B* **46**, 13100 (1992).
- [17] S.E. Esipov, *Phys. Rev. B*, **44**, 7930 (1991).
- [18] W.C. Chen, L.A. Hamel, M. Kemp, and A. Yelon, in *Amorphous and Heterogeneous Silicon Thin Films: Fundamentals to Devices –1999*, ed. by H.M. Branz, R.W. Collins, H. Okamoto, S. Guha, and R. Schropp (Materials Research Society, 1999).
- [19] N.F. Mott, *Conduction in Non-Crystalline Material* (Oxford Science Publication, 1993).
- [20] W.C. Chen, M. Kemp, L.A. Hamel and A. Yelon, to be published.

## Figure Caption:

Fig. 1: Models for high field carrier transport; the trapping and detrapping rates by thermal and field excitations are indicated by arrows. (a) Elastic tunnelling model (ETM). (b) Diagonal jump model (DJM). The symbols are defined in the text.

Fig. 2: Electron distribution in localized states for  $F = 450 \text{ kVcm}^{-1}$ ,  $t = 100 \text{ ps}$  and  $t = 1 \text{ ns}$  (a) for the ETM and (b) for the DJM. The solid and dashed curves are calculated for  $T = 100 \text{ K}$  and  $T = 180 \text{ K}$  respectively. The demarcation energy  $E_d(t)$  for  $T = 100 \text{ K}$  (solid arrow) and for  $T = 180 \text{ K}$  (dashed arrow) is indicated in the same figure.

Fig. 3: Effective temperature calculated from the electron distribution  $f_i(E)$  using (a) ETM and (b) DJM with  $a = 8 \text{ \AA}$ . (a) The solid curve represents the fit with  $T_{eff}^x = T^x + (eaF/2k)^x$ ; the best fit is with  $x = 5$ . (b) The solid curves are calculated with  $T_{eff}^2 = T^2 + (eaF/2k)^2$ .

Fig. 4: Comparison of the prediction for the electron distribution,  $f_i(E)$ , from the DJM (solid curves) with that obtained when the temperature  $T$  in the standard MT model (dashed curves) is replaced by  $T_{eff}$  for  $F = 450 \text{ kVcm}^{-1}$ ,  $t = 100 \text{ ps}$  and  $t = 1 \text{ ns}$ .

Fig. 5: Simulated electron transient current using DJM for  $T = 50 \text{ K}$  (full line),  $T = 100 \text{ K}$  (dashed line),  $T = 180 \text{ K}$  (dotted line) and  $T = 220 \text{ K}$  (dotted-dashed line) with  $a = 8 \text{ \AA}$ ,  $F = 450 \text{ kV/cm}$ , and  $L = 10 \text{ }\mu\text{m}$ .

Fig. 6: Temperature and field dependence of the dispersion parameters for electrons calculated using DJM with  $a = 8 \text{ \AA}$ . (a) before the transit time ( $\alpha_1$ ) and (b) after the transit time ( $\alpha_2$ ) for different electric fields as indicated in the legend. The dashed curves are calculated with  $T_{eff}/T_0$ , where  $T_{eff}$  is taken from Eq. (14).

Fig. 7: Comparison of the prediction for the current from the DJM (solid curves) with that obtained when the temperature  $T$  in the standard MT model (dashed curves) is

replaced by  $T_{eff}$  at  $F = 450 \text{ kVcm}^{-1}$ .

Fig. 8: Comparison of calculated and measured pre-transit dispersion parameters  $\alpha_1$  as a function of temperature for electrons at three different fields, from two experiments [9,11].

Fig. 9: Comparison of calculated and measured [14] post-transit dispersion parameter  $\alpha_2$  as a function of electric field for holes at  $T = 80 \text{ K}$ .

Fig. 10: Comparison of calculated and measured electron drift mobility at 30 ns [12] for different temperatures. The solid curves are calculated using the ETM for  $a = 8 \text{ \AA}$  and  $12 \text{ \AA}$  as indicated in the figure. The open symbols show values calculated using the DJM with  $a = 12 \text{ \AA}$ . The dashed curve is calculated with  $a = 8 \text{ \AA}$  at 100 K using the DJM.

Fig. 11: Calculated electrons drift mobility using Eq. (3) for the standard MT model (solid curves) and the DJM (dashed curves) at different temperatures. The experimental data at high temperature are taken from Juška et al. [13].

Fig. 12: Temperature dependence of the electron drift mobility. The solid symbols represent the experimental data of Nebel and Bauer [10]. The solid curves represent the MC calculation with  $a = 8 \text{ \AA}$  and  $L = 4 \mu\text{m}$ .

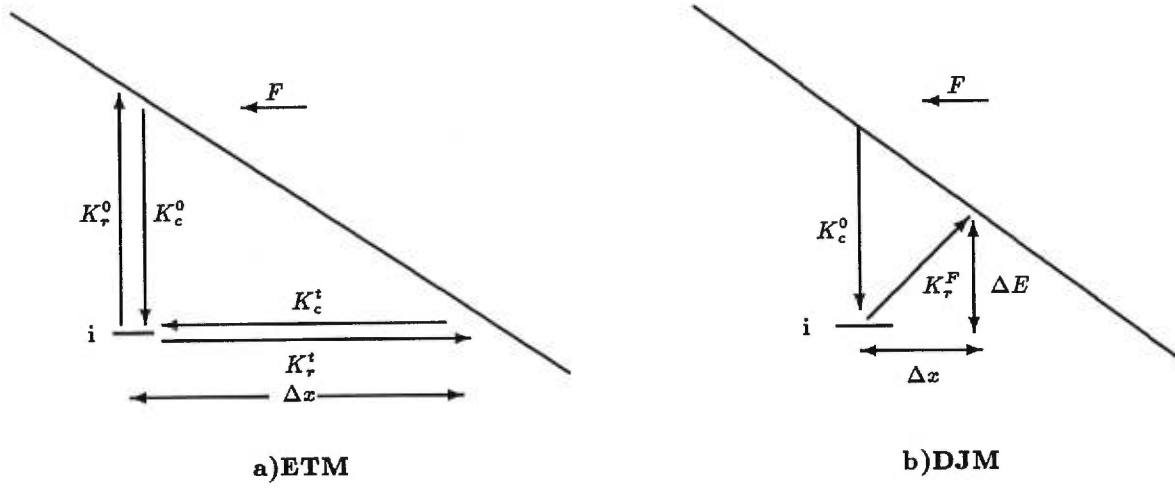


Fig. 1.

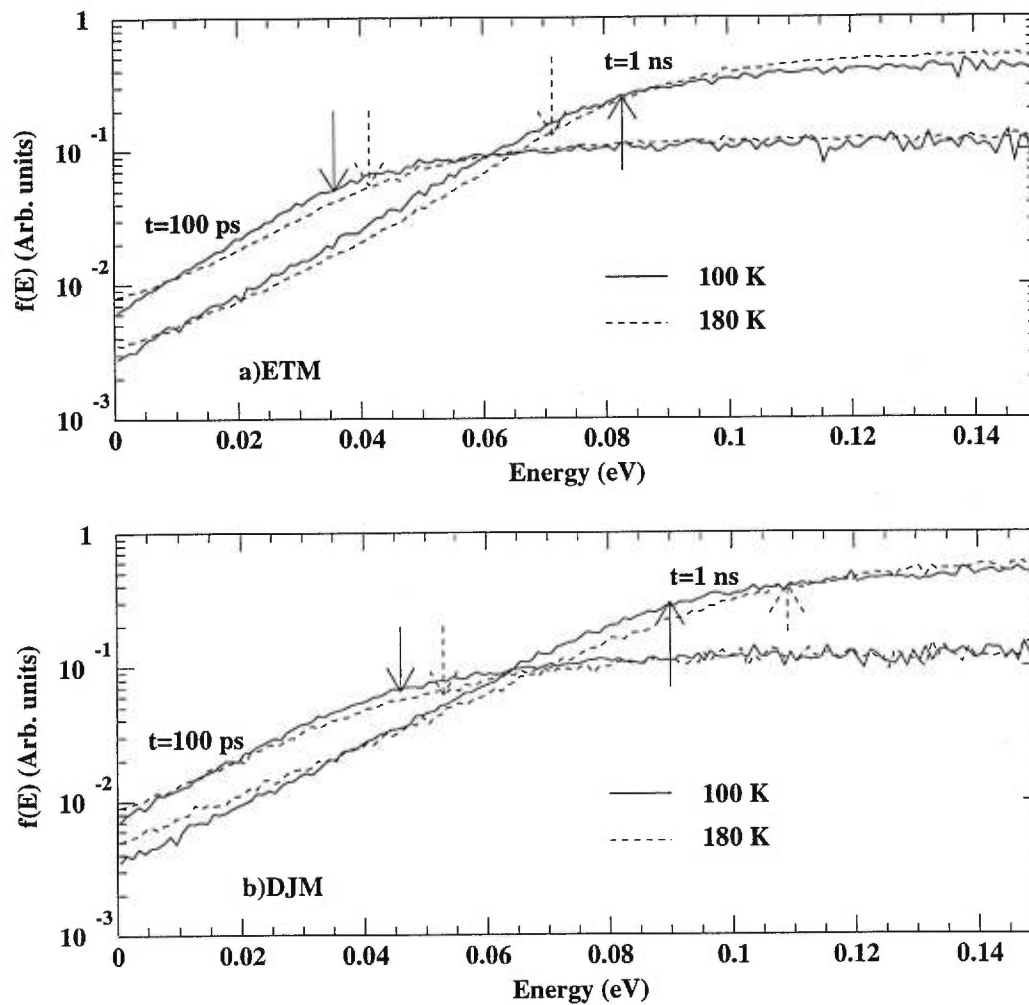


Fig. 2.

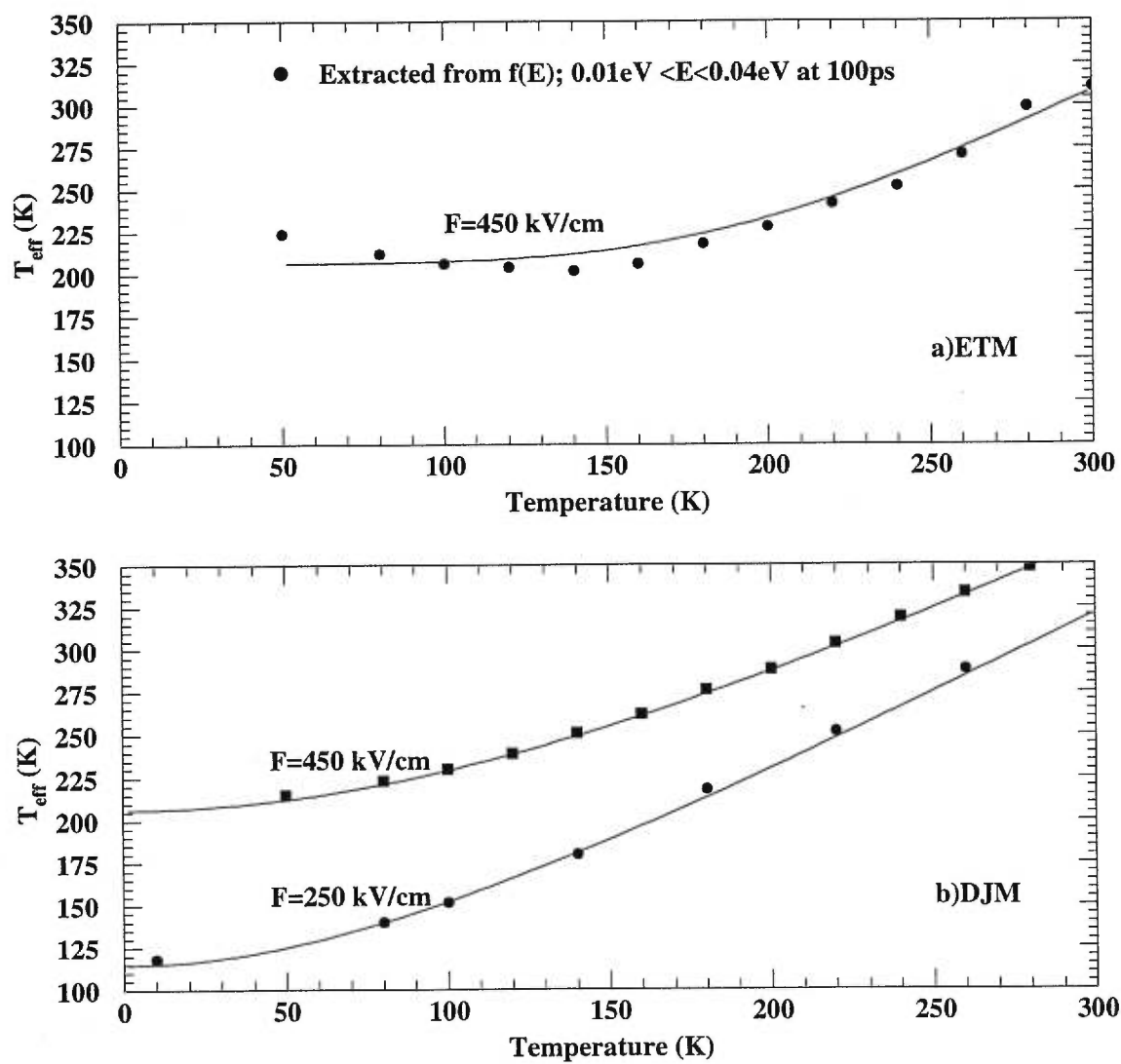


Fig. 3.

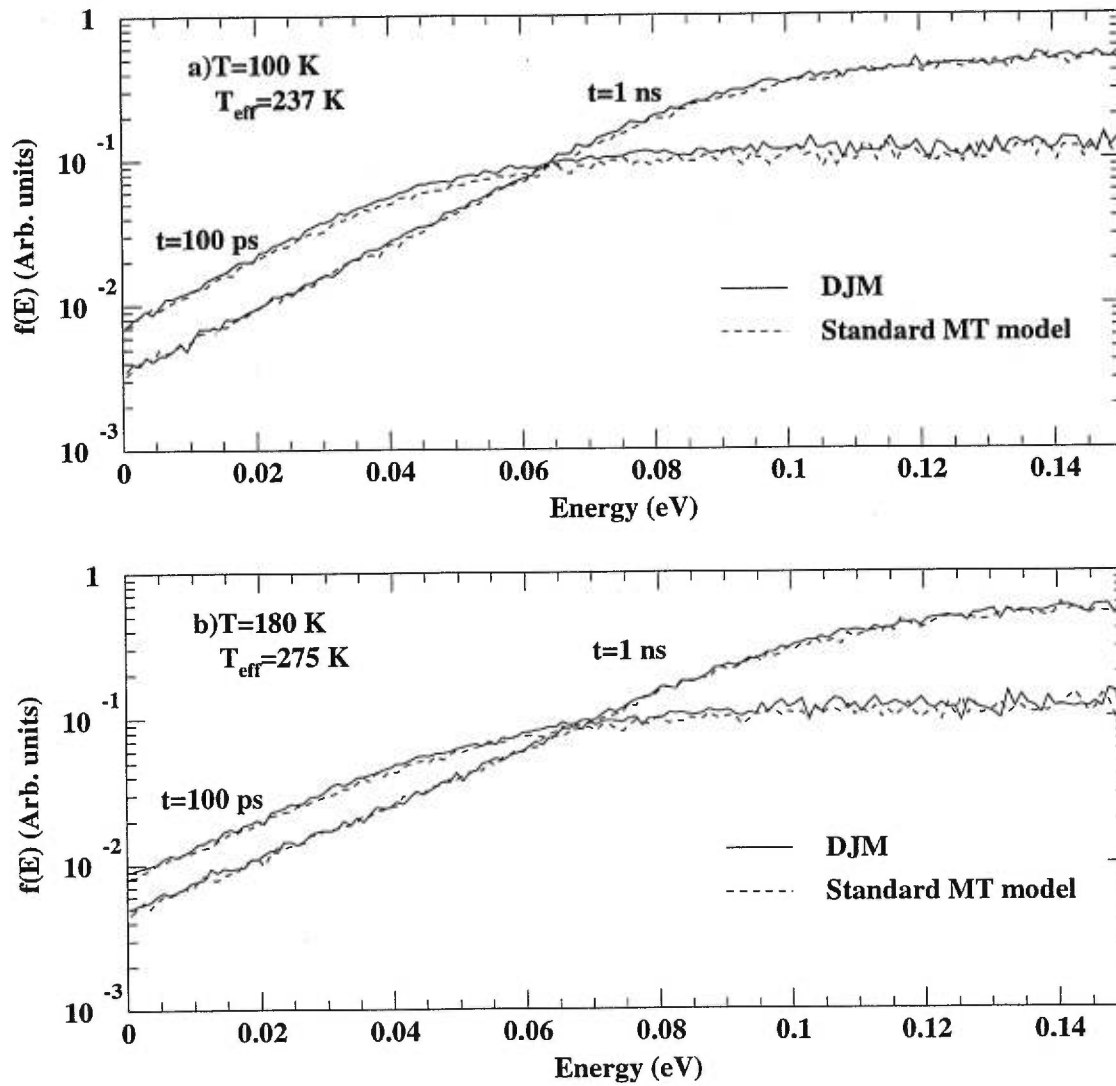


Fig. 4.



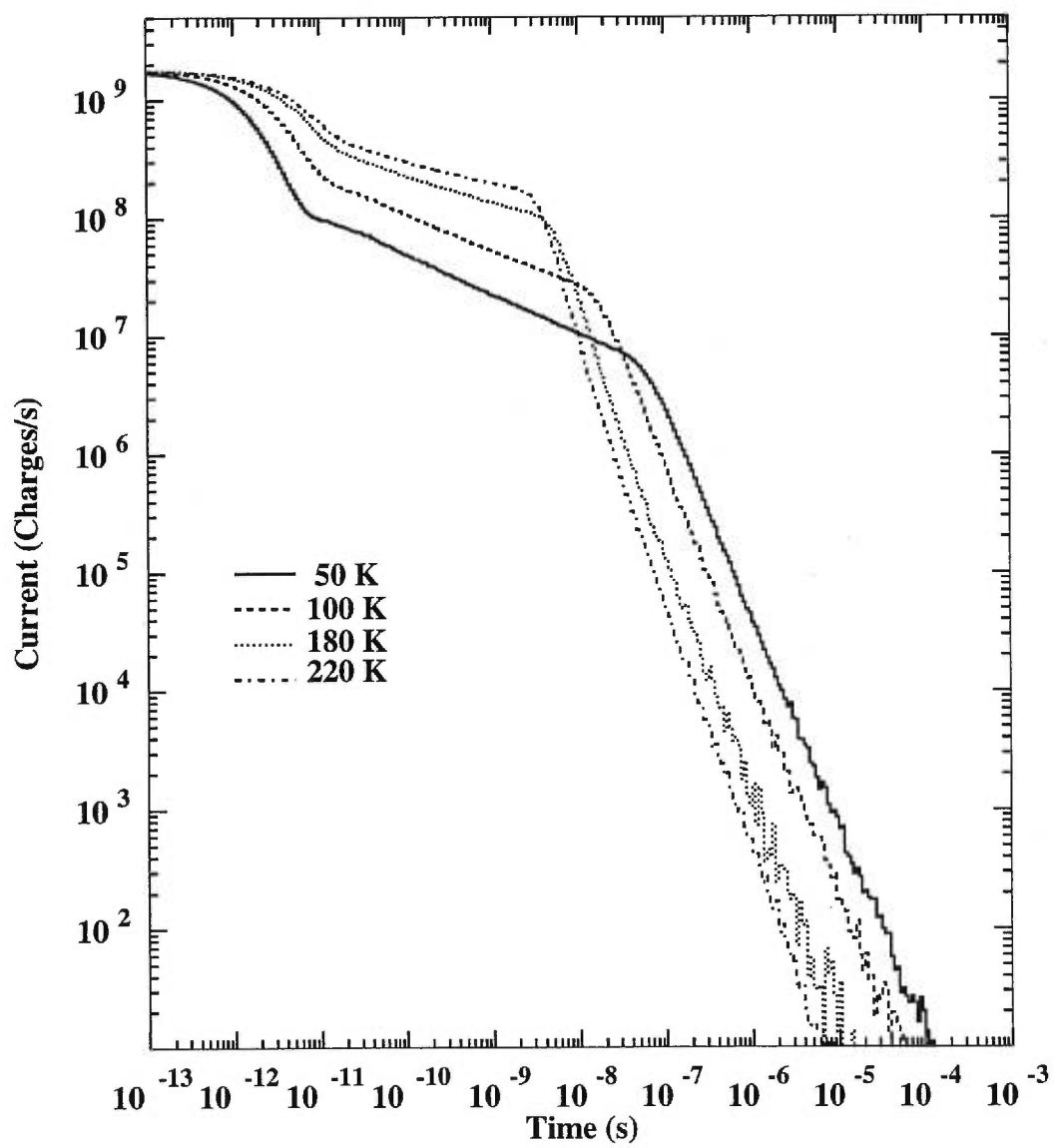


Fig. 5.

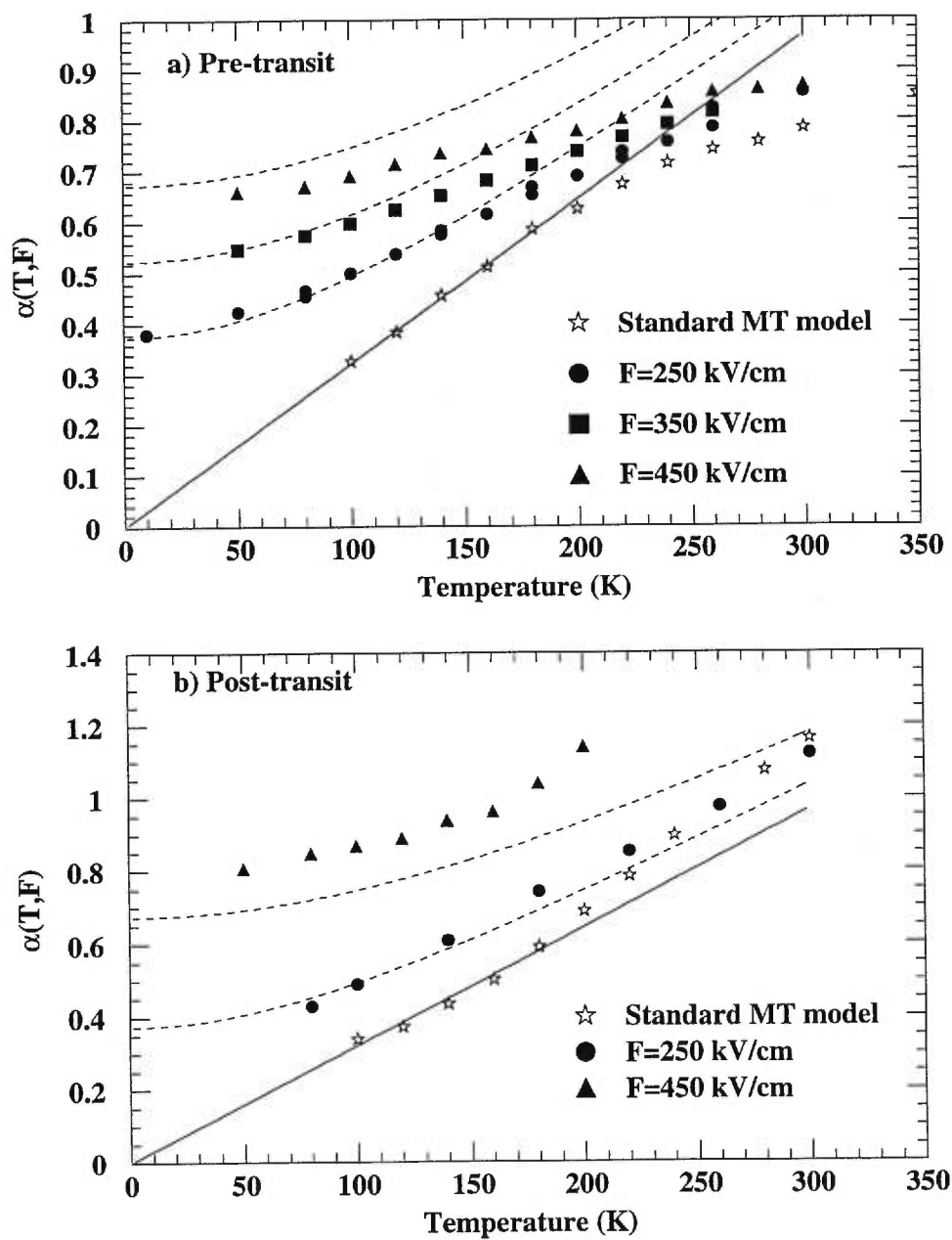


Fig. 6.

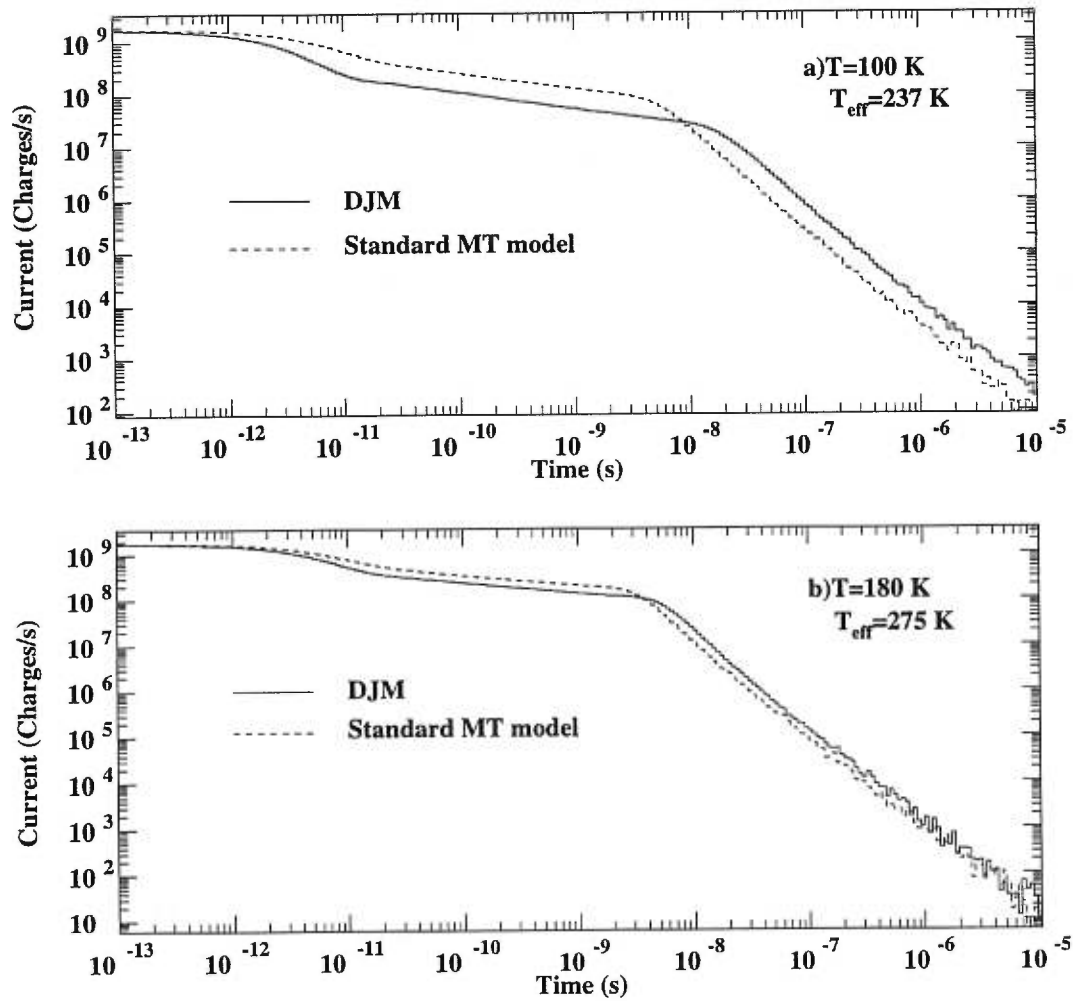


Fig. 7.

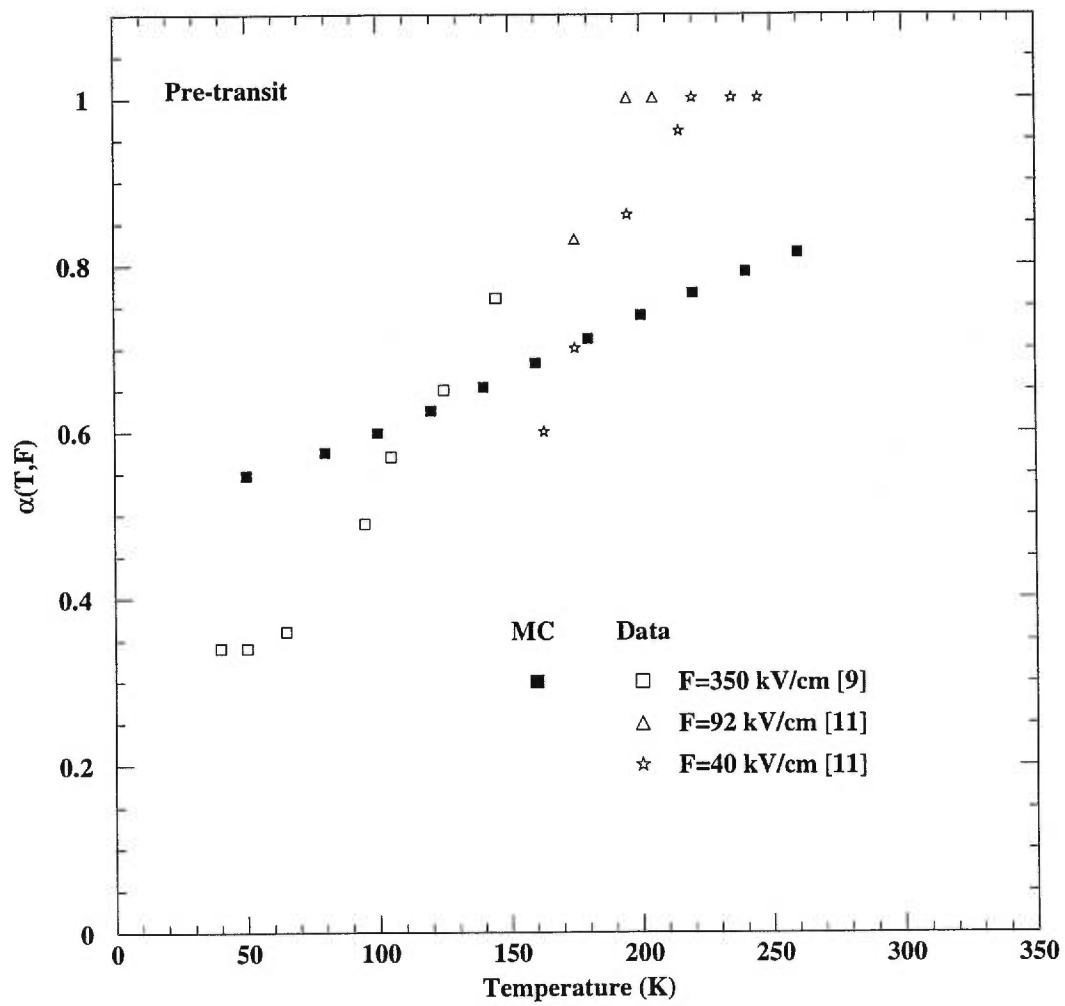


Fig. 8.

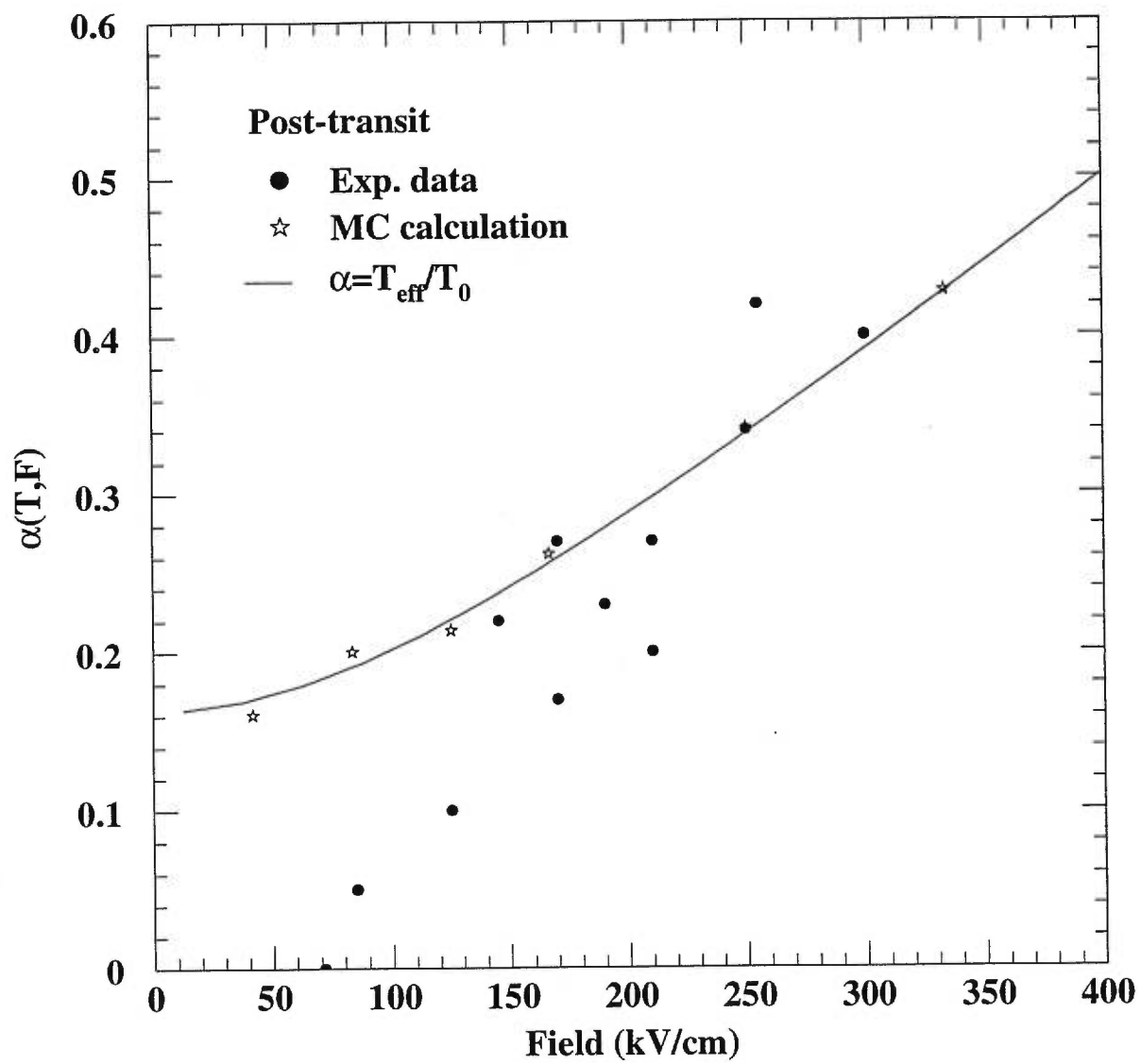


Fig. 9.

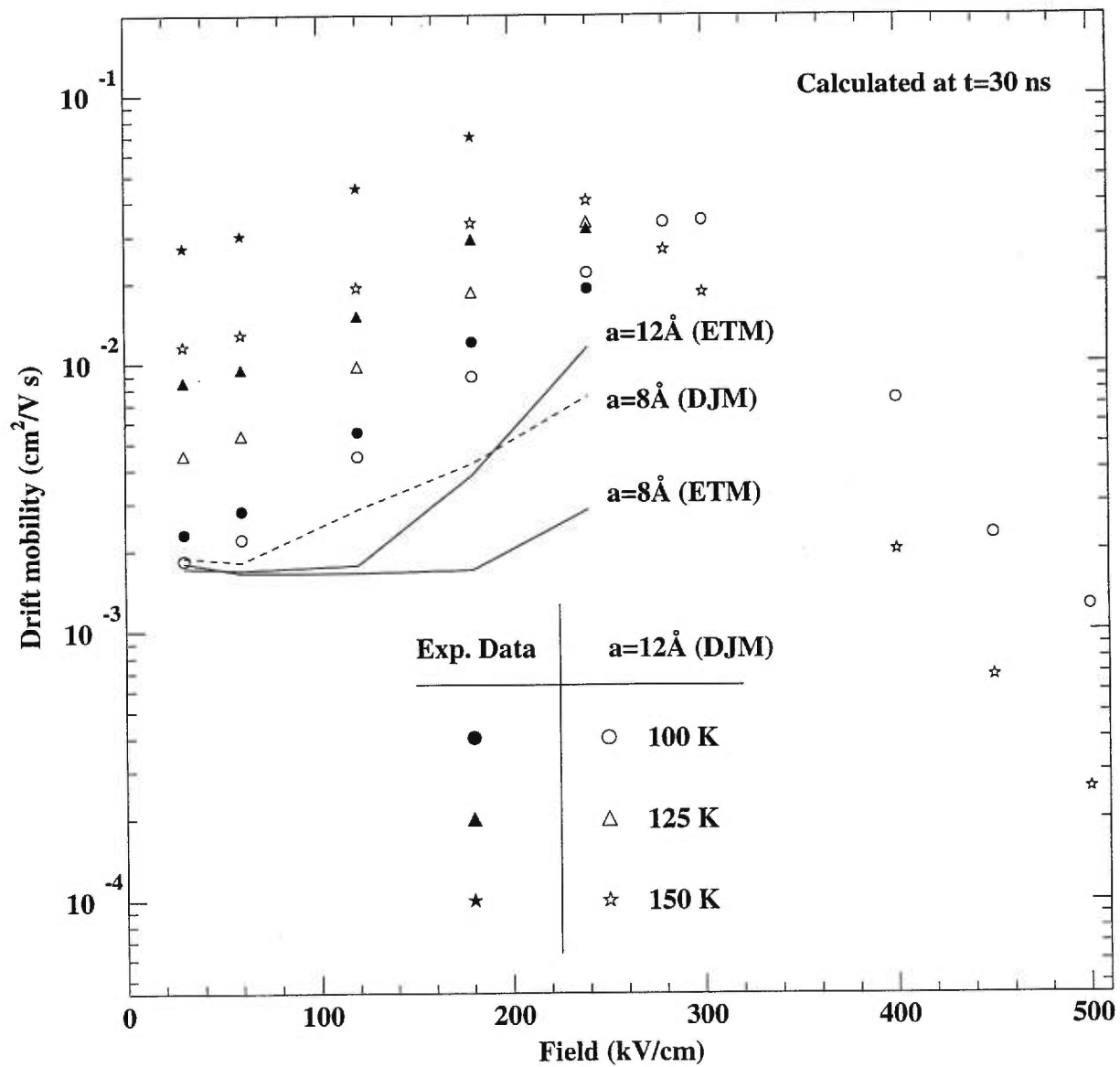


Fig. 10.

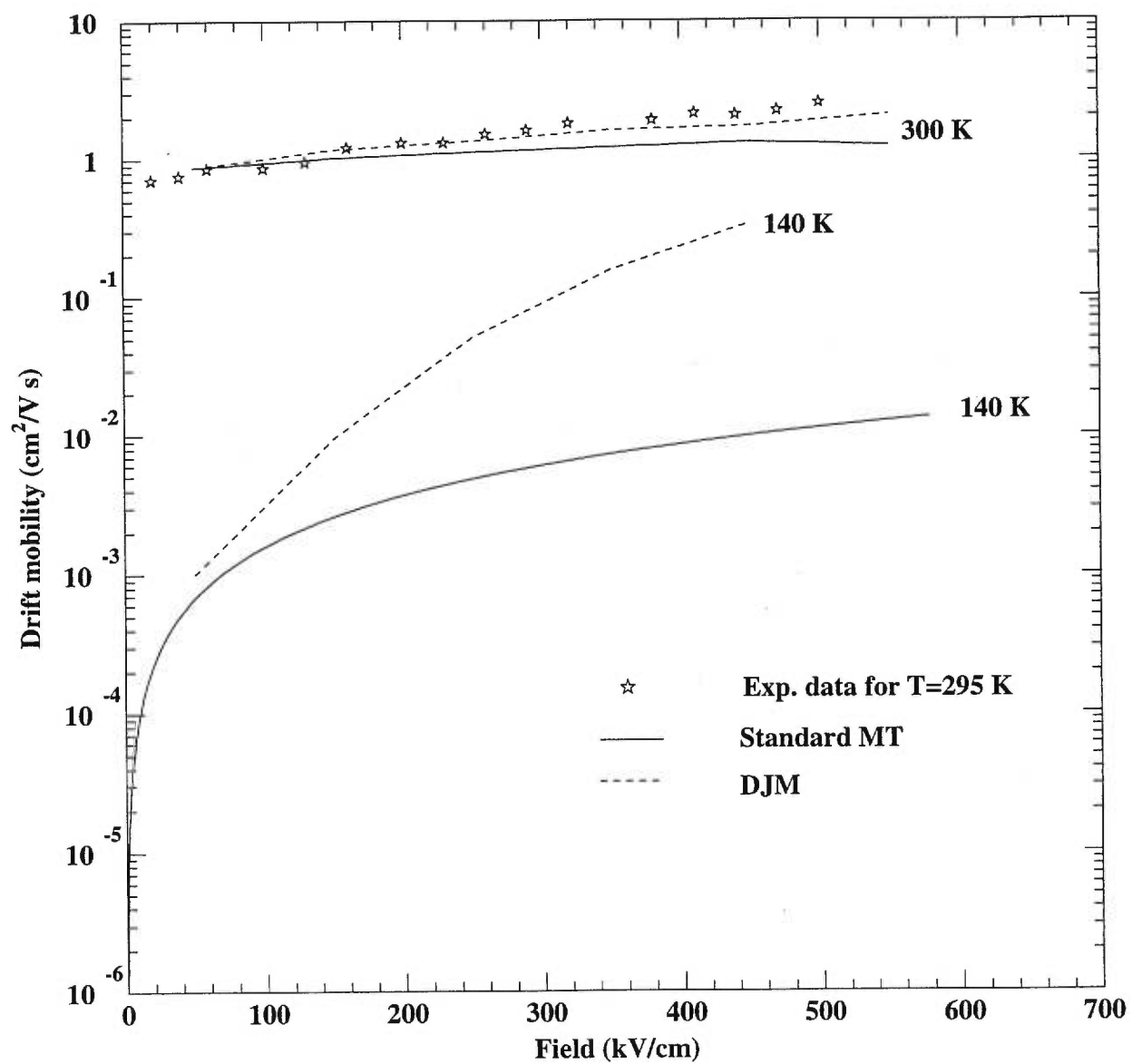


Fig. 11.

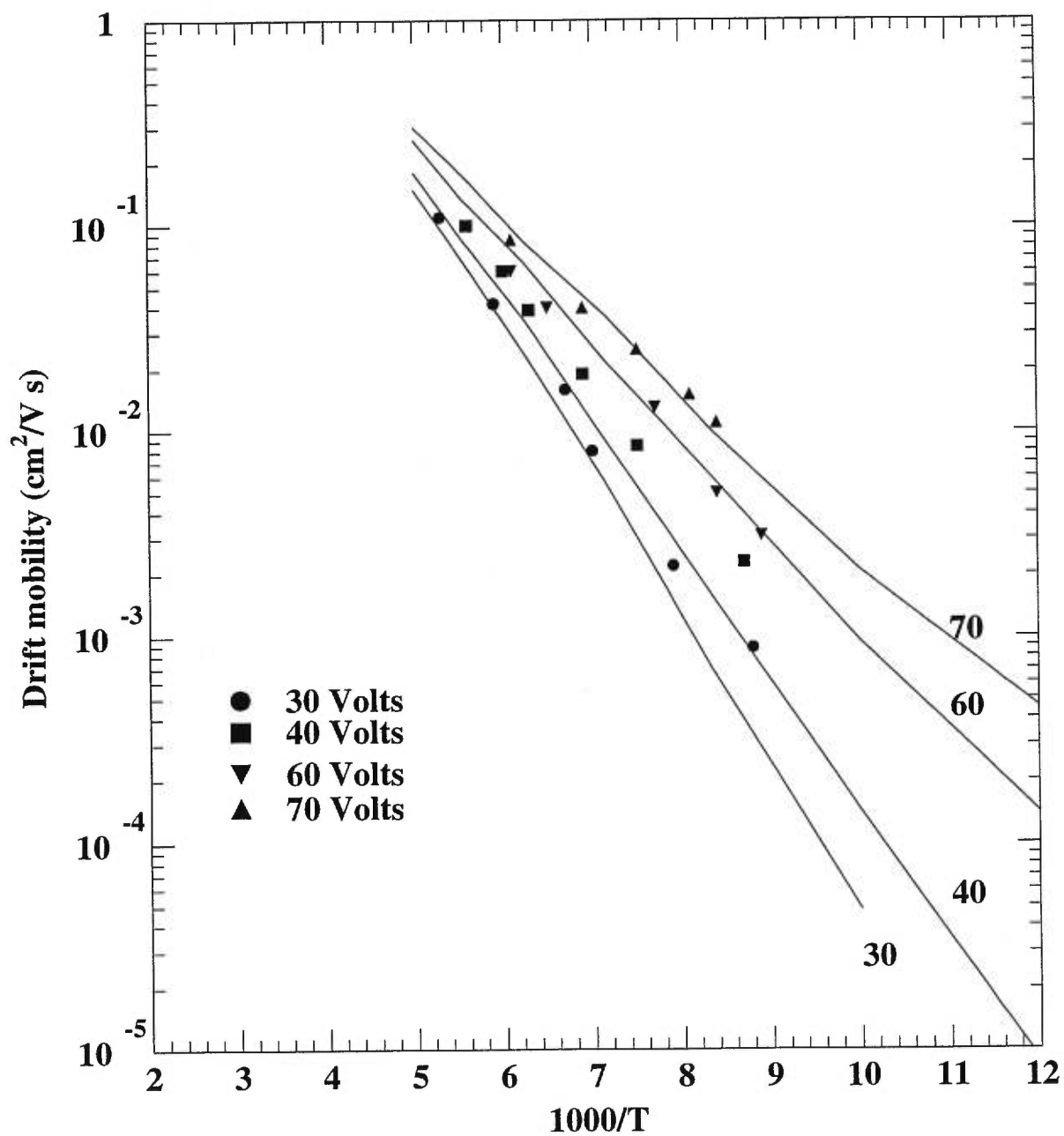


Fig. 12.



## 4.2 Résultat complémentaire

Dans cette section, nous donnons quelques résultats complémentaires à l'article V. Nous calculons par simulations Monte Carlo le courant induit et les paramètres de dispersion  $\alpha_1$  et  $\alpha_2$  à partir du courant induit. Nous montrons, en détail, que le modèle de Esipov [8] (modèle ETM dans l'article V) ne donne pas de résultats physiquement raisonnables.

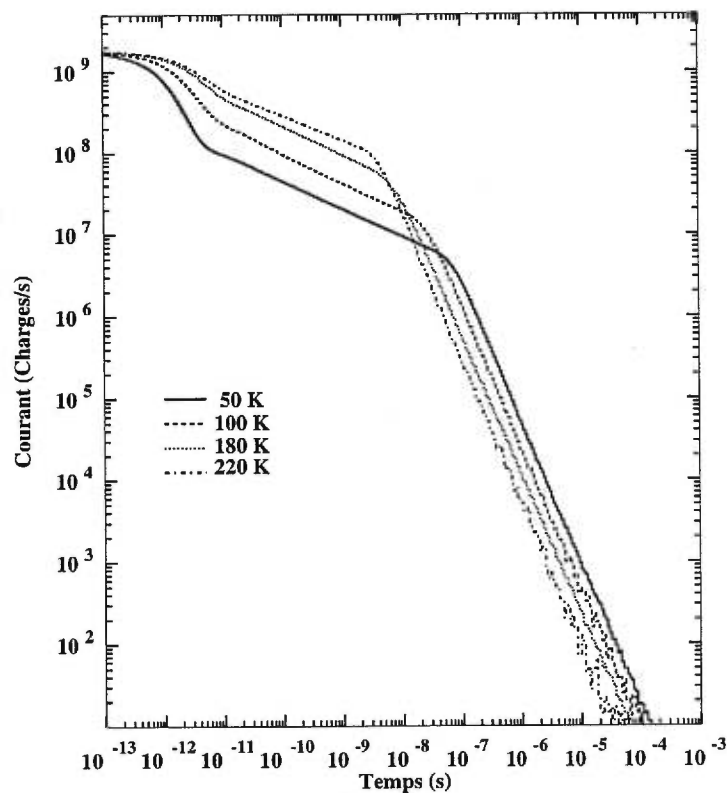


Figure 13. Courant induit simulé pour le modèle ETM à  $T = 50$  K (ligne pleine),  $T = 100$  K (ligne avec traits tirés),  $T = 180$  K (ligne pointillée) et  $T = 220$  K (ligne avec traits tirés et pointillés) avec  $a = 8 \text{ \AA}$ ,  $F = 450 \text{ kV/cm}$ , et  $L = 10 \text{ }\mu\text{m}$ .

À la figure 13, nous montrons le courant induit en échelle  $\log(I(t))$  vs  $\log(t)$  par simulation Monte Carlo. On voit que la pente, avant et après  $t_T$ , augmente avec  $T$  pour  $50 \text{ K} < T < 100 \text{ K}$  et diminue pour  $T > 100$ . Ceci devient plus

clair à la figure 14 lorsque les paramètres de dispersion  $\alpha_1$  et  $\alpha_2$  sont tracés en fonction de la température pour différents champs électriques tel qu'indiqué dans la légende. Dans la même figure, nous montrons les calculs analytiques de Esipov, avec approximations, du paramètre de dispersion  $\alpha_1 = \alpha_2 = eaF/2kT_0$  pour  $\beta = 2kT/eaF < 1$  ( $\beta = 1$  représente la transition entre le transport dominé par le champ et la température et est indiqué par la fin de la ligne horizontale à droite dans la figure 14). Le résultat est comparable aux calculs Monte Carlo jusqu'à un champ électrique de  $F = 400$  kV/cm. Le minimum mentionné dans l'article V devient clairement identifiable à  $F > 400$  kV/cm et le résultat du Monte Carlo dévie systématiquement de l'approximation. Dans ce cas, nos calculs Monte Carlo améliorent les calculs analytiques avec approximations et montrent que ce modèle ne donne pas de résultats intuitivement corrects à cause des minimums dans la température effective et les paramètres de dispersion. Il est clair que la température effective ne peut pas diminuer lorsque la température ou le champ augmente.

### 4.3 Conclusion

Ce chapitre a été dédié aux études du transport à hauts champs. Il y est clairement démontré que le modèle de transport standard ne pouvait pas reproduire les observations expérimentales en présence de hauts champs. Il devient également clair que le modèle de Esipov n'est pas physiquement raisonnable à cause du fait que le bilan détaillé a été considéré séparément dans les deux processus et que la température effective ne peut pas être correctement définie. Nous avons alors proposé un modèle simple de piégeage multiple en incluant le dépiégeage assisté par le champ. Ce modèle permet de reproduire les données expérimentales de la mobilité de dérive,  $\mu_d(F, T)$ , des électrons et  $\mu_d$  calculée à  $t = 30$  ns avec une seule valeur du paramètre de localisation,  $a = 8$  Å. Ce modèle permet aussi de décrire les données expérimentales des paramètres de dispersion

$\alpha$  pour les trous avec  $a = 10 \text{ \AA}$ . Cependant, notre modèle ne peut pas reproduire quantitativement les données expérimentales des  $\alpha$  pour les électrons. Pour remédier à ce problème, nous proposons des modifications dans l'article V qui pourraient permettre en principe de bien reproduire les  $\alpha$  pour les électrons.

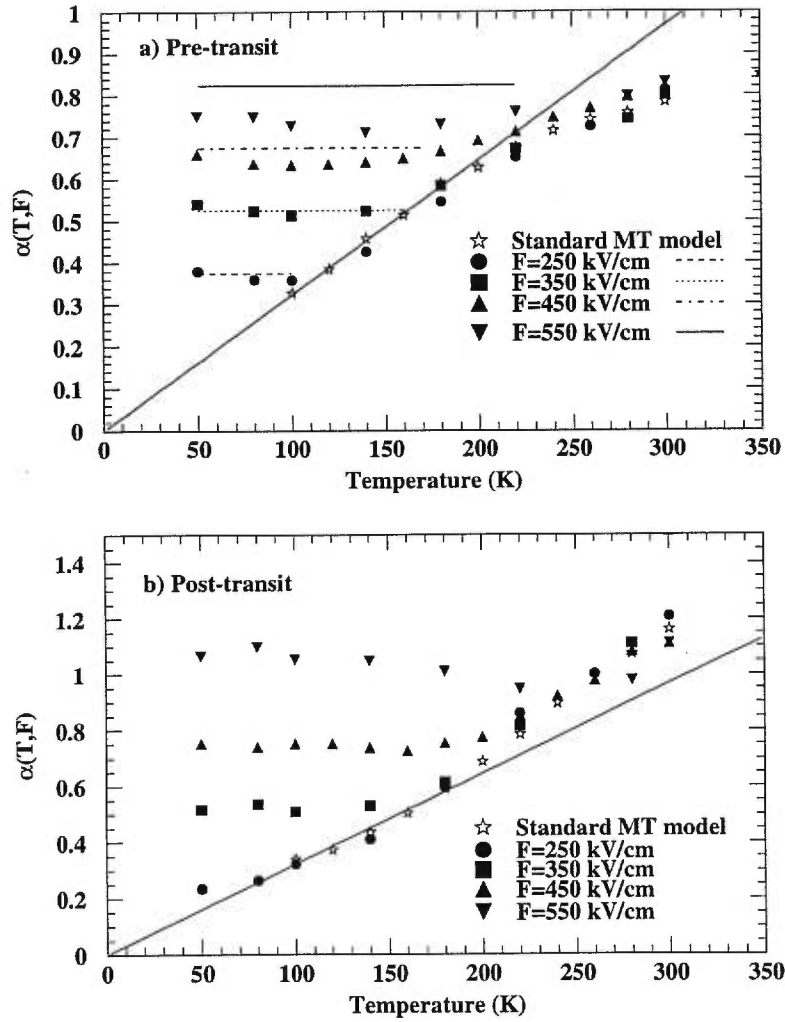


Figure 14. Paramètres de dispersion en fonction de la température et du champ électrique calculés avec le modèle proposé par Esipov [8] (modèle ETM dans l'article V) pour  $a = 8 \text{ \AA}$  (a) avant le temps de transit ( $\alpha_1$ ) et (b) après le temps de transit ( $\alpha_2$ ) pour différents champs électriques tel qu'indiqué dans la légende. Les droites pleines représentent  $\alpha = T/T_0$ ; les lignes horizontales sont calculées avec  $\alpha = eaF/2KT$  avec les paramètres mentionnés ci-haut.

## Chapitre 5

### Relaxation rapide dans les pièges

Nous présentons ici l'idée de la relaxation rapide des porteurs dans les pièges et analysons ses conséquences sur l'interprétation des mesures de la mobilité de dérive. Par relaxation rapide, nous voulons dire que les porteurs relaxent dans la queue de bande lorsque piégés. Plus précisément, lorsqu'un porteur occupe un site avec une énergie initiale  $E_0$ , il relaxe ensuite vers les énergies plus profondes,  $E(t)$ , due à l'interaction du porteur avec son environnement (self-trapping). Ce modèle est dynamique car l'énergie des sites change en fonction du temps. Cette dynamique est cachée dans le taux d'émission des porteurs  $k_r(t)$ . Intuitivement, le porteur ne peut pas relaxer indéfiniment vers des états de plus en plus profonds. Il est alors raisonnable d'imposer une énergie de coupure à l'énergie correspondant à l'énergie du polaron stabilisé. Il est à noter qu'une première évidence de la relaxation rapide dans les pièges a été observée expérimentalement par Crandall et Lips [43]. L'idée de la relaxation dans les pièges est très récente et est présentée pour la première fois ici, afin d'analyser son impact sur les mesures de la mobilité de dérive. Ces analyses permettent de conclure que notre modèle explique l'absence de recombinaison geminée à la température de la pièce et est consistant, à la fois, avec les expériences TOF et PL.

#### 5.1 Article VI: Rapid relaxation and electronic properties of a-Si:H

À paraître.

# Rapid relaxation and electronic properties of a-Si:H

Wen Chao Chen<sup>a</sup>, Mathieu Kemp<sup>b,c</sup>, Louis-André Hamel<sup>a</sup>, Arthur Yelon<sup>b</sup>

<sup>a</sup> *Groupe de recherche en physique et technologie des couches minces (GCM), Département de Physique, Université de Montréal C.P. 6128, Succursale centre-ville, Montréal, Québec H3C 3J7, Canada*

<sup>b</sup> *Groupe de recherche en physique et technologie des couches minces (GCM), Département de Génie Physique, École Polytechnique de Montréal C.P. 6079, Succursale centre-ville, Montréal, Québec H3C 3A7, Canada*

<sup>c</sup> *Zoology Department, Duke University, Durham, NC 27708-0325, USA*

We analyze the impact of trapped carrier relaxation on the determination of the microscopic electronic mobility of a-Si:H. The calculations show that, if there is relaxation, the mobility is substantially higher than that predicted by the standard multiple trapping picture. This model therefore explains the absence of room temperature geminate recombination in a-Si:H, and is consistent with both TOF and PL experiments. That is, we may understand three experimental results which have long appeared to be contradictory, in the framework of a single, simple model.

## I. INTRODUCTION

In the history of the investigation of the electronic properties of amorphous hydrogenated silicon (a-Si:H), many experimental results have been satisfactorily interpreted in terms of relatively simple models. Unfortunately, close examination often shows that models for different observations are in contradiction with each other. Among the many interesting phenomena which have been extensively investigated for a-Si:H are photoluminescence (PL), produced by geminate recombination (GR) of carriers at low temperature, the lack of PL or lack of GR at room temperature, and electronic transport of electrons and holes, particularly as studied by time-of-flight (TOF) measurements.

Investigations of PL [1–9] have shown that the lifetime distribution is broad, the energy spectrum is wide, and the peak position red shifts logarithmically with time after the end of the pump pulse. These observations have been explained with the hypothesis of substantial carrier diffusion, and quantified in the energy loss hopping (ELH) model of Shklovskii and co-workers [10,11]. Under this interpretation, the carriers are trapped in localized states, and hop from state to state. At low temperature, only hops into states of lower energy are allowed. As hopping proceeds, the probability for further hopping decreases, until it is smaller than the probability of radiative recombination, which then takes place.

The ELH model yields the qualitative observations described above. However, the quantitative agreement is not good. Stachowitz et al. [6,7] have shown that the predicted lifetime broadening is many orders of magnitude larger than observed. Kemp [12] has pointed out that if ELH is modified to yield a relatively narrow distribution of lifetimes, it no longer yields a red shift, since there is then very little diffusion. In order to resolve this discrepancy, he proposed that the trapped carriers relax to lower energy, and showed that a logarithmic relaxation rate yielded results in quantitative agreement with experiment. While he offered this form as an ansatz, Kemp and Burin [13] have shown that this is roughly the form one expects if the relaxation is due to the effect of a fluctuating potential, produced by a random distribution of dipoles.

In order to study carrier transport in a-Si:H, Hamel and Chen [14] developed a Monte Carlo (MC) algorithm for simulating the behavior of carriers in the presence of an exponential density of trapping states, and showed that it yielded the same result as the analytical calculation [15] for the situation for which the comparison is possible. We have used this algorithm to model TOF experiments [16], and have found that it yields very good agreement with experiment [17–19] with a reasonable choice of parameters. We have shown [20] that this agreement is further improved when Meyer-Neldel rule is included in the model, and that good agreement

with high field experiments [19,21–25] is obtained when a simple, physically plausible model for field assisted detrapping is included in the algorithm [26]. In all of this work, we found that we required a value of the band mobility of holes near  $\mu_0 = 0.5 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ , in agreement with earlier work, but that we required a value of about  $\mu_0 = 4 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$  for electrons, considerably lower than the values of  $10 - 13 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$  reported earlier.

A number of years ago, Silver and co-workers [27–29] showed that values of  $\mu_0$  of the order of  $10 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$  are incompatible with the observed absence of GR at room temperature, since the photogenerated pair will never break [29,30]. (The situation is, of course, worse with  $\mu_0 = 4 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ ). While these authors' proposal that space charge limited current measurements indicated much higher mobilities has been generally rejected, the contradiction has never been resolved [30]. In order to attempt to resolve it, and in agreement with experiment on capacitance transients [31] and with the theoretical model for PL [12,13] we have incorporated rapid energy relaxation into our TOF simulation. We shall show that the result is indistinguishable from our earlier result [16], when an appropriate (larger) choice of  $\mu_0$  is made. This means that we cannot prove or disprove the existence of relaxation on the basis of TOF alone. However, it also means that experimental TOF results are compatible with the existence of such relaxation.

## II. TIME-OF-FLIGHT MODEL WITH RELAXATION

Consider a carrier initially trapped at an energy  $E_0$ . On physical grounds [12,13,31,32], we expect the energy of the state to be (i) constant before a reaction time  $t_R$  on the order of a vibrational period, (ii) time-dependent between  $t_R$  and  $t_G$ , where  $t_G$  corresponds to complete relaxation, and (iii) constant for times longer than  $t_G$ , and equal to a fully stabilized polaron binding energy. We assume that

$$E(t) = \begin{cases} E_0 & t < t_R \\ E_0 + \Delta_0 \ln(t/t_R) & t_R < t < t_G \\ E_0 + \Delta_0 \ln(t_G/t_R) & t > t_G \end{cases} \quad (1)$$

Here,  $t$  represents the time the state has been occupied. We assume for simplicity that the prefactor  $\Delta_0$  is positive and independent of the initial trapping energy and temperature. We note that the time necessary to achieve complete relaxation,  $t_G$ , is probably temperature dependent (very slow at low temperature and much shorter at higher  $T$ ). For simplicity, we assume that our calculations are performed in a range of temperatures where  $t_G$  is constant.

The physical relevance of the third case in Eq. (1), which was not included in the model for PL, can be seen as follows. Without it, the carrier energy would decrease without bounds. This would make the drift mobility drop to zero quickly, and would change the pre- and post-transit dispersion parameters  $\alpha_1$  and  $\alpha_2$ . The point of Eq. (1) is not that we claim that relaxation must be exactly as described there. We may treat Eq. (1) as an ansatz, as Kemp [12] has done. However, we believe that, if the relaxation effect indeed takes place, the correct description cannot be very different from Eq. (1), and the effects on TOF cannot be very different from those described below.

Intuitively, the impact of this model on the interpretation of the TOF data can be understood as follows. Consider a TOF experiment where the transit time is measured. Using the multiple trapping (MT) model, we derive from the transit time a value for the microscopic mobility called  $\mu_{MT}$ . Let us now take the same experiment, but this time reinterpret it assuming carrier relaxation. After it is trapped, the carrier's energy decreases and consequently, the release time increases. If we assume that the microscopic mobility is  $\mu_{MT}$ , as in the absence of relaxation, we reach a contradiction because the transit time between electrodes will be larger than the measured value. In order to reproduce the experimental transit time, the microscopic mobility must therefore be larger than  $\mu_{MT}$ .

We now formulate the rate equations in the presence of relaxation. The probability that a trapped carrier is released between times  $t$  and  $t + dt$  is given by:

$$P(t) = k_r(t) \exp\left(-\int_0^t k_r(t') dt'\right), \quad (2)$$

where  $k_r(t)$  is the time-dependent release rate:

$$k_r(t) = \nu_0 \exp(-E_0/kT) \begin{cases} 1 & t < t_R \\ (t/t_R)^{-\Delta_0/kT} & t_R < t < t_G \\ (t_G/t_R)^{-\Delta_0/kT} & t > t_G \end{cases} \quad (3)$$

Here  $\nu_0$  is the attempt-to-escape frequency [33]. Compared with the standard MT model, the release rate  $k_r(t)$  is not constant. The capture rate however is unchanged.

This model does not have an analytic solution, due to the time-dependent nature of the rate in Eq. (3). We solve it instead by Monte Carlo methods. We modify our previous MC simulation program to account for Eq. (3). A detailed description of the algorithm can be found in Ref. [16] and references therein. The simulation parameters we use are the same as those used in Ref. [16], except for  $t_R$  and  $t_G$  which we have taken as  $t_R = 10^{-11}$  s from Ref. [12] and  $t_G = 10^{-9}$  s. This implies that the entire trap distribution shifts downward by an energy up to  $\Delta_0 \ln(100)$ . However, as we shall see, most carriers are re-emitted long before  $t_G$ . A newly trapped, or re-trapped carrier begins relaxing after spending  $t_R$  in the trap. The only parameters which we have varied are  $\Delta_0$  and  $\mu_0$ . We adjust  $\mu_0$  until the simulation reproduces the drift mobility data.

### III. RESULTS

Fig. 1 shows the calculated transient current for different values of  $\Delta_0$ , at  $T = 160$ K and  $T = 260$ K. At early times,  $t < t_R$ , the transient current is unaffected by relaxation. For times  $t > t_R$ , relaxation begins, signalled by a faster current decrease compared to the unrelaxed case. We note that even a small amount of relaxation is enough to produce substantial changes in the shape of the current transient and in the value of the transit time,  $t_T$ . We note however that, for  $t_G < t_T$ , relaxation does not affect the values of the dispersion parameters. That is, the slope of the straight line portions of Fig. 1,  $\alpha_1$ , before the transit time  $t_T$ , and  $\alpha_2$  after  $t_T$ , are independent of  $\Delta_0$ . The choice of  $t_G = 10^{-9}$  s is reasonable because it allows at least two time decades of constant  $\alpha_1$ , which is normally observed experimentally.

Fig. 2 shows the calculated room temperature drift mobility as a function of the microscopic mobility  $\mu_0$  for different values of  $\Delta_0$ . For comparison, we also show the experimental drift mobility  $\mu_d \sim 1 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$  [17,18]. We define the drift mobility as

$$\mu_d = L^2/t_T V \quad (4)$$

where  $L$  is the sample thickness,  $V$  is the bias voltage, and  $t_T$  is the transit time. We find the transit time from the current transient by finding the intercept of the pre- and post-transit lines (log-log scale), which is the usual experimental definition. The figure shows that  $\mu_0$  increases with increasing  $\Delta_0$ . This is expected because the transit time  $t_T$  increases with increasing relaxation. For a given values of  $\Delta_0$ , the intersect of the curve  $\mu_d(\mu_0)$  with the line  $\mu_d = 1 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$  gives the microscopic mobility. The figure shows that the microscopic mobility predicted by the model is 5 to 15 times larger than the  $4 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$  predicted by MT, depending on the stabilization energy. We also note that the present model yields the same activation energy as in the standard MT model [16] and is consistent with the experimental activation energy [18,34].



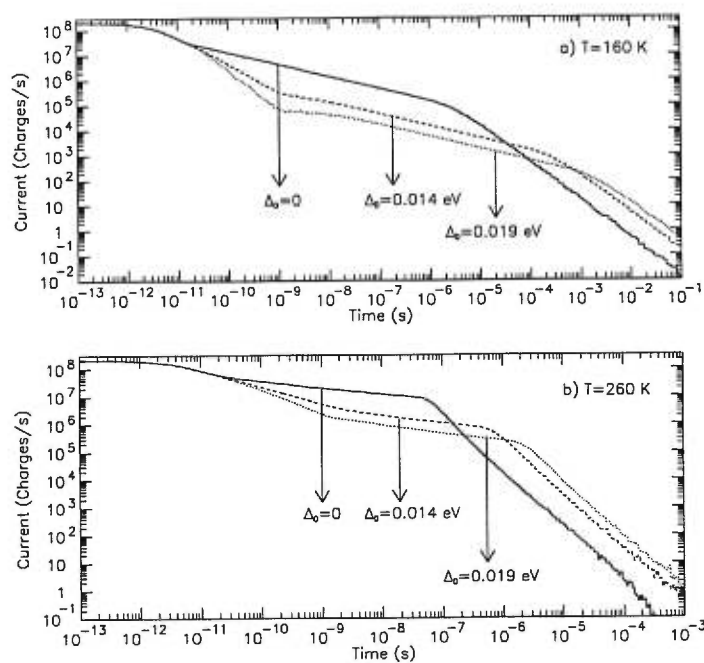


FIG. 1. Comparison of simulated transient currents for standard MT ( $\Delta_0 = 0$ ) and standard MT including relaxation ( $\Delta_0 \neq 0$ ) for TOF experiments at different temperatures. We use  $L = 3.8 \mu\text{m}$ ,  $V = 7.6 \text{ V}$ ,  $\nu_0 = 10^{11} \text{ s}^{-1}$  and  $\mu_0 = 4 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ .

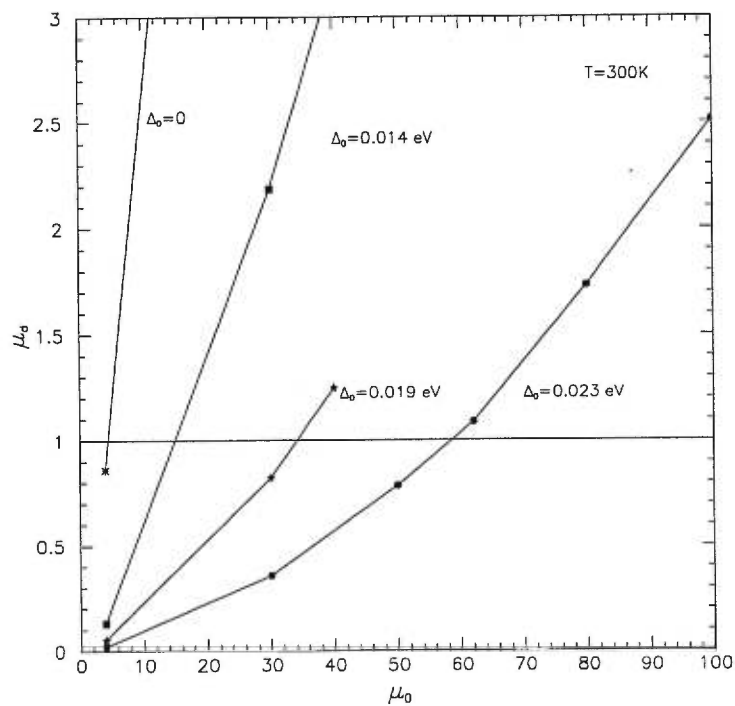


FIG. 2. Simulated drift mobility,  $\mu_d$ , as function of  $\mu_0$  for different values of  $\Delta_0$  at  $T = 300\text{K}$ . The horizontal line is the value of the experimental drift mobility at room temperature [17,18].

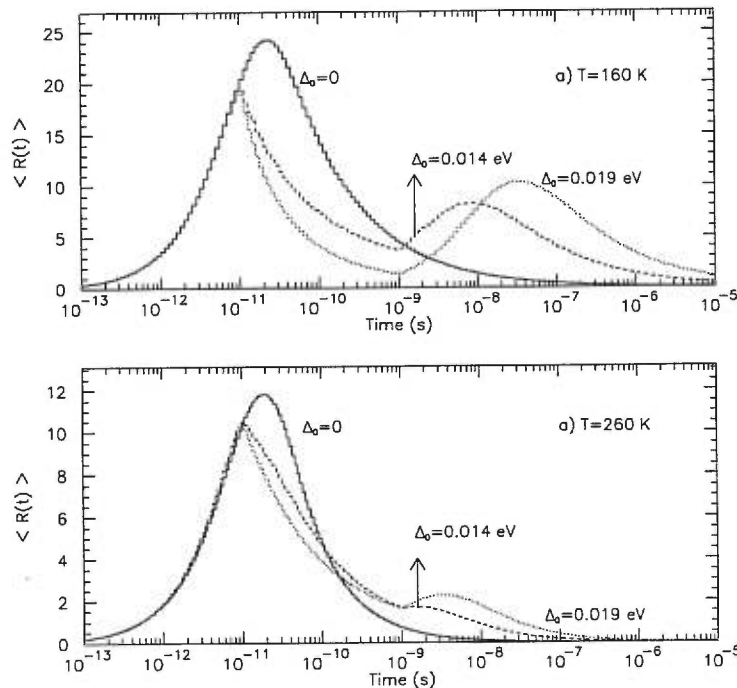


FIG. 3. Comparison of the averaged release time distribution  $\langle R(t) \rangle$  for standard MT ( $\Delta_0 = 0$ ) and MT including relaxation of trapped carrier ( $\Delta_0 \neq 0$ ).

Fig. 3 shows the calculated release time distribution  $\langle R(t) \rangle$ , for various values of  $\Delta_0$ , at  $T = 160\text{K}$  and  $T = 260\text{K}$ .  $\langle R(t) \rangle$  is obtained by counting the number of carriers with an occupation time  $t$ , averaged over all injected carriers. In the absence of energy relaxation, the carriers are initially quickly trapped and released. Thermalization then sets in, leading to a pronounced peak at  $t = 2 \times 10^{-11}\text{s}$ , independent of temperature. Energy relaxation introduces a second peak at longer times, whose height increases with increasing  $\Delta_0$ , and whose position is temperature dependent. The second peak arises because energy relaxation lowers the state energy, which consequently increases the thermal reemission time.

#### IV. CONCLUSION

We have shown that energy relaxation of trapped carriers is consistent with TOF data. We have used a model of uniform logarithmic relaxation down to a cutoff. A similar model with another functional form and a cutoff would probably give similar results. The important finding is that the presence of relaxation requires a larger microscopic mobility than the usual MT model. The difference could be as much as an order of magnitude.

We have also shown that TOF predictions from MT with and without relaxation are indistinguishable. It is then not possible to choose between them on this basis only. However, the experimental results of Crandall and Lips [31] suggest that it does take place. If it does, then TOF results are then compatible with the results of PL experiments [12] and with the absence of GR at room temperature. Establishing this compatibility represents a considerable improvement in the theoretical situation for a-Si:H. Thus we believe that the consideration of the impact of relaxation on other experiments, and of experiments in which it might be observed directly, is of considerable interest.

## ACKNOWLEDGMENTS

We thank R.S. Crandall and H. Branz for valuable discussions.

- [1] R.A. Street, in *Physics of Hydrogenated Amorphous Silicon*, ed. by J.D. Joannopoulos and G. Lucovsky (Springer, New York, 19984), Vol. 2, p. 197.
- [2] R.W. Collins and W. Paul, *Phys. Rev. B* **25**, 2611 (1982).
- [3] B.A. Wilson, A.M. Sergent, K.W. Wecht, A.J. Williams, T.P. Kerwin, C.M. Taylor and J.P. Harbison, *Phys. Rev. B* **30**, 3320 (1984).
- [4] T.M. Searle, M. Hopkinson, M. Edmeades, S. Kalem, I.G. Austin, and R.A. Gibson, in *Disordered Semiconductors*, edited by M.A. Kastner, G.A. Thomas, S.R. Ovshinsky, (Plenum, New York, 1987) p. 357.
- [5] S. Ambros, R. Carius and H. Wagner, *J. Non-Cryst. Sol.* **137-138**, 555 (1991).
- [6] M. Bort, W. Fuhs, S. Liedtke and R. Stachowitz, *Phil. Mag. Lett.* **64**, 227 (1991).
- [7] R. Stachowitz, M. Schubert and W. Fuhs, *J. Non-Cryst. Sol.* **164-166**, 583 (1993).
- [8] H. Oheda, *Phys. Rev. B* **52**, 16530 (1995).
- [9] X. Yin, M.E. Raikh and P.C. Taylor, in *Amorphous Silicon Technology - 1995*, ed. by M. Hack, E.A. Schiff, A. Madan, M. Powell and A. Matsuda (Materials Research Society, Pittsburgh, 1995) p.167.
- [10] B.I. Shklovskii, H. Fritzsche and S.D. Baranovskii, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2989 (1989).
- [11] E.I. Levin, S. Marianer and B.I. Shklovskii, *Phys. Rev. B* **45**, 5906 (1992).
- [12] M. Kemp, in *Amorphous Silicon Technology - 1995*, ed. by M. Hack, E.A. Schiff, A. Madan, M. Powell and A. Matsuda (Materials Research Society, Pittsburgh, 1995) p.157.
- [13] M. Kemp and A.L. Burin, unpublished.
- [14] L.A. Hamel and W.C. Chen, *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **42**, 235 (1995).
- [15] W.C. Chen and L.A. Hamel, *Can. J. Phys.* **73**, 585 (1995).
- [16] W.C. Chen and L.A. Hamel, in *Amorphous Silicon Technology - 1996*, ed. by M. Hack, E.A. Schiff, S. Wagner, R. Schropp and A. Matsuda (Materials Research Society, Pittsburgh, 1996) p.759.
- [17] T. Tiedje, in *Physics of Hydrogenated Amorphous Silicon*, ed. by J. D. Joannopoulos and G. Lucovsky (Springer, New York, 1984), Vol. 2, p. 261.
- [18] T. Tiedje, in *Semiconductors and Semimetals*, ed. by J. Pankove (Academic Press, New York, 1984), Vol. 21C, p.207.
- [19] C.E. Nebel and G.H. Bauer, *Phil. Mag. B* **59**, 463 (1989).
- [20] W.C. Chen, L.A. Hamel and A. Yelon, *J. Non-Cryst. Solids* **220**, 254 (1997).
- [21] C.E. Nebel, R.A. Street, N.M. Johnson and J. Kocka, *Phys. Rev. B* **46**, 6789 (1992).
- [22] J.I. Nakata, S. Nakajima, S. Imao and Y. Inuishi, *Jpn. J. Appl. Phys.* **33**, 5640 (1994).
- [23] Qing Gu, E.A. Schiff, J.B. Chévrier and B. Equer, *Phys. Rev. B* **52**, 5695 (1995).
- [24] G. Juška, K. Arlauskas and J. Kocka, *J. Non-Cryst. Solids*, **189-200** 202 (1996).
- [25] C.E. Nebel and R.A. Street, *Phil. Mag. B* **67**, 407 (1993).
- [26] W.C. Chen, L.A. Hamel and A. Yelon, to be published.
- [27] M. Silver, E. Snow and D. Adler, *Solid State Commun.* **51**, 581 (1984).
- [28] M. Silver, E. Snow and D. Adler, *Solid State Commun.* **54**, 15 (1985).
- [29] M. Silver and D. Adler, in *Optical Effects in Amorphous Semiconductors*, AIP Conf. Proc. No. 120, ed. by P.C. Taylor and G. Bishop (Snowbird, Utah, 1984) p.197.
- [30] E. Schiff, *J. Non-Cryst. Solids* **190**, 1 (1995).
- [31] R.S. Crandall and K. Lips, in *Amorphous Silicon Technology - 1996*, ed. by M. Hack, E.A. Schiff, S. Wagner, R. Schropp and A. Matsuda (Materials Research Society, Pittsburgh, 1996) p.685.
- [32] R.G. Palmer, D.L. Stein, E. Abrahams, P.W. Anderson, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 958 (1984).
- [33] We have not included the Meyer-Neldel effect in this calculation, as we have done in Ref. [20].
- [34] R.S. Crandall, *J. Appl. Phys.* **52**, 1387 (1981).

## Conclusion

Dans cette thèse, nous avons étudié à la fois analytiquement et par simulation Monte Carlo (MC) le transport par piégeage multiple dans une queue de bande exponentielle dans le silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H).

Dans un premier temps, nous avons trouvé une solution analytique générale de la distribution des porteurs libres,  $G(x_0, x, t)$ , qui est valide pour un paramètre de dispersions,  $\alpha$ , entre 0 et 1. Cette quantité fondamentale, en principe, nous permet d'étudier le transport des charges dans les détecteurs de particule et dans les semi-conducteurs amorphes dans le cas où les approximations sont valides. Les autres quantités comme le courant,  $I(x_0, t)$ , et la charge,  $Q(x_0, t)$  sont déduites de  $G(x, x_0, t)$ . Pour le cas  $\alpha = 1/2$ , nous avons trouvé une solution analytique pour le courant et la charge induits qui décrit le transport dans un détecteur de particule opéré à la température de la pièce. Nous avons ensuite prouvé que les calculs MC confirment que les calculs analytiques sont corrects pour le cas particulier où  $\alpha = 1/2$  pour les temps  $t > 1/\nu_0$ . De plus, nous avons aussi démontré que les calculs reproduisent la forme des signaux générés par le passage d'une particule chargée dans un détecteur p-i-n au a-Si:H pour différentes tensions appliquées. Ces travaux constituent une amélioration importante du modèle précédent [30] pour la modélisation des détecteurs de particule au a-Si:H.

Nous avons ensuite montré que le modèle standard par piégeage multiple ne peut pas reproduire les paramètres de dispersion  $\alpha_1$  et  $\alpha_2$ , respectivement avant et après le temps de transit, à basse température, ni  $\alpha_2$  à haute température. Par contre, ce modèle a permis de reproduire les données de mobilité de dérive et a également permis d'extraire les paramètres du matériaux pour les électrons et les

trous. Nous avons alors introduit l'effet Meyer-Neldel dans le modèle standard par piégeage multiple pour réconcilier les simulations avec les données expérimentales sur les  $\alpha$ . Les calculs ont démontré clairement que l'effet Meyer-Neldel est capable, non seulement de reproduire les paramètres de dispersion  $\alpha_1$  et  $\alpha_2$ , mais aussi de reproduire les mesures de la mobilité de dérive. Dans les cas où il n'y avait pas de données expérimentales, les calculs ont permis de prédire les valeurs des  $\alpha_2$ . Nous suggérons que des mesures de  $\alpha_2$  entre 100 K et 300 K permettraient de confirmer les prédictions de l'effet Meyer-Neldel dans cette région de température.

Notre modèle de dépiégeage assisté par le champ (DJM) est capable de reproduire quantitativement les données expérimentales de mobilité de dérive pour les électrons avec un seul nouveau paramètre ajustable  $a$ , où  $a$  est la longueur de localisation, que nous avons trouvé égal à  $a \approx 8 \text{ \AA}$ . Le modèle ne peut cependant pas reproduire quantitativement la dépendance en température et en champ des  $\alpha$  comme dans le cas à bas champ pour les électrons. Pour les trous, notre modèle prédit correctement le comportement des  $\alpha$  en fonction du champ électrique avec  $a = 12 \text{ \AA}$ . Pour la poursuite de ce travail, nous avons déjà proposé dans la conclusion de l'article V qu'il serait possible d'améliorer l'accord avec les données sur les paramètres de dispersion  $\alpha$  pour les électrons en incluant les effets de Meyer-Neldel et de relaxation des porteurs dans les pièges. Dans DJM, nous avons négligé les autres processus. Il est possible de les inclure dans la simulation MC pour voir s'ils sont vraiment négligeables. Par exemple, l'équation 9 de l'article V peut être intégré par méthode Monte Carlo pour inclure tous les processus de dépiégeages.

Récemment, nous avons montré qu'il est possible d'extraire la longueur de localisation des électrons à partir du concept de la température effective  $T_{eff}$  indépendamment d'un modèle exact pour  $T_{eff}$  [44]. Les résultats sont consistants avec ceux obtenus par simulations MC avec DJM. Cependant, pour tirer une conclusion plus ferme sur la longueur de localisation, il nous faudrait plus

de données expérimentales dans plusieurs régions: 1) à haute température et à bas champ où la température effective est essentiellement égale à  $T$ , 2) à basse température et à très haut champ où le champ domine la température effective, ainsi que 3) dans les régions intermédiaire où la température et le champ électrique contribuent à la température effective. La poursuite de ce travail devrait permettre de déterminer la longueur de localisation des électrons et des trous dans le a-Si:H.

La simulation MC incluant la relaxation rapide dans les pièges a permis de conclure que la mobilité microscopique peut être de 5 à 15 fois plus grande que la valeur de  $4 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$  habituellement acceptée; la valeur exacte de  $\mu_0$  dépend de l'énergie de relaxation ( $\Delta_0$ ). Ceci permet de justifier l'absence de recombinaison geminée dans les expériences de PL à la température de la pièce. Ce modèle s'avère donc consistant, à la fois, avec les expériences de photoluminescence et celle de temps de vol, ce qui constitue une première. Mais afin de tester plus à fond ce modèle, il serait important de réaliser des simulations de photoluminescence à température finie pour les comparer aux données expérimentales. Ceci permettrait de contraindre les valeurs de  $\Delta_0$  et  $\mu_0$ .

Il faut également noter qu'il serait très intéressant de comparer les simulations MC de la charge induite à des temps très courts (de l'ordre  $1/\nu_0$ ) aux données expérimentales [45], à nouveau pour contraindre les valeurs de  $\mu_0$  et  $\nu_0$ .

## Bibliographie

- [1] J.M. Marshall, Rep. Prog. Phys. **46**, 1235 (1983).
- [2] H. Overhof et P. Thomas, Electronic transport in hydrogenated amorphous semiconductors (Springer tracts in modern physics, Vol 114, Berlin Heidelberg 1989).
- [3] R.A. Street, Hydrogenated amorphous silicon (Cambridge University press, 1991).
- [4] N.F. Mott et E.A. Davis, Electronic Processes in Non-crystalline Materials, Oxford University Press (1976).
- [5] W.E. Spear, dans: Advances in Disordered Semiconductors, Vol 1, édité par H. Fritzsche (World Scientific, Singapore, 1989) p.271.
- [6] I. Fujieda, G. Cho, S.N. Kaplan, V. Perez-Mendez, S. Qureshi, et R.A. Street, J. Non-Cryst. Solids **115**, 174 (1989).
- [7] H. Michiel, G.J. Adriaenssens et E.A. Davis, Phy. Rev. B **34**, 2486 (1986).
- [8] S.E. Esipov, Phys. Rev. B, **44**, 7930 (1991).
- [9] Qing Gu, E.A Schiff, J.B. Chévrier and B. Equer, Phys. Rev. B **52**, 5695 (1995).
- [10] W.E. Spear, J. Non-Cryst. Solids **1**, 197 (1968).
- [11] T. Tiedje, dans Semiconductors and Semimetals, Éditeur: J.I. Pankove (Academic Press Inc., New York, 1984), Vol 21C, pp.207-237.

- [12] T. Tiedje, J.M. Cebalca, D.L. Morel et B. Abeles, *Phys. Rev. Lett.* **46** , 1425 (1981).
- [13] J. Orenstein et M. Kastner, *Phys. Rev. Lett.* **46**, 21, 1421 (1981).
- [14] J.M. Marshall, R.A. Street et M.J. Thompson, *Phil. Mag.* **54**, 51 (1986).
- [15] K. Winer, I. Hirabayashi et L. Ley, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 2697 (1988).
- [16] S. Aljishi, J.D. Cohen, S. Jin et L. Ley, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 2811 (1990).
- [17] J. Dong et D.A. Drabold, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 1928 (1998).
- [18] M. Grünwald et B. Movaghar, *J. Phys.: Condens. Matter* **1**, 2521 (1989).
- [19] F.W. Schmidlin, *Phys. Rev.* **B16**, 2362 (1977).
- [20] F.W. Schmidlin, *Phil. Mag.* **41**, 535 (1980).
- [21] J. Noolandi, *Phys. Rev.* **B16**, 4466 (1977).
- [22] W.E. Tefft, *J. Appl. Phys.* **38**, 5265 (1967).
- [23] J. Noolandi, *Phys. Rev.* **B16**, 4466 (1977).
- [24] M. Silver, G Schoenherr et Baessler, *Phys. Rev. Lett.* **48**, 352 (1982).
- [25] A.I. Rudenko et V.I. Arkhipov, *Phil. Mag.* **45**, 209 (1982).
- [26] T. Tiedje et A. Rose, *Solid State Commun.* **37**, 49 (1980).
- [27] A. Rose, *R.C.A Rev.* **12**, 362 (1951).
- [28] M.H. Kalos et P.A. Whitlock, *Monte Carlo Methods Volume I*, (John Wiley & Sons, Inc., News York, 1986).
- [29] F. James, *Comp. Phys. Commun.* **79**, 111 (1994).
- [30] T. Pochet, Thèse de Ph.D., Département de physique, Université de Montréal (1991).



- [31] J. Dubeau, Thèse de Ph.D., Département de physique, Université de Montréal (1993).
- [32] H. Antoniadis et E.A. Schiff, *Phys. Rev. B* **46**, 9482 (1992).
- [33] B. Yan et G. Adriaenssens, *J. Appl. Phys.* **77**, 5661 (1995).
- [34] R.I. Devlen, J. Tauc et E.A. Schiff, *J. Non-Cryst.* **114**, 567 (1989).
- [35] G. Juška, J. Kočka, K. Arlauskas, et G. Jukonis, *Solids state commun.* **75**, 531 (1990).
- [36] H. Antoniadis and E.A. Schiff, *Phys. Rev B* **43**, 13957 (1991).
- [37] K. Murayama, H. Oheda, S. Yamasaki and A. Matsuda, *Solids State Comm.* **81**, 887 (1992).
- [38] Qing Gu, E.A. Schiff, J.-B. Chevrier et B. Equer, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* Vol. **297**, 425 (1993).
- [39] J.I. Nakata, S. Nakajima, S. Imao, and Y. Inuishi, *Jpn. J. Appl. Phys.* **33**, 5640 (1994).
- [40] C.E. Nebel et R.A. Street, *Int. J. of Modern Phys. B* **7**, 1207 (1993).
- [41] G. Juška, K. Arlauskas and J. Kocka, *J. Non-Cryst. Solids*, **189-200** 202 (1996).
- [42] Qing Gu, E.A. Schiff, J.-B. Chevrier, B. Equer, *J. Non-Cryst. Solids* **198-200**, 194 (1996).
- [43] R.S. Crandall and K. Lips, in *Amorphous Silicon Technology - 1996*, ed. by M. Hack, E.A. Schiff, S. Wagner, R. Schropp and A. Matsuda (Materials Research Society, Pittsburgh, 1996) p.685.
- [44] W.C. Chen, L.A. Hamel, M. Kemp, et A. Yelon, dans *Amorphous and Heterogeneous Silicon Thin Films: Fundamentals to Devices -1999*, ed.

par H.M. Branz, R.W. Collins, H. Okamoto, S. Guha, and R. Schropp  
(Materials Research Society, 1999).

- [45] E.A. Schiff, R.I. Devlen, H.T. Grahn et J. Tauc, *Appl. Phys. Lett.* **54**,  
1911 (1989).