

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE



UNIVERSITE MOHAMED SEDDIK BENYAHIA JIJEL

Faculté des sciences et de la technologie

Département d'électronique

N° :...../2022

MEMOIRE DE MASTER

DOMAINE: Sciences et Technologies

FILIERE: Electronique

SPECIALITE: Micro-Electronique

Thème

*Propriétés de conduction dans des films
multicristallins*

**Présenté Par : CHELLOUCHE Asma
ABADA Imane**

Encadré Par : Dr. MERABET Souad

Date de soutenance: 06/07/2022

Jury de Soutenance

Président: Mr. C. ZIGHA

Grade: M. A. A

Univ MSB jijel

Examineur 1: Mlle. D. Z. MEZDOUR

Grade: Professeur

Univ MSB jijel

Examineur 2: Mr. R. REMMOUCHE

Grade: M. C. A

Univ MSB jijel

Encadreur: Mme. S. MERABET

Grade: M. C. A

Univ MSB jijel

Promotion : 2021 /2022

REMERCIEMENTS

Louange à ALLAH qui lui seul nous a guidé dans le bon sens durant notre vie et qui nous a donné la force, la volonté, la patience et le courage pour accomplir ce modeste travail ; Merci de nous avoir éclairé le chemin de la réussite.

La première personne que nous tenons à remercier est notre encadreur Dr. MERABET Souad, pour l'orientation, la confiance, la patience qui ont constitué un apport considérable sans lequel ce travail n'aurait pas pu être mené au bon port. Qu'elle trouve dans ce travail un hommage vivant à sa haute personnalité.

Nous remercions également nos familles pour les sacrifices qu'elles ont faits pour que nous terminions nos études.

Nous remercions, les membres de jury qui ont accepté d'examiner et de juger notre travail.

Nous tenons à remercier tous les enseignants du département d'électronique.

Enfin nous exprimons notre profonde reconnaissance à toutes les personnes qui ont participé de près ou de loin à la réalisation de ce travail.

A tous, un grand merci.

DEDICACES

A ma très chère mère,

*Quoi que je fasse ou que je dise, je ne saurai point te remercier
comme il se doit. Ton affection me couvre, ta bienveillance me
guide et ta présence à mes côtés a toujours été ma source de force
pour affronter les différents obstacles.*

À mon très cher père,

*Tu as toujours été à mes côtés pour me soutenir et m'encourager
que ce travail traduit ma gratitude et mon affection.*

A mes très chers frères Abdallah Nesradin et Toufik.

A mes très chers sœurs Nadia Souad Widad et Sadjia.

À mon fiancé Khaled.

Puisse Dieu vous donner santé, bonheur, courage et surtout réussite.

À mes neveux et mes nièces.

Sans oublier mon binôme Imane qui est ma très chère amie.

À toutes ma famille et mes amies.

À tous ceux que j'aime.

Asma

DEDICACES

Je dédie ce modeste travail

*À la mémoire de **mes parents**, que dieu garde leurs âmes dans son paradis, le phare qui s'est éteint, mais sa flamme est toujours là.*

*À mon cher et adorable frère **Mohammed Walid**.*

*À mes chères tantes chacune de son nom et en particulier mes deux fleurs : **Lyna** et **AMEL**.*

*Sans oublier mon binôme **Asma** qui est ma très chère amie.*

À toutes ma famille et mes amies.

À tous ceux que j'aime.

Imane

Sommaire

LISTE DES ACRONYMES	I
LISTE DES FIGURES.....	III
LISTE DES TABLEAUX.....	V

Table des matières

INTRODUCTION GENERALE	1
------------------------------------	----------

Chapitre I: Etat de l'art sur le silicium

I.1 INTRODUCTION	3
I.2 STRUCTURE DU SILICIUM.....	3
I.3 DIFFERENTES FORMES DU SILICIUM	4
I.3.1 LE SILICIUM MONOCRISTALLIN	4
I.3.2 LE SILICIUM AMORPHE.....	6
I.4 DIFFERENTES GAMMES DU SILICIUM.....	7
I.4.1 LE SILICIUM POLYCRISTALLIN	7
I.4.2 SILICIUM MULTICRISTALLIN	9
I.4.3 LE SILICIUM MICROCRISTALLIN	10
I.4.4 SILICIUM AMORPHE HYDROGENE A SI: H	11
I.4.5 LE ROLE CLE DE L'HYDROGENE DANS LE SILICIUM AMORPHE	11
I.5 TYPES DES DEFAUTS DANS LE SILICIUM.....	13
I.5.1 DEFAUTS SANS DIMENSION (0D) : DEFAUTS PONCTUELS	13
I.5.2 DEFAUTS LINEAIRES (1D) : DISLOCATIONS	14
I.5.3 DEFAUTS SURFACIQUES (2D) : JOINTS DE GRAIN	15
I.5.4 DEFAUT VOLUMIQUE (3D).....	16
I.6 CONCLUSION	16

Chapitre II: Propriétés de transport dans les couches polycristallines

II.1 INTRODUCTION.....	17
II.2 TRANSPORT DES PORTEURS DANS LE SILICIUM POLYCRISTALLIN	17
II.2.1 MODELES DES JOINTS DE GRAINS	17
II.2.1.1 Modèle de ségrégation des dopants.....	18
II.2.1.2 Modèle de piégeage.....	18
II.2.2 PHENOMENES DE TRANSPORT.....	22
II.2.2.1 Phénomène d'émission thermoïonique	22
II.2.2.2 Phénomène d'émission du champ thermoïonique.....	24
II.3 CONCLUSION.....	24

Chapitre III: Résultats et discussions

III.1 INTRODUCTION	25
III.2 LE MODELE	25
III. 3 RESULTATS ET DISCUSSIONS	26
III.3.1 L'EFFET DE LA VARIATION DU TAUX DE DOPAGE (A TAILLE DES GRAINS FIXE)	27
III.3.1.1 Barrière de potentiel.....	27
III.3.1.2 Courant thermo-ionique	29
III.3.1.3 Mobilité effective et conductivité électrique	30
III.3.2 L'EFFET DE LA VARIATION DE LA TAILLE DES GRAINS (A TAUX DE DOPAGE FIXE)	31
III.3.2.1 Barrière de potentiel.....	31
III.3.2.2 Courant thermo-ionique	32
III.3.2.3 Mobilité effective et conductivité électrique	33
III.3.3 CONFRONTATION DES RESULTATS AVEC CEUX PUBLIES DANS LA LITTERATURE	34
III. 4 CONCLUSION	36
CONCLUSION GENERALE	37
LISTE DES REFERENCES	38

Liste des acronymes

A

AFM (Atomic Force Microscope) Microscope à force atomique

B

B_C Bande de conduction.

B_V Bande de Valence.

E

E_g Energie de gab.

E_b Barrière de potentiel énergétique.

H

h Constante de Planck.

K

K Constante de Boltzman.

L

L_G La taille de grain.

M

m^* La masse effective du porteur.

MEB (Scanning Electron Microscopy) Microscope électronique à balayage

N

N Concentration de dopants.

N^* Concentration critique de dopants.

N_T Densité d'états pièges aux joints de grains.

P

P_a La concentration moyenne des porteurs.

PECVD dépôt chimique en phase vapeur assisté par plasma.

Q

q Charge élémentaire.

Q_t Charge aux niveaux des pièges aux joints de grains.

T

T Température.

TFT (Thin Film Transistor) Transistor en couche mince.

U

μ_{eff} Mobilité effective des porteurs.

V

V Potentiel électrostatique.

V_b Hauteur de la barrière de potentiel.

V_a Tension appliquée.

W

w Longueur des porteurs libres.

ϵ_{si} Permittivité du semi-conducteur (silicium).

ϵ_0 Permittivité du vide.

σ Conductivité du polysilicium.

Liste des figures

Figures	Description	Pages
Chapitre I		
Figure.I.1	Représentation d'une structure de silicium.	3
Figure.I.2	Structure de bande du silicium massif cristallin.	4
Figure.I.3	Structure cristallographique et structure de bandes du silicium monocristallin.	5
Figure.I.4	Lingots de silicium monocristallin.	6
Figure.I.5	Le silicium amorphe.	7
Figure.I.6	Structure du silicium polycristallin.	8
Figure.I.7	Structure granulaire (a) et colonnaire (b) du poly silicium.	9
Figure.I.8	Structure de grains dans une plaquette de silicium multicristallin.	9
Figure.I.9	Schématisation de la distribution des défauts dans le silicium microcristallin.	10
Figure.I.10	Image AFM du silicium microcristallin.	10
Figure. I.11	Classification des matériaux de silicium.	11
Figure. I.12	Configuration structurales possible de l'hydrogène dans a Si.	11
Figure.I.13	Exemples de défauts ponctuels simples : (a) lacune, (b) atome en position interstitielle et (c) atome en position substitutionnelle.	14
Figure. I.14	Schématisation du vecteur de Burger pour : (a) dislocation coin et (b) dislocation vis.	15
Figure. I.15	Image MEB des Joints de grains.	15
Chapitre II		
Figure.II.1	Diagramme de bande d'énergie dans le silicium polycristallin.	17
Figure.II.2	Modèle de Seto.	19
Figure.II.3	Mécanismes de transport des porteurs majoritaires à travers une barrière d'énergie E_b .	22
Chapitre III		
Figure.III.1	La barrière de potentiel dépendante du dopage aux joints de grains.	25
Figure. III.2	La hauteur de la barrière de potentiel en fonction de la variation du taux de dopage.	28
Figure.III.3	Valeurs de la hauteur de la barrière de potentiel repérées.	28
Figure.III.4	Représentation du courant thermo- ionique en fonction de la variation du potentiel appliquée.	29
Figure.III.5	Mobilité effective en fonction de la variation du taux de dopage.	30
Figure.III.6	Conductivité électrique en fonction de la variation du taux de dopage.	30
Figure.III.7	Hauteur de la barrière de potentiel en fonction de la variation de la taille des grains.	31

Figure.III.8	Valeurs de la hauteur de la barrière de potentiel repérées.	32
Figure.III.9	Courant thermo-ionique en fonction de la variation du potentiel appliqué, lors de la variation de la taille des grains.	33
Figure.III.10	Mobilité effective en fonction de la variation de la taille des grains.	33
Figure.III.11	Conductivité électrique en fonction de la variation de la taille des grains.	34
Figure. III.12	Mobilité effective en fonction de la concentration de dopage.	34
Figure.III.13	Mobilité effective en fonction de la concentration de dopage.	35
Figure. III.14	Courant thermoionique en fonction de la concentration de dopage.	35

Liste des tableaux

Chapitre III		
Tableaux	Description	Pages
Tableau III.1	Résultats de calculs.	27
Tableau III.2	Résultats obtenus.	29
Tableau III.3	Résultats de calculs.	31
Tableau III.4	Résultats obtenus.	32

Introduction générale

La motivation des recherches à étudier les potentialités des films de silicium vise à leurs applications dans le domaine de l'industrie, comme matériau de base pour la fabrication : des circuits intégrés, des cellules photovoltaïques, des ordinateurs, en technologie des télécommunications, en aéroscopie, au secteur automobile, en médecine, ect...; Ces études se présentent sous différents aspects, à savoir, l'aspect structural, l'aspect électrique et l'influence de différentes conditions expérimentales [1].

Le silicium nanocristallin ou multicristallin ou polycristallin, se présente comme un assemblage de petits cristaux ou des grains d'orientation cristallographiques différentes, séparés les uns des autres par des zones fortement désordonnées appelées joints de grains [2]. La structure cristalline des grains est généralement assimilée à celle d'un monocristal de silicium, caractérisée par un arrangement périodique d'atomes supposé exempt de défauts. Néanmoins, un grain peut présenter des sous joints dû à des réseaux de dislocations ou de macles engendrés lors de la croissance du matériau.

La taille des grains est aussi un paramètre très important du silicium polycristallin. La modélisation des propriétés de transport et de recombinaison dans ce matériau suppose généralement que tous les grains ont la même taille. Cependant, on observe en pratique que la taille des grains suit une distribution autour d'une taille caractéristique, qui permet d'une façon globale de différencier les différents types de silicium polycristallin [3]. En effet l'appellation silicium polycristallin (ou Poly-Si), est utilisé dans le cas général, tandis que « nc-Si », « μ -Si » et « pc-Si » correspondent à des gammes de tailles de grains. Notons que, les propriétés recherchées dans les matériaux dépendent de l'application à laquelle ils sont destinés.

Dans le cadre de ce qui a été cité, nous avons positionné l'objectif de ce travail de recherche :

La caractérisation structurale étant notre domaine d'intérêt, nous avons focalisé notre étude sur les joints de grains dans le silicium multicristallin ou polycristallin. Ce matériau qui,

malgré son intérêt élémentaire dans l'industrie photovoltaïque, présente beaucoup de limitations dues à sa structure cristalline. Ce travail nous l'avons subdivisé en trois chapitres :

Dans le premier chapitre, nous commencerons par présenter un état de l'art sur les différentes formes du silicium : monocristalline, amorphe, polycristalline, micro et nanocristalline. Par ailleurs, nous allons présenter les différents défauts de structure dans les matériaux de silicium, les pièges.

Dans le second chapitre, nous présenterons un modèle largement utilisé pour décrire le mécanisme de transport des porteurs à travers les joints de grains en supposant que tous les grains ont une même moyenne taille.

Quant au troisième chapitre, il englobe les résultats de simulation obtenus ainsi que leur analyse.

Nous terminerons notre mémoire par une conclusion générale et de préalables perspectives.

Chapitre I
Etat de l'art sur le silicium

I.1 Introduction

Le silicium étant un matériau semi-conducteur de la famille des cristaux covalents, comme tous les éléments de la colonne IV de la classification périodique des éléments (Si, C, Ge, ...). Ces éléments ont quatre électrons périphériques (électrons de valence) qu'ils mettent en commun avec quatre voisins pour établir des liaisons covalentes. Ces électrons de valence sont liés, leur énergie de liaison est forte dans le cas du carbone diamant (isolant), nulle pour le métal (conducteur) et intermédiaire dans le silicium et le germanium (semi-conducteurs). De plus, le silicium étant un matériau semi-conducteur de largeur de bande interdite moyenne s'adapte bien aux contraintes imposées par les applications des différentes températures. Au cours de l'élévation de la température de dépôt, le silicium prend trois différentes formes (amorphe, monocristalline et polycristalline) [9] ; ainsi ce chapitre est consacré à la présentation des propriétés structurales et optiques du silicium dans toutes ces formes.

I.2 Structure du silicium

Le silicium possède un réseau cristallographique de type diamant, avec deux réseaux cubiques faces centrées, imbriqués et décalés l'un de l'autre (Figure I.1). Sa cellule élémentaire contient deux atomes de silicium, un en position $(0, 0, 0)$ et l'autre en position $(1/4, 1/4, 1/4)$. Chaque atome de silicium a une coordination tétraédrique et établit des liaisons covalentes avec quatre atomes voisins situés sur les sommets d'un tétraèdre. L'attraction entre les atomes se fait par un potentiel périodique dans le cristal, et les états électroniques qui existent entre ces atomes peuvent être illustrés par des bandes d'énergies pour les électrons. Les bandes permises, qui sont la bande permise supérieure appelée la bande de conduction B_C (une bande vide) et la bande permise inférieure appelée bande de valence B_V (complètement remplie au zéro absolu), sont séparées par une bande interdite appelée gap [4].

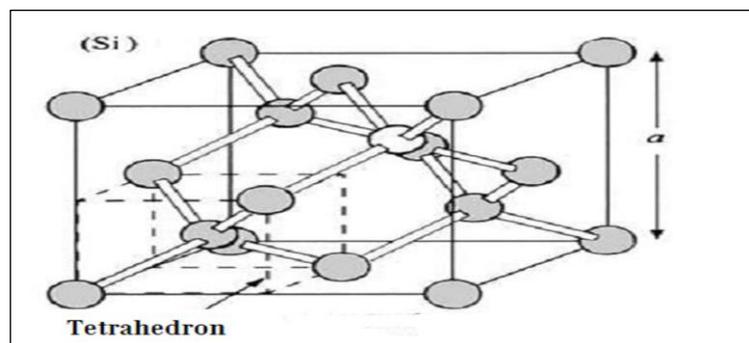


Figure I.1: Représentation d'une structure de silicium [4].

La bande interdite, appelée «gap», est égale à $E_g = 1,12$ eV à la température ambiante. Comme le minimum de la bande de conduction est repéré à un autre point dans la zone de Brillouin que le maximum de la bande de valence, on parle d'un gap indirect (Figure I.2).

L'importance du gap E_g , détermine l'échange des porteurs de charge entre les différentes bandes d'énergie et ainsi les propriétés électroniques du semi-conducteur [5].

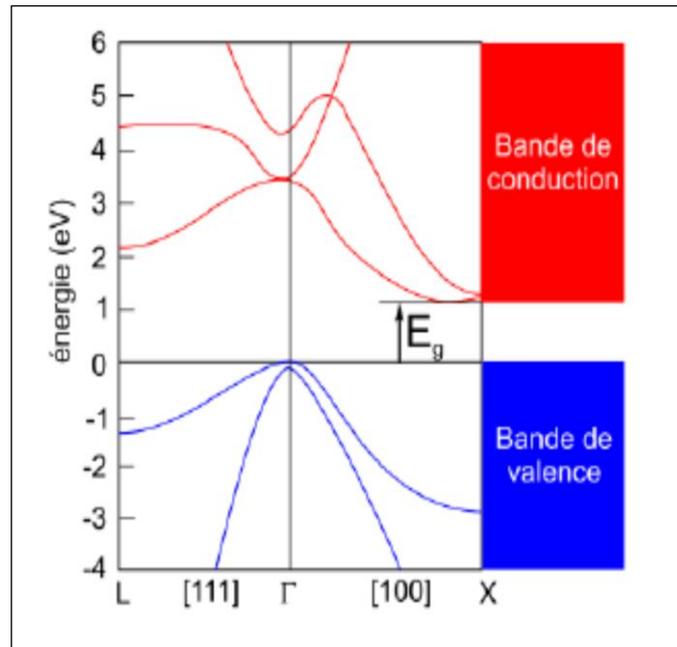


Figure I.2: Structure de bande du silicium massif cristallin [6].

I.3 Différentes formes du silicium

En fonction de sa structure cristalline, le silicium peut se présenter sous deux différentes formes : le silicium monocristallin et le silicium amorphe.

I.3.1 Le silicium monocristallin

Le silicium monocristallin est le matériau qui présente les meilleures propriétés électroniques grâce à sa grande pureté et à sa structure composée d'un seul grain. Il est élaboré à partir du procédé Czochraski ou par la purification par fusion de zone. Ces procédés sont réalisés à très haute température en phase liquide.

Le silicium monocristallin (ou cristallin-Si) possède un ordre à grande distance. Dans un cristal idéal de silicium, les atomes occupent les nœuds d'un réseau cubique à faces

centrées dont la moitié des sites tétraédriques est occupée, la distance interatomique est de $d = 2,35 \text{ \AA}$ (Figure I.3).

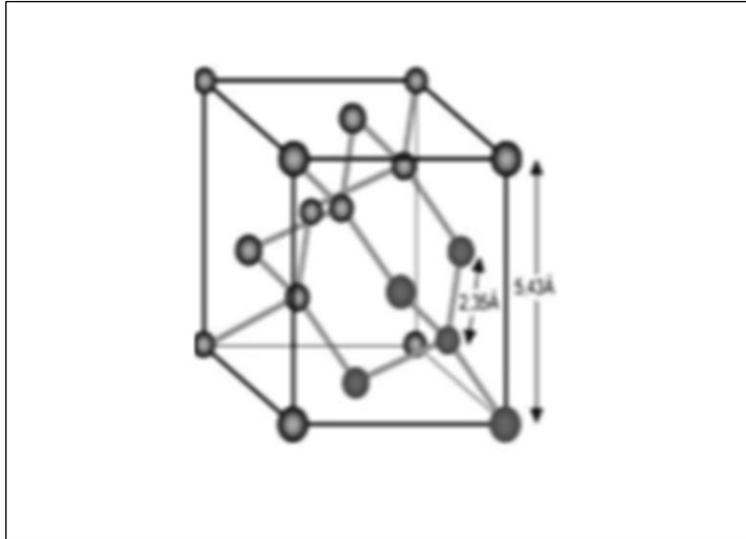


Figure I.3: Structure cristallographique du silicium monocristallin [5].

La liaison entre les atomes les plus proches est de caractère de type $3sp^3$ (angle de liaison $109^\circ 28'$). A ce type de liaison correspond des états électroniques qui sont couplés entre eux, dont le potentiel périodique dans le cristal conduit à des bandes d'énergie permises et interdites pour les électrons. La structure de bande de c-Si est marquée par la présence de plusieurs transitions interbandes indirectes. Cette énergie de gap est de 1.12 V à température ambiante,

elle est assistée par phonon, entre le plus haut niveau de la bande de valence et le plus bas état de la bande de conduction.

Le silicium ne présente donc aucun intérêt pour la réalisation de dispositifs optoélectroniques telles que les diodes électroluminescentes ou laser puisqu'il est quasiment non luminescent à température ambiante et n'émet que très faiblement à très basse température dans le domaine de l'infrarouge. Cependant, la réalisation de nombreux dispositifs commence par la production d'une matière monocristalline de grande pureté. En particulier la fabrication de puces microélectroniques nécessite des substrats monocristallins semi-conducteurs, par exemple : du silicium, du germanium ou de l'arséniure de gallium.

Dans le cas du silicium, la fusion de zone et le tirage en creuset (méthode de Czochralski) ; sont les deux méthodes utilisées couramment pour obtenir des lingots

monocristallins de grande pureté, longs d'environ un mètre et d'un diamètre allant jusqu'à 450 mm (Figure I.4). On a des rendements photovoltaïques élevés, supérieurs à 15% [6].



Figure I.4: Lingots de silicium monocristallin [8].

I.3.2 Le silicium amorphe

Le silicium amorphe est une forme non cristalline du silicium. Sa structure atomique est désordonnée, non cristallisée, mais il possède un coefficient d'absorption supérieur à celui du silicium cristallin. Cependant, ce qu'il gagne en pouvoir d'absorption, il le perd en mobilité des charges électriques. A cause d'une certaine distribution de la distance interatomique et de l'angle de liaison, des distorsions apparaissent dans le réseau, induisant une distribution des états électroniques, ce qui se traduit par l'apparition d'états localisés dans la bande interdite en haut de la bande de valence et en bas de la bande de conduction. Ils forment ce que l'on appelle les queues de bande. D'autre part, ces distorsions peuvent devenir suffisamment importantes pour empêcher une liaison de se former et ainsi de donner lieu à des liaisons insatisfaites, que l'on appelle également liaisons pendantes tel que représenté sur la figure I.5. Ces dernières ont une très grande influence sur les propriétés électroniques du silicium amorphe. Elles sont caractérisées par la présence d'un électron célibataire de l'atome concerné. Un second électron peut aisément s'y fixer, pour former une paire d'électron, le centre est alors chargé négativement. Les liaisons pendantes constituent de ce fait des pièges à électrons très efficaces. L'électron célibataire peut aussi éventuellement quitter l'atome, laissant un centre chargé positivement [9].

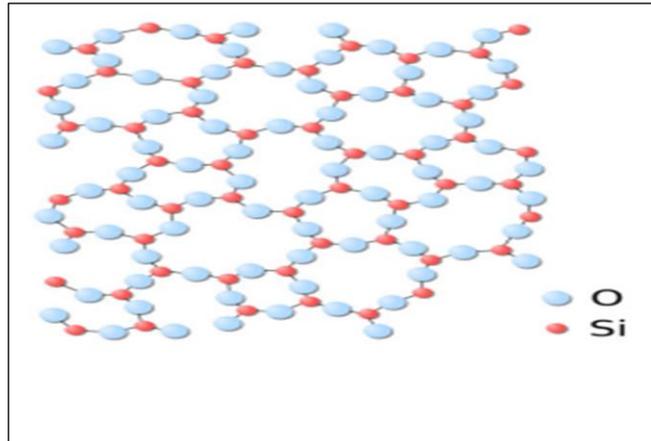


Figure I.5: Le silicium amorphe [9].

I.4 Différentes gammes du silicium

En fonction de la taille des grains, le silicium peut se présenter sous différentes formes : silicium multicristallin, silicium microcristallin, silicium polycristallin et silicium nanocristallin ou amorphe.

I.4.1 Le silicium polycristallin

C'est une structure intermédiaire entre les deux états extrêmes amorphe et monocristallin. En particulier, il peut exister des phases constituées de l'état cristallin et de l'état amorphe, c'est ainsi que l'on définit le silicium polycristallin ou le poly silicium. Ce matériau est un assemblage de petits cristaux dits grains, séparés les uns aux autres par des zones inter-grains ou joints de grains. A l'intérieur de chaque grain, les atomes sont arrangés d'une manière périodique de façon qu'on puisse considérer chaque grain comme un mono cristal, qui a une orientation cristallographique propre à lui.

D'autre part, le joint de grain est une structure complexe, qui se compose de quelques couches d'atomes désordonnés (zone fortement désordonnée riches en défauts cristallins que l'on peut assimiler au silicium amorphe). Ces atomes constituent une région de transition entre grains adjacents. Il est couramment admis que l'influence de joint de grain reste prépondérante sur les propriétés électriques et structurales des poly-cristaux de silicium. On peut dire que les caractéristiques essentielles du joint de grain sont ses dimensions, c'est-à-dire son épaisseur, et également sa densité de défauts. Parler d'un type unique de poly silicium serait donc une erreur et c'est pourquoi il est toujours nécessaire de définir le silicium polycristallin selon certains critères que l'on peut résumer comme suit : la texture et taille du grain, la densité de défauts intra granulaires et intergranulaires, le rapport du volume cristallin

sur le volume amorphe et la porosité. Ces paramètres dépendent totalement des conditions de dépôt et du post-traitement (recuit, hydrogénation, etc..) du silicium.

La figure I.6, illustre la structure d'un film de poly silicium constitué de joints de grains et de grains dont la taille devrait dépendre des conditions de recuit pour l'obtention d'une couche de silicium polycristallin quasiment cristallisée [9].

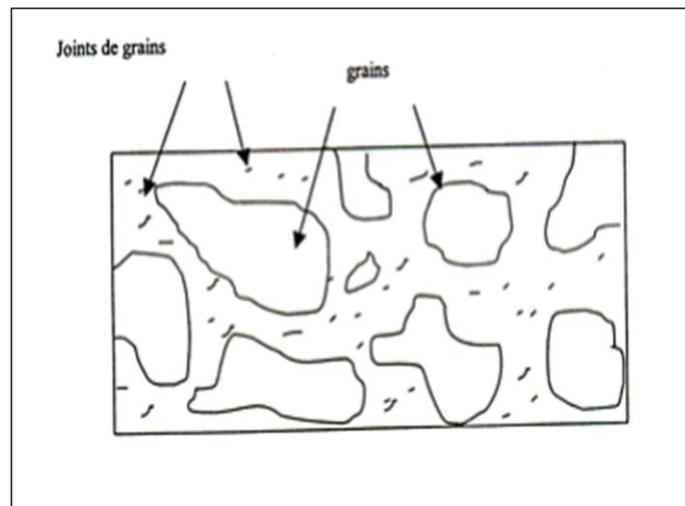


Figure I.6: Structure du silicium polycristallin [6].

La structure polycristalline de silicium dépend fortement des paramètres de dépôt et en générale, la qualité cristalline de ce matériau est déterminée par la taille des grains ou des cristallites qui le forment (voir figure I.7). En effet, les grains d'un poly cristal ne sont pas de vraies cristallites monocristallines, ils peuvent contenir des défauts électriques venant d'états localisés à l'intérieur de la bande interdite. En général, la qualité d'un matériau polycristallin est déterminée par la taille et l'orientation de ces grains, par la densité de défauts dans les joints de grains et dans les grains, et par les fractions volumiques de chaque état constituant le matériau. Les caractéristiques structurales d'un matériau polycristallin peuvent introduire des états localisés à l'intérieur de la bande interdite (liaisons pendantes). La qualité structurale détermine donc la structure électronique du matériau, et par conséquent le phénomène de transport à l'intérieur du matériau, sans tenir compte d'un dopage éventuel qui modifie les propriétés électriques du matériau comme pour un semiconducteur parfait [10].

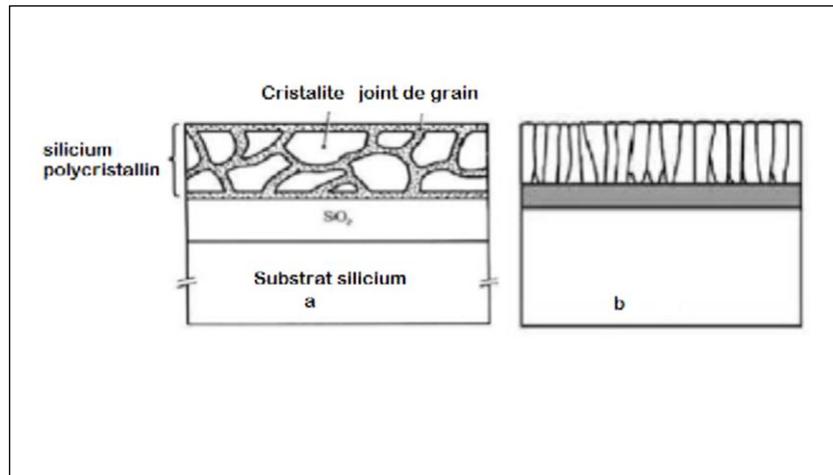


Figure I.7: Structure granulaire (a) et colonnaire (b) du poly silicium.

I.4.2 Silicium multicristallin

Cette structure est constituée de monocristaux séparés les uns des autres par des régions désordonnées et riches en défauts que l'on appelle joints de grain. Le silicium multicristallin est fabriqué à partir des résidus provenant de la fabrication du silicium monocristallin. Le procédé de cristallisation consiste en la refonte de ces résidus suivie d'une solidification unidirectionnelle sous forme de structure colonnaire multicristalline à gros grains, dont la taille est comprise entre 1nm et 10 cm. Un exemple d'une structure multicristalline de silicium est illustré sur la figure I.8.

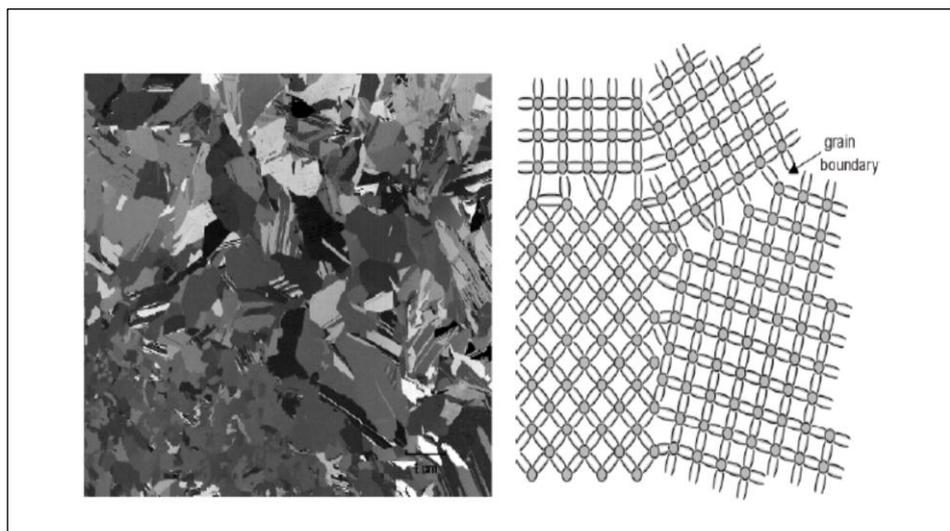


Figure I.8: Structure de grains dans une plaquette de silicium multicristallin [5].

I.4.3 Le silicium microcristallin

Le silicium microcristallin a été introduit, dans les années 1990, par l'Institut de Micro Technologie de Neuchâtel I. Il est déposé par des méthodes similaires de dissociation de SiH_4 assistées par plasma (PECVD) ou par résistance chauffante [11].

Le silicium microcristallin a une structure colonnaire. Il est composé de cristallites de diamètre de 10 à 20 nm qui peuvent également s'agglomérer en structure allongée conique [12]. Ce matériau hétérogène est constitué de trois composantes : en plus des deux phases amorphe et cristallin [13] ; la présence des joints de grains riches en porosité. Sur la figure I.9 et la figure I.10, sont représentés une schématisation de la distribution des défauts et une image AFM dans le silicium microcristallin.

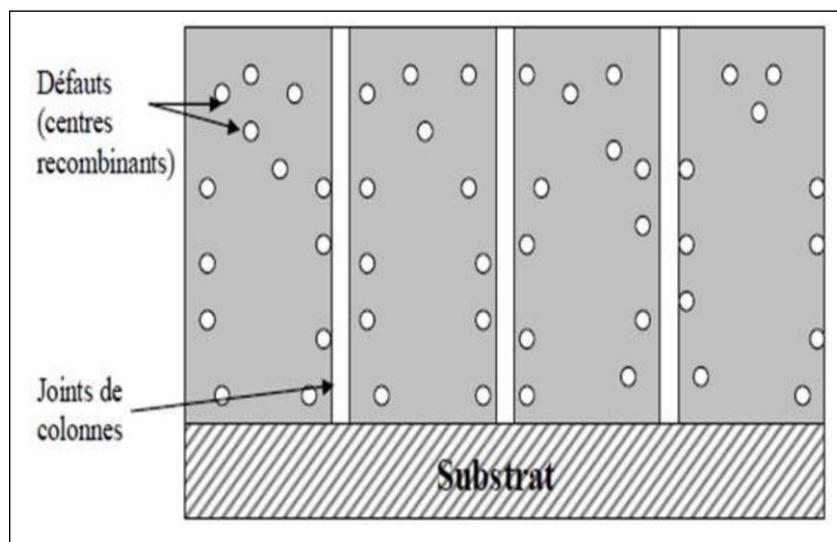


Figure I.9: Schématisation de la distribution des défauts dans le silicium microcristallin.

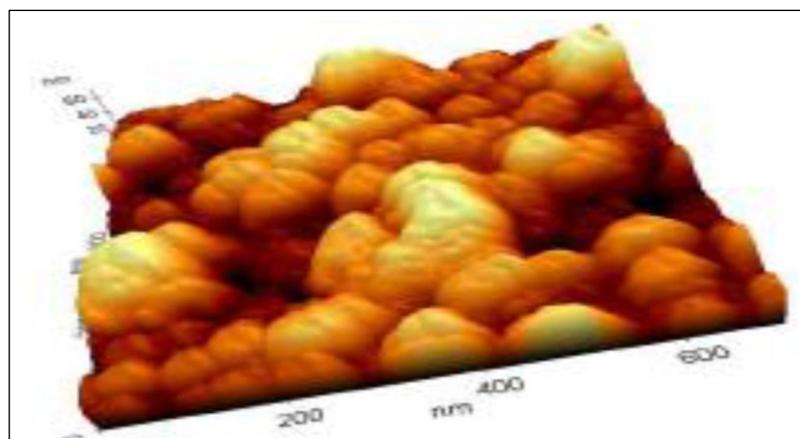


Figure I.10: Image AFM du silicium microcristallin [5].

Les propriétés optoélectroniques du silicium microcristallin dépendent fortement de la fraction cristalline. Le microcristallin ($\mu\text{-Si:H}$) possède un gap indirect et présente donc un coefficient d'absorption 10 fois plus faible que celui du a-Si:H dans le visible, mais son faible gap de mobilité (1.4 eV) permet d'absorber une plus grande partie du spectre solaire. Une épaisseur de 2 à 4 microns est ainsi nécessaire pour absorber la lumière incidente.

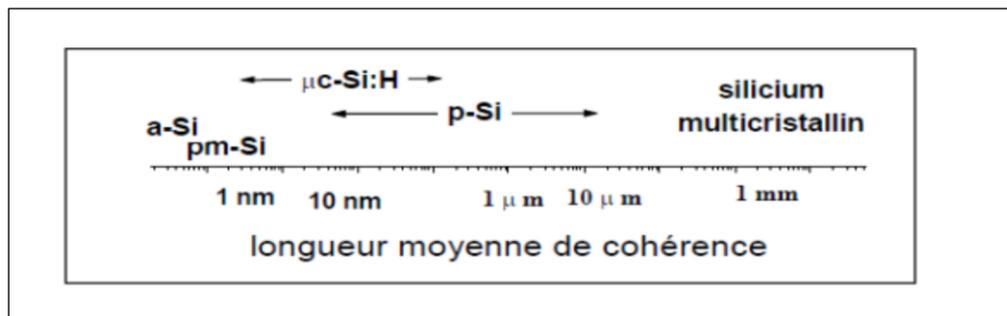


Figure I.11: Classification des matériaux de silicium [5].

I.4.4 Silicium amorphe hydrogéné

L'étude de l'hydrogène dans les semi-conducteurs a toujours été étroitement liée au développement de la technologie des dispositifs électroniques et photovoltaïques. Ainsi, les effets de l'hydrogène sur le silicium cristallin (passivation de défauts profonds, formation de complexes avec les dopants...) ont fait l'objet de nombreuses études dans les vingt dernières années. Par ailleurs, l'hydrogène a joué un rôle clé dans le développement du silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H). La structure du silicium amorphe hydrogéné est illustrée sur figure I.12 [5].

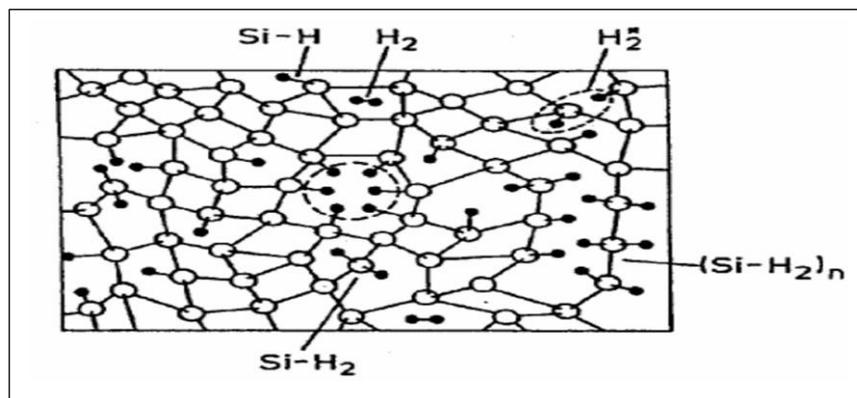


Figure I.12: Configuration structurales possible de l'hydrogène dans a-Si [5].

I.4.5 Le rôle clé de l'hydrogène dans le silicium amorphe

Comparativement au silicium cristallin qui contient une densité d'états dans la bande interdite de l'ordre de $10^{10}/\text{cm}^3$, le silicium amorphe pur, a-Si , contient une densité d'états

dans la bande interdite de l'ordre de 10^{19} - $10^{20}/\text{cm}^3$. De tels défauts, jouent le rôle de pièges pour les porteurs et par conséquent altèrent les propriétés électroniques de ce matériau.

Pour obtenir du silicium amorphe d'une qualité électronique meilleur il faudrait réduire cette densité d'état en passivant le plus grand nombre possible de défauts, qui sont principalement des liaisons brisées.

L'hydrogène est l'un des candidats le mieux adapté pour accomplir cette tâche, car il peut saturer ces liaisons brisées. L'hydrogène incorporé dans le matériau a-Si conduit à la diminution de la densité d'états dans la bande interdite de $10^{19}/\text{cm}^3$ à $10^{15} /\text{cm}^3$, et un tel matériau devient plus facile à doper que le a-Si pur [14].

De même que l'incorporation de l'hydrogène induit la diminution de la densité d'états dans le pseudo-gap, la densité d'états localisés dans les queues de bandes, due au désordre, et aux liaisons tendues ou distordues (distance inter atomique plus longue ou angle de liaison anormal), s'en trouve également diminuée. En effet, l'hydrogène relaxe la matrice amorphe, en réduisant les distorsions des angles. Ce résultat est interprété comme étant dus à une relaxation du voisinage immédiat du site Si-H résultant de la diminution des contraintes locales [15-16]. Cependant les effets de l'hydrogénation restent difficiles à comprendre [17].

L'hydrogène non lié, joue aussi un rôle important dans la relaxation de la matrice amorphe. Il a été établi, expérimentalement, qu'il existe des 'microcavités' de la taille d'environ d'une centaine d'atomes de Si (atomes manquants) occupées par de l'hydrogène moléculaire [18-19].

Il existe également dans le a-Si : H des hétérogénéités consistant en une structure biphasique, l'une composée d'îlots à quelques pour cent d'hydrogène (3%) principalement sous forme de liaison Si-H, et l'autre de zone dite 'tissu' a plus grande concentration d'hydrogène, où les atomes d'hydrogène peuvent occuper différents types de sites autres que celui de la liaison Si-H isolée. Tapissant les surfaces de ces microcavités, des liaisons pendantes peuvent se reconstruire en contractant des liaisons éventuellement faibles ; celles-ci vont alors donner lieu à des états liants et anti-liants participant aux queues de bandes.

L'hydrogène joue aussi un rôle crucial dans certains mécanismes microscopiques observés dans le a-Si : H, en particulier dans la métastabilité photo induite et thermique. La dégradation des propriétés électroniques induite par ces deux phénomènes est en effet généralement attribuée à la mobilité de l'hydrogène lié avec cependant une différence fondamentale dans le rôle qu'il peut jouer. Dans le premier cas, l'hydrogène est supposé venir se fixer sur l'une des liaisons pendantes créées sous illumination grâce à l'énergie de recombinaison des paires électron trou photo excitées, ce qui empêche leur reconstruction lorsque cesse l'illumination [20]. Dans le deuxième cas, il diffuse de façon dispersive d'un site à l'autre et casse les liaisons distordues Si-Si ; les liaisons pendantes ainsi créées seront stabilisées ensuite par l'hydrogène, ce qui explique la métastabilité à basses températures lorsque celui-ci ne peut plus diffuser [21].

I.5 Types des défauts dans le silicium

Il existe plusieurs types de défauts cristallins (défauts d'arrangement des atomes) dans les matériaux cristallins réels. Cette rupture de l'ordonnement a un effet sur les propriétés d'usage du matériau. Certains de ces défauts sont liés à la mise en œuvre du procédé de solidification et l'on peut tenter de les éliminer en contrôlant les conditions expérimentales de solidification. Les défauts cristallins sont généralement classés en fonction de leurs dimensions comme suit :

- ❖ Défauts sans dimension (0D) : comme les défauts ponctuels (atomes interstitiels ou auto-interstitiels, lacunes...).
- ❖ Défauts à une dimension (1D : linéaires) : les dislocations.
- ❖ Défauts à deux dimensions (2D : surfaciques) : les joints de grains.
- ❖ Défauts à trois dimensions (3D : volumiques) : les précipités ou inclusions [5].

I.5.1 Défauts sans dimension (0D) : défauts ponctuels

Les défauts ponctuels conduisent à une rupture de l'ordre cristallin avec des dimensions limitées à la maille cristallographique. Les lacunes correspondent aux lacunes laissées dans la structure, généralement aux positions occupées par les atomes, comme le montre la figure I.13 (a). Les atomes interstitiels sont des atomes en excès dans la structure, ou des impuretés qui sont généralement placées sur des sites vides, comme le montre la figure I.13 (b). Comme le montre la figure I.13 (c), lorsqu'un atome occupe une position

normalement occupée par des atomes de chimies différentes, il est appelé une impureté substituée [5].

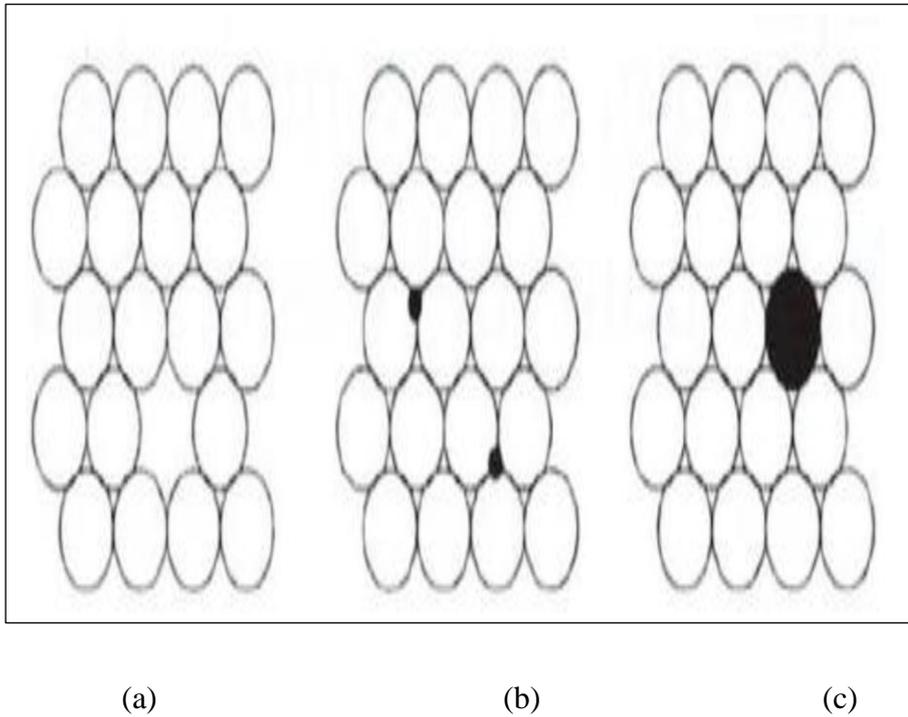


Figure I.13: Exemples de défauts ponctuels simples : (a) lacune, (b) atome en position interstitielle et (c) atome en position substitutionnelle [5].

I.5.2 Défauts linéaires (1D) : Dislocations

Lorsque le cristal se déforme au-delà de la plage élastique, des lignes apparaissent à la surface. Il s'agit en fait d'une trace des plans cristallins glissant les uns contre les autres. Sous l'action d'une contrainte mécanique, ces traces prouvent l'existence de défauts cristallins linéaires appelés dislocations. Il existe deux types de luxations : les luxations en spirale et les luxations en lame. Chaque dislocation est définie par son vecteur de Burgers (b). Celle-ci est perpendiculaire à la ligne de dislocation pour les dislocations angulaires et parallèle à la ligne de dislocation pour les dislocations spiralées. Les deux types de luxation sont illustrés à la figure I.14. Pour les dislocations mixtes, le vecteur de Burgers fait un angle aléatoire avec la ligne de dislocation [5].

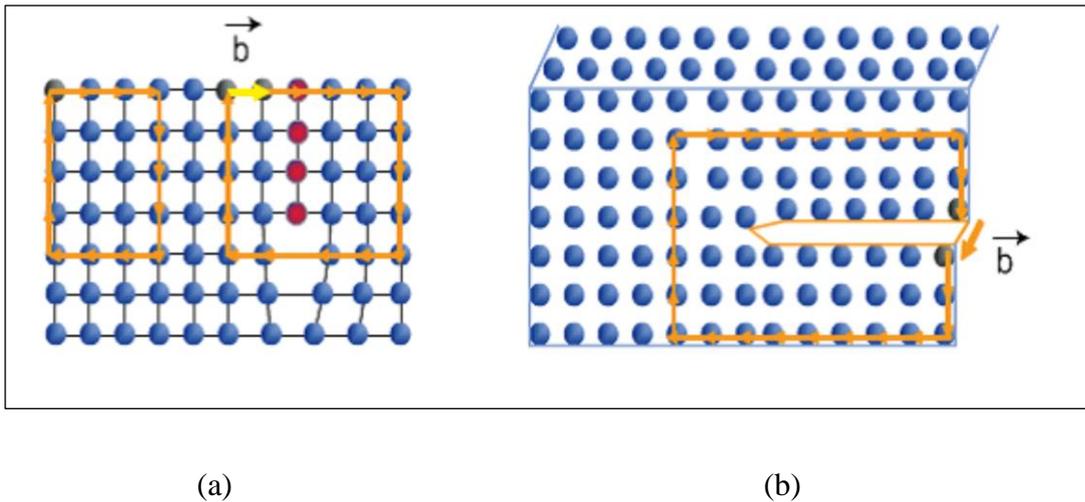


Figure I.14: Schématisation du vecteur de Burger pour : (a) dislocation coin et (b) dislocation vis [5].

I.5.3 Défauts surfaciques (2D) : Joints de grains

Les joints de grains représentent des régions chaotiques qui combinent des particules dans différentes directions. Ils représentent des zones chaotiques souvent comparées au silicium amorphe. Dans ce dernier cas, les joints de grains contiennent des liaisons pendantes à haute densité. Ces défauts introduisent des niveaux locaux dans la bande interdite qui ont pour effet de piéger les porteurs minoritaires. Ces liens forment un centre de recombinaison car il agit comme un puits de potentiel par rapport aux porteurs minoritaires. Cela affaiblit la densité de porteurs minoritaires et réduit les propriétés électriques de l'ensemble du semi-conducteur polycristallin. Les joints de grains sont aussi le lieu de ségrégation de l'élément dopant qui devient inerte. Cet effet est plus important d'une part lorsque le rayon atomique du dopant est grand devant le rayon atomique du silicium, ou d'autre part lorsque la densité de l'élément dopant est élevée. La Figure I.15 montre les joints de grains du silicium [5].

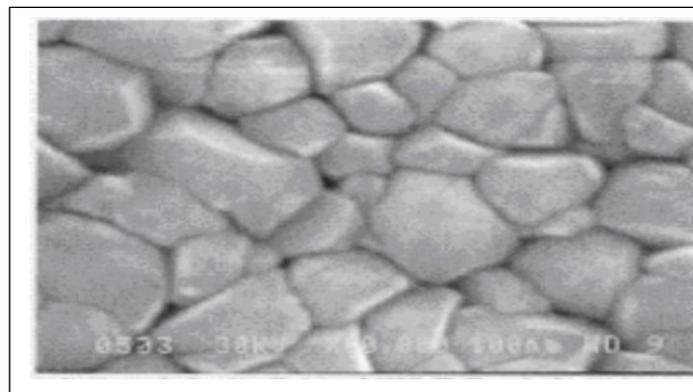


Figure I.15: Image MEB des Joints de grains [3].

I.5.4 Défaut volumique (3D)

Les défauts volumiques sont des défauts tridimensionnels. Si une partie du cristal est remplacée par un volume d'un autre composé, la différence est de nature chimique et peut être ou non cristallographiquement différente [5].

I.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté une description structurale du silicium. Le rôle de l'incorporation de l'hydrogène a été évoqué et brièvement les types de défauts ont été cités. En résumé, on peut conclure que d'un côté, le silicium est classé suivant la structure cristalline en deux catégories : monocristallin et amorphe ; D'un autre côté, le silicium est classé suivant la taille des grains en plusieurs catégories : multicristallin, polycristallin....

Chapitre II
***Propriétés de transport dans les couches
polycristallines***

II.1 Introduction

Il est convenu que le silicium polycristallin est constitué de grains monocristallins (ou cristallites), séparés par des zones riches en défauts dites : joints de grains. Ces derniers se manifestent électriquement sous forme d'états pièges d'interface. Des porteurs libres sont piégés à des positions de faibles énergies aux joints de grains, ce qui engendre une courbure des bandes d'énergies (figure II.1). Ces courbures empêchent le mouvement des autres porteurs majoritaires d'un grain (cristallite) à l'autre en créant une barrière de potentiel [8].

Dans ce chapitre, nous allons donner le modèle standard largement utilisé [22] dans plusieurs travaux, décrivant le rôle joué par ces joints de grains sur le comportement électrique et les phénomènes de transport dans ce matériau.

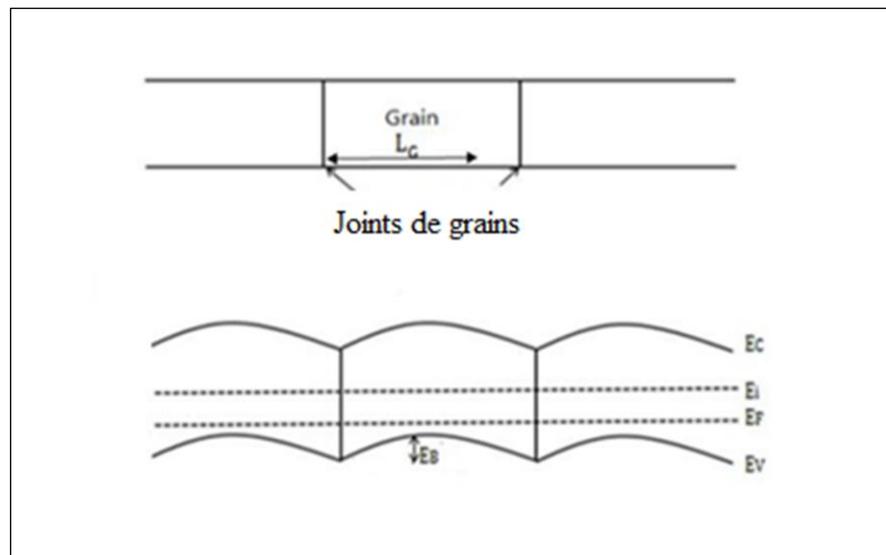


Figure II.1: Diagramme de bande d'énergie dans le silicium polycristallin.

II.2 Transport des porteurs dans le silicium polycristallin

Deux modèles ont été proposés pour tenter d'expliquer les propriétés électriques du silicium polycristallin :

- Modèles des joints de grains,
- Phénomènes de transport.

II.2.1 Modèles des joints de grains

Deux modèles sont à distinguer : le modèle de ségrégation et le modèle de piégeage des porteurs [23].

II.2.1.1 Modèle de ségrégation des dopants

Ce modèle a été proposé par Cocher et Sidgwick [22], et décrit la variation de la résistivité en fonction de la densité de dopant : l'hypothèse de départ est que les joints de grains constituent des sites préférentiels pour la ségrégation des atomes de dopants. Pour les faibles concentrations de dopants, la majorité des atomes sont localisés au niveau des joints de grain, supposés neutres et électriquement inactifs. En conséquence, la quantité de dopants à l'intérieur des grains est réduite, et ainsi la concentration des porteurs libres participant à la conduction est beaucoup plus faible que celle correspondant à la concentration chimique totale de dopants supposée uniformément distribuée. Lorsqu'on augmente le dopage, les joints de grains deviennent saturés en dopants, et les atomes se retrouvent uniformément distribués à l'intérieur des grains. Par conséquent, la concentration en porteurs libres rejoint celle en dopants, et la résistivité du film de silicium polycristallin qui a d'abord augmentée, diminue linéairement avec la concentration de dopants dans le cas des forts dopages [23]. Ce modèle, basé sur le mécanisme de la ségrégation des dopants, n'explique guère la variation de la résistivité avec la température, et le minimum de la mobilité de Hall des porteurs, observé aux concentrations intermédiaires de dopant [24].

II.2.1.2 Modèle de piégeage

Le modèle de piégeage des porteurs proposé par Seto [22] illustré sur la figure II.2, a permis d'expliquer l'allure des caractéristiques électriques du silicium poly-cristallin. Ce modèle est basé sur les hypothèses suivantes :

- ❖ Les grains sont de taille identique notée généralement : L_G .
- ❖ Les joints de grains ont une épaisseur négligeable par rapport à la taille des grains, et contiennent une densité d'états pièges N_t .
- ❖ Les pièges sont initialement neutres et se chargent en piégeant des porteurs.
- ❖ Présence d'un seul type d'atomes de dopants, uniformément distribués et totalement ionisés avec une concentration N dans la couche de silicium polycristallin.

Le modèle de piégeage des porteurs permet une meilleure explication des propriétés de conduction électriques. Cependant, il ne peut pas expliquer leurs variations en fonction des traitements thermiques et des différentes espèces dopantes. Afin de permettre une explication plus plausible des propriétés de conduction électriques dans des couches de silicium polycristallin, les deux modèles ont été combinés. En d'autres termes, utiliser le modèle de piégeage en tenant compte de la ségrégation des dopants [24].

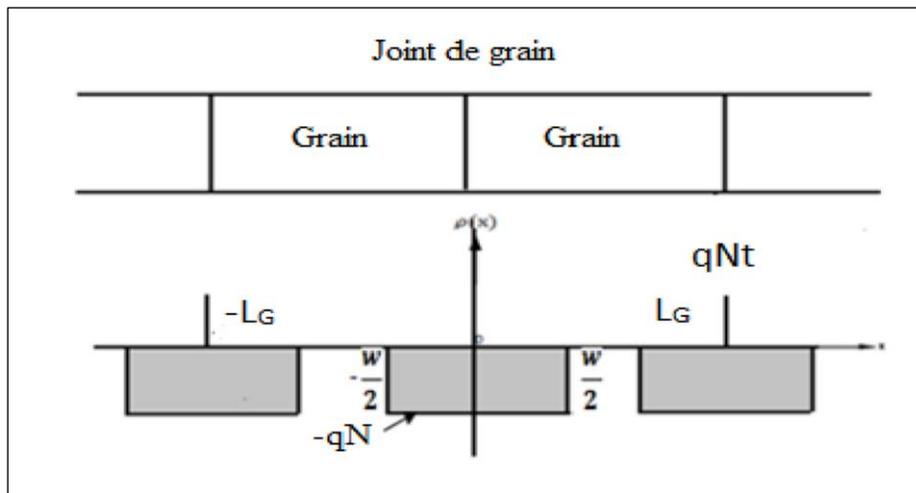


Figure II.2: Modèle de Seto [22].

Dans ce modèle, le silicium polycristallin est supposé être composé d'une chaîne linéaire de cristallites identiques ayant une taille de grain L_G et une densité de piège aux joints de grain Nt . La charge piégée aux joints de grains est compensée par des régions d'appauvrissement de charges opposées entourant les joints de grains. Ce modèle est basé sur le calcul de la barrière d'énergie aux joints de grains, qui affecte le transport des porteurs dans la couche. Pour calculer la barrière d'énergie, le moyen le plus simple consiste à résoudre l'équation de Poisson dans le grain [22] :

$$\frac{d^2V}{dx^2} = -\frac{qN}{\epsilon_0\epsilon_{Si}} \quad (\text{II.1})$$

Avec, N : concentration de dopants,

ϵ_{Si} : permittivité de semiconducteurs (Silicium),

ϵ_0 : la permittivité du vide,

q : la charge élémentaire,

V : Potentiel électrostatique.

On suppose que le piégeage des porteurs aux joints des grains entraîne l'existence d'une zone entièrement désertée par les porteurs libres de largeur $w/2$ de part et d'autre de joint de grain.

- Dans la zone de charge d'espace : $0 < x < \frac{w}{2}$; $\frac{d^2V}{dx^2} = \frac{qN}{\epsilon_0\epsilon_{si}}$ (II.2)

- A l'extérieur de la zone : $\frac{w}{2} < x < \frac{L_G}{2}$; $\frac{d^2V}{dx^2} = 0$ (II.3)

- A la limite de la zone d'espace : $\frac{dV}{dx} = 0$ à $x = \frac{w}{2}$ (II.4)

$$0 < x < \frac{w}{2}; \quad \frac{dV}{dx} = -\frac{qN}{\epsilon_0\epsilon_{si}}x + cont = \frac{qN}{\epsilon_0\epsilon_{si}}\left(x - \frac{w}{2}\right) \quad (II.5)$$

$$V(x) = \frac{qN}{2\epsilon_0\epsilon_{si}}\left(x - \frac{w}{2}\right)^2 + \psi\left(\frac{w}{2}\right) \quad (II.6)$$

$$\frac{w}{2} < x < \frac{L_G}{2}; \quad V(x) = V\left(\frac{w}{2}\right) \quad (II.7)$$

Tel que, la hauteur de la barrière énergétique E_b est la différence énergétique entre la position $x=0$ et $x = \frac{w}{2}$ donc :

$$E_b = qV_b = q\left[\left(\frac{w}{2}\right) - V(0)\right] = q\frac{qN}{2\epsilon_0\epsilon_{si}}\left(\frac{w}{2}\right)^2 = \frac{q^2N}{8\epsilon_0\epsilon_{si}}w^2 \quad (II.8)$$

Pour une taille de grain donnée " L_G " deux cas peuvent se présenter, suivant les valeurs relatives des concentrations en atomes de dopants N et de pièges N_t .

Le modèle de Seto définit une concentration critique : N^* , pour laquelle la cristallite est à la limite de la désertion totale [25] :

-pour un dopage inférieur à N^* , le grain est totalement déserté,

-pour un dopage supérieur à N^* , il existe une zone neutre au milieu du grain et dans ce cas, Seto suppose que tous les pièges sont ionisés :

$$\frac{w}{2} = \frac{L_G}{2} \rightarrow L_G \rightarrow N^* = \frac{N_t}{L_G} \quad (\text{II.9})$$

Pour une concentration de pièges fixe : $N > N^*$: désertion partielle de la cristallite, dans ce cas les grains sont partiellement désertés de porteurs et les états pièges sont entièrement replis, Seto suppose que l'équation (II.8), c'est-à-dire la hauteur de la barrière énergétique devient :

$$E_b = \frac{q^2 N}{8\epsilon_0 \epsilon_{si}} w^2 = \frac{q^2 N}{8\epsilon_0 \epsilon_{si}} \cdot \frac{N_t^2}{N^2} = \frac{q^2 N_t^2}{8\epsilon_0 \epsilon_{si} N} \quad (\text{II.10})$$

D'après l'expression obtenue, la hauteur de la barrière E_b est indépendante de la taille de grain. Et, elle tend vers zéro lorsque la concentration en dopants devient suffisamment importante ; dans ce cas, les propriétés du matériau sont équivalentes à celles d'un matériau monocristallin.

Le potentiel s'exprime alors :

$$\text{Pour } x \in \left[0, \frac{w}{2}\right], \quad V(x) = -\frac{qN}{2\epsilon_0 \epsilon_{si}} \left[x - \frac{N_t}{2N}\right]^2 \quad (\text{II.11})$$

$$\text{Pour } x \in \left[\frac{w}{2}, \frac{L_G}{2}\right], \quad V(x) = 0 \quad (\text{II.12})$$

Pour une concentration de pièges : $N < N^*$, désertion complète de la cristallite ($w = L_G$) :

$$E_b = \frac{q^2 N}{8\epsilon_0 \epsilon_{si}} L_G^2 \quad (\text{II.13})$$

Ainsi, la hauteur de la barrière énergétique E_b est indépendante de la concentration de pièges N_t . La hauteur de la barrière de potentiel au point : $x = \frac{L_G}{2}$ s'écrit,

$$\text{Pour } x \in \left[0, \frac{L_G}{2}\right], \quad V(x) = -\frac{qN}{2\epsilon_0 \epsilon_{si}} \left[x - \frac{L_G}{2}\right]^2 \quad (\text{II.14})$$

II.2.2 Phénomènes de transport

Les phénomènes distingués sont, l'émission thermoïonique et le champ thermoïonique.

II.2.2.1 Phénomène d'émission thermoïonique

Aux faibles concentrations de dopage, la largeur de la zone de déplétion de chaque côté du joint de grain est la moitié de celle des grains. Pour des concentrations moyennes, cette largeur est inversement proportionnelle à la concentration de dopage. Pour de telles largeurs de barrières, l'effet tunnel n'est pas significatif et les porteurs se déplacent généralement d'un grain à l'autre par émission thermoïonique [8], tel que représenté sur la figure II.3.

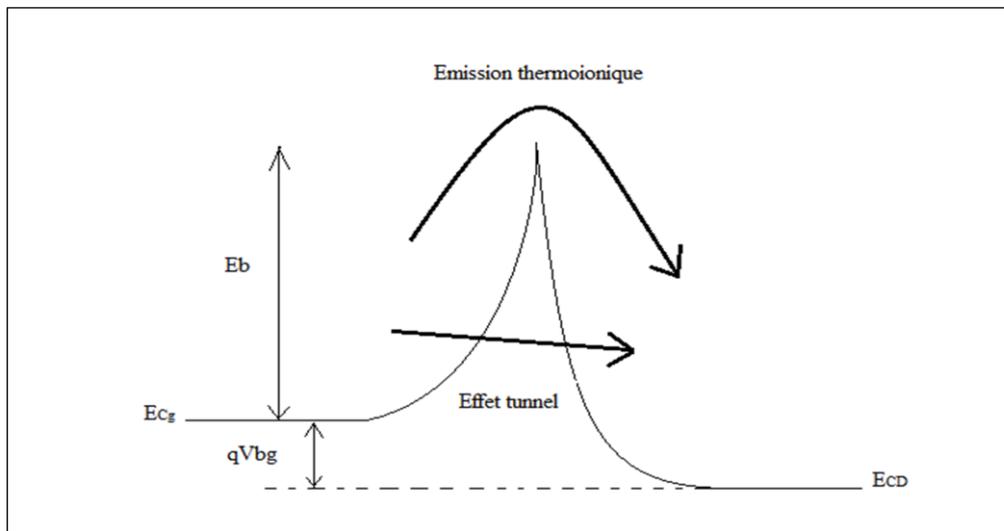


Figure II.3 : Mécanismes de transport des porteurs majoritaires à travers une barrière d'énergie E_b [1].

Aux fortes concentrations, la largeur de la zone de déplétion peut être inférieure à 10 nm et l'effet tunnel intervient dans la détermination du flux de courant. Quand l'émission thermoïonique est dominante, la densité de courant d'émission thermo-ionique à travers un joint de grain est exprimée par la relation suivante [27] :

$$J_{th} = q \cdot P_a \cdot \left(\frac{K.T}{2\pi m^*}\right)^{0.5} \cdot \exp\left(-\frac{qV_b}{K.T}\right) \cdot \left[\exp\left(\frac{qV_a}{K.T}\right) - 1\right] \quad (\text{II.15})$$

Où : q , la charge élémentaire,

P_a , la concentration moyenne des porteurs,

m^* , la masse effective du porteur,

K , la constante de Boltzmann,

V_b , la hauteur de la barrière de potentiel.

V_a , la tension appliquée.

La relation, ne prend pas en compte les collisions dans la région de déplétion et la concentration de porteurs dans la cristallite a été supposée indépendante du flux de courant, de sorte qu'elle ne soit applicable que si le nombre de porteurs participant au transport de courant est faible par rapport au nombre total de porteurs dans la cristallite [3]. Cette condition restreint la hauteur de la barrière à être plus grande ou comparable à $K \times T$. Si la valeur de V_a est faible et si, $q.V_a \ll K.T \Rightarrow$ l'équation se réduit à :

$$J_{th} = q.P_a \cdot \left(\frac{K.T}{2\pi m^*}\right)^{0.5} \cdot \frac{qV_a}{K.T} \cdot \exp\left(-\frac{qV_b}{K.T}\right) \quad (\text{II.16})$$

Ainsi, V_a est la polarisation à travers un joint de grains (c'est-à-dire la polarisation à travers l'échantillon divisée par le nombre de grains, en supposant que tous les joints de grains sont identiques). Généralement, une tension de polarisation appliquée se divise d'une façon non uniforme entre les deux côtés du joint de grains ; cependant, pour les faibles tensions, approximativement la moitié de cette tension apparaît de chaque côté [8].

La concentration moyenne, P_a est donnée par l'expression suivante, dans le cas de régions complètement déplétée et non déplétée [26] :

$$P_a = P_b \left\{ \left(1 - \frac{Q_t}{L_G N} \right) + \frac{1}{q L_G} \left(\frac{2\pi\epsilon_0\epsilon_{Si} K.T}{N} \right)^{1/2} \cdot \text{erf} \left[\frac{q Q_t}{2} \left(\frac{1}{2\pi\epsilon_0\epsilon_{Si} K.T.N} \right)^{1/2} \right] \right\} \quad (\text{II.17})$$

A partir des équations précédentes, on peut ainsi exprimer la conductivité du poly silicium en fonction de la taille des grains donnée par :

$$\sigma = L_G \cdot q^2 \cdot P_a \cdot \left(\frac{1}{2\pi m^* \cdot K.T}\right)^{0.5} \cdot \exp\left(-\frac{qV_b}{K.T}\right) \quad (\text{II.18})$$

Et, à partir de la relation : $\sigma = qp\mu$, la mobilité effective des porteurs aux joints de grains est :

$$\mu_{eff} = L_G \cdot q \cdot \left(\frac{1}{2\pi m^* \cdot K.T}\right)^{0.5} \cdot \exp\left(-\frac{qV_b}{K.T}\right) \quad (\text{II.19})$$

II.2.2.2 Phénomène d'émission du champ thermoïonique

Ce phénomène décrit la combinaison du phénomène de l'émission thermoïonique et celui de l'effet tunnel. En général, ces phénomènes de transport apparaissent en considérant trois gammes d'énergies de porteurs [8] :

- Les porteurs possèdent une énergie inférieure à celle nécessaire pour surmonter la barrière de potentiel dans les zones de déplétion des grains : effet tunnel ;
- Les porteurs ont assez d'énergie pour surmonter la barrière des zones de déplétion mais pas assez pour traverser la barrière des joints de grains : effet tunnel à travers la barrière des joints des grains ;
- Les porteurs ont suffisamment d'énergie pour se déplacer librement à travers la barrière des joints de grains : porteurs libres.

II.3 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté les modèles de transport souvent utilisés dans la description du transport de charges dans le polysilicium.

Chapitre III
Résultats et discussions

III.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous nous intéressons à la modélisation du phénomène de transport de charge à travers les joints de grains dans le silicium polycristallin. La modélisation sera effectuée en fonction des paramètres physiques à savoir, la taille des grains et le dopage. Les programmes de simulation sont conçus et exécutés à l'aide du logiciel MATLAB.

III.2 Le modèle

Le modèle utilisé est basé sur le principe élaboré par Seto et d'autres chercheurs lui succédant [23-31], se résumant selon la figure III.1 ;

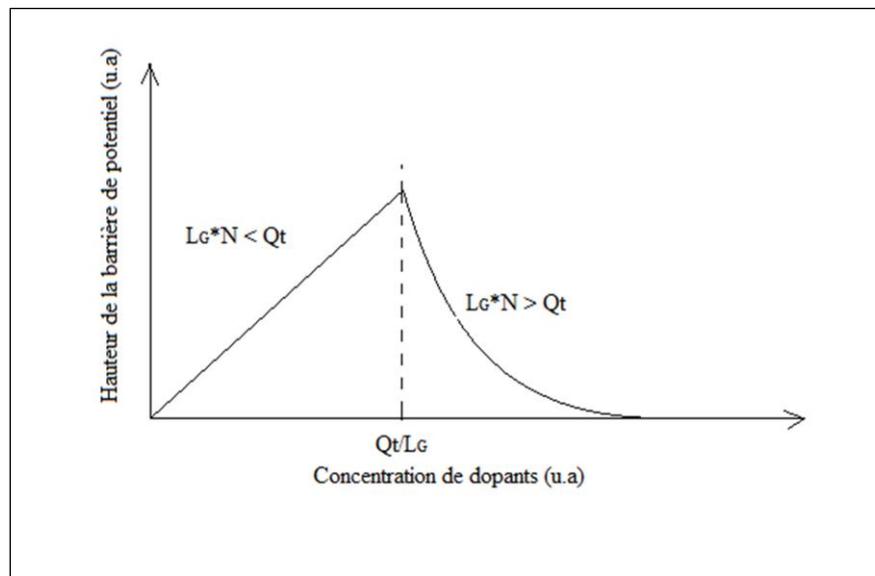


Figure III.1 : La barrière de potentiel dépendante du dopage aux joints de grains.

L'existence d'un grand nombre de défauts au niveau des joints de grains, dus aux liaisons atomiques inachevées, a pour conséquence la formation des états pièges ($N_t \approx Q_t$), capables de piéger les porteurs de charge et de les immobiliser. Ceci réduit le nombre de porteurs libres disponibles pour la conduction électrique. Après avoir figé les porteurs mobiles, les pièges deviennent électriquement chargés, et **forment une barrière de potentiel** qui empêche le mouvement des porteurs d'une cristallite à l'autre, réduisant de ce fait leur mobilité.

Ce modèle établi par les chercheurs prévoit, une forte résistivité au-dessous de la concentration de dopage critique N^* et qui diminue rapidement pour $N > N^*$. Le principe peut être résumé comme suit :

Pour $N < N^$, la concentration des porteurs libres est faibles et la résistivité est alors élevée ;

$$L_G \times N < Q_t \Rightarrow V_b = q \times \frac{L_G^2 \times N}{8 \times \epsilon_0 \times \epsilon_{Si}} \quad (\text{III.1})$$

Pour $N \approx N^$, la barrière de potentiel aux joints de grains (créée par les défauts présents) augmente, ce qui rend plus difficile le mouvement des porteurs d'un grain à l'autre. La mobilité effective diminue alors et la résistivité demeure élevée. La barrière de potentiel est alors à sa valeur maximale ;

$$\begin{aligned} L_G \times N = Q_t \Rightarrow N = N^* \rightarrow V_b &= q \times \frac{L_G^2 \times N^*}{8 \times \epsilon_0 \times \epsilon_{Si}} = q \times \frac{Q_t^2}{8 \times \epsilon_0 \times \epsilon_{Si} \times N^*} \\ \Rightarrow N = N^* &= \frac{Q_t}{L_G} \quad (Q_t \approx N_t) \end{aligned}$$

Pour $N > N^$, la concentration des porteurs libres augmente et la hauteur de la barrière de potentiel diminue. La résistivité diminue rapidement quand la concentration de dopage augmente jusqu'à ce qu'elle atteigne celle du silicium monocristallin.

$$L_G \times N > Q_t \Rightarrow V_b = q \times \frac{Q_t^2}{8 \times \epsilon_0 \times \epsilon_{Si} \times N} \quad (\text{III.2})$$

Ainsi, en fonction de ces concepts nous allons étudier l'effet de la variation de la taille des grains, qui un paramètre très important dans la caractérisation des propriétés électriques du silicium multicristallin ou polycristallin et l'effet de la variation de la concentration de dopage sur l'évaluation de la hauteur de la barrière de potentiel ; Et par suit, le courant thermoionique, la mobilité et la conductivité.

III. 3 Résultats et discussions

Plusieurs modèles ont été proposés pour décrire la densité d'états pièges, dans notre travail nous avons utilisé l'équation empirique établie dans des travaux antérieurs [29] :

$$N_t = (35 + 2.55 \times L_G^{-\alpha}) \times 10^{10} \text{ (cm}^{-2}\text{)} \quad (\text{III.3})$$

$$\alpha = 0.363 [29]$$

$$\text{Avec, } \varepsilon_0 = \frac{1}{36\pi} 10^{-9} \text{ F/m} = 8.8464261 \times 10^{-12} \text{ F/m} = 8.85 \times 10^{-12} \text{ F/m} [31]$$

$$\varepsilon_{Si} = 11.68 \approx 12 [32]$$

Rappelons qu'on s'intéresse à la détermination du courant thermo-ionique, la mobilité effective et la conductivité dans des couches polycristallines en considérant deux cas d'étude : il s'agit de faire varier le dopage en fixant la taille des grains et faire varier la taille des grains en fixant le dopage, afin de connaître l'influence de ces paramètres sur les propriétés électriques de ces structures. Pour valider le modèle de calcul qui sera utilisé lors de la variation de la taille des grains, on a choisi les taux de dopages utilisés par les travaux de Seto.

III.3.1 L'effet de la variation du taux de dopage (A taille des grains fixe)

III.3.1.1 Barrière de potentiel

La représentation graphique de la hauteur de la barrière de potentiel en fonction de la concentration de dopage est présentée sur la figure III.2, calculée à partir des équations (III.1) et (III.2) données ci-dessus. L'ensemble des résultats calculés sont reportés sur le tableau III.1 ;

L _G (nm)= 20					
N = 5×10 ¹⁸ (/cm ³)		N = 1×10 ¹⁹ (/cm ³)		N = 5×10 ¹⁹ (/cm ³)	
V _b (V)	N (/cm ³)	V _b (V)	N (/cm ³)	V _b (V)	N (/cm ³)
0.000075329	1×10 ¹⁵	0.000075329	1×10 ¹⁵	0.000075329	1×10 ¹⁵
0.00075329	1×10 ¹⁶	0.00075329	1×10 ¹⁶	0.00075329	1×10 ¹⁶
0.0075329	1×10 ¹⁷	0.0075329	1×10 ¹⁷	0.0075329	1×10 ¹⁷
0.075329	1×10 ¹⁸	0.075329	1×10 ¹⁸	0.075329	1×10 ¹⁸
0.1122	1.49×10¹⁸	0.12881	1.70×10¹⁸	0.1370	1.82×10¹⁸
0.01672	1×10 ¹⁹	0.02189	1×10 ¹⁹	0.024952	1×10 ¹⁹
0.001672	1×10 ²⁰	0.002189	1×10 ²⁰	0.0024952	1×10 ²⁰
0.0001672	1×10 ²¹	0.0002189	1×10 ²¹	0.00024952	1×10 ²¹

Tableau III.1 : Résultats de calculs.

A partir du tracé d'une droite passant par l'axe de dopage correspondant au dopage de la couche polycristalline à travers la courbe, le point d'intersection représente la valeur de la hauteur de la barrière de potentiel correspondante (voir figure III.3).

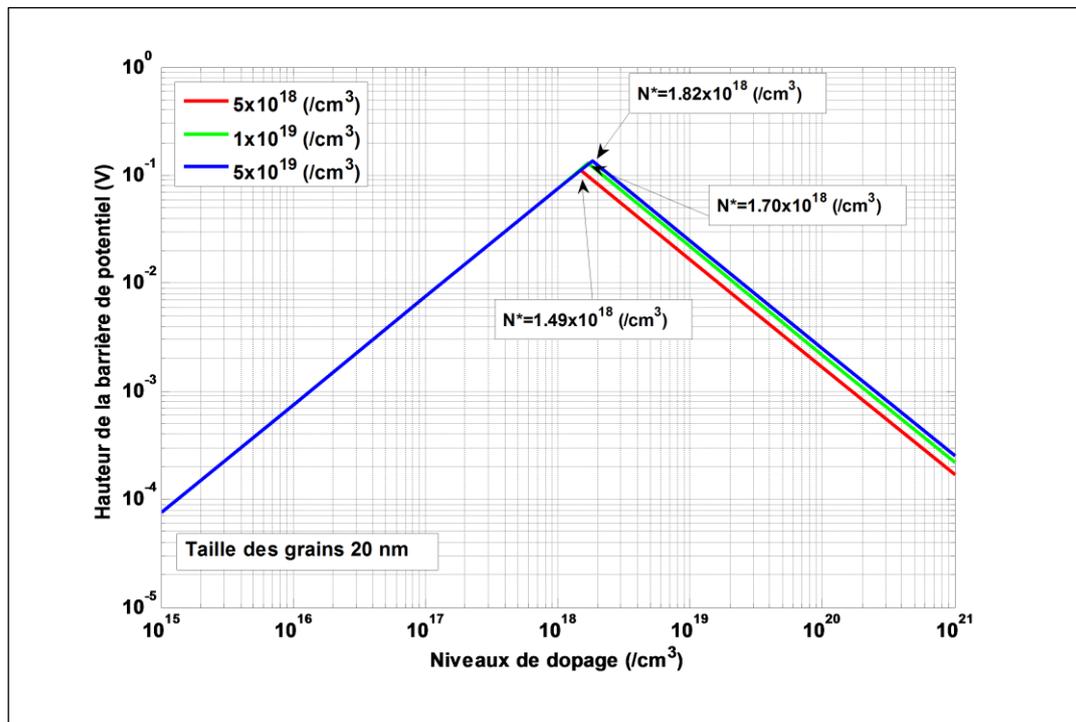


Figure III.2 : La hauteur de la barrière de potentiel en fonction de la variation du taux de dopage.

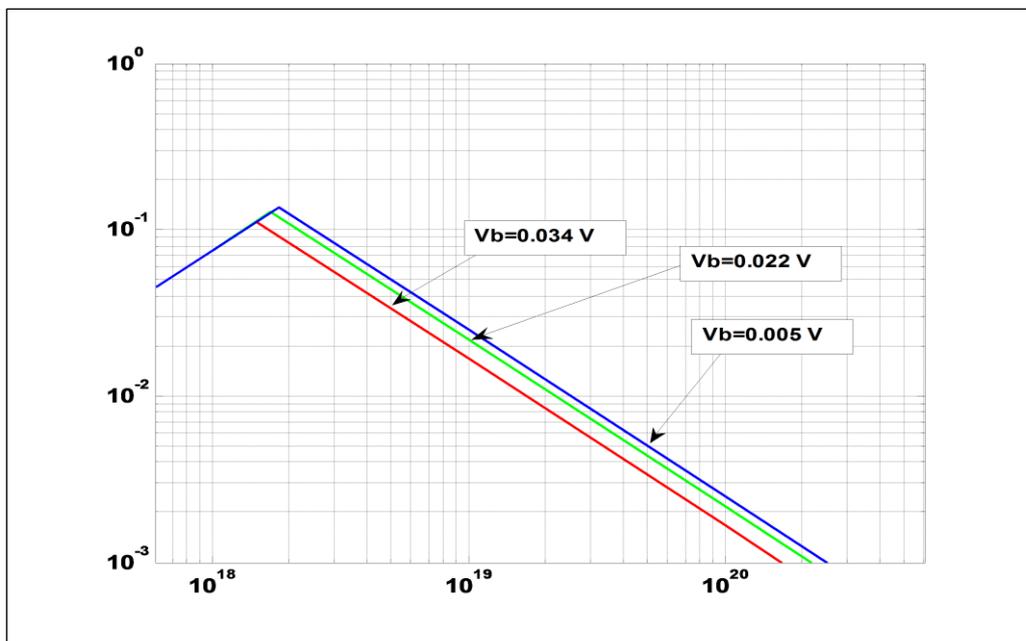


Figure III.3 : Valeurs de la hauteur de la barrière de potentiel repérées.

Sur le tableau III.2, sont reportés les résultats obtenus qui sont en bon accord avec les résultats expérimentaux de Seto.

Concentration de dopants ($/\text{cm}^3$)	Barrière de potentiel (V) (Expérimentales (Seto)/ Théoriques)	Densité d'états pièges $Q_t \approx N_t$	
		Valeurs expérimentales (Seto) ($/\text{cm}^2$)	Valeurs théoriques ($/\text{cm}^2$)
5×10^{18}	0.0335/0.0334	2.98×10^{12}	2.9802×10^{12}
1×10^{19}	0.022	3.41×10^{12}	3.4126×10^{12}
5×10^{19}	0.005	3.64×10^{12}	3.6418×10^{12}

Tableau III.2: Résultats obtenus.

III.3.1.2 Courant thermo-ionique

Sur la figure III.4, est représentée la variation du courant thermo-ionique en fonction de la variation du potentiel appliqué, le choix des valeurs du potentiel (V_a) devait satisfaire la condition imposée par le modèle citée dans le chapitre précédent. On observe un fort décalage entre les trois courbes, en raison de l'augmentation du dopage qui a induit la diminution de la hauteur de la barrière de potentiel, vérifiée sur les résultats obtenus du tableau III.2. Ceci est en bon accord avec les prévisions théoriques.

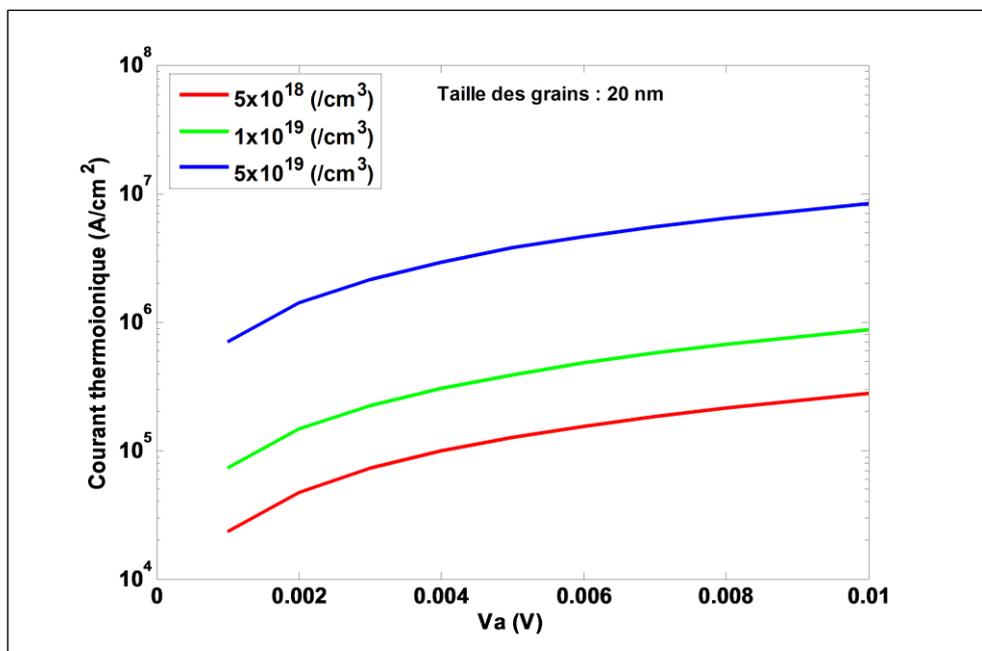


Figure III.4: Représentation du courant thermo-ionique en fonction de la variation du potentiel appliqué.

III.3.1.3 Mobilité effective et conductivité électrique

La figure III.5, représente la variation de la mobilité effective aux niveaux des joints de grains en fonction de la variation du taux de dopage ; l'équation utilisée a été donnée dans le chapitre précédent. Le résultat obtenu sur la figure, confirme l'allure des courbes obtenues du courant thermo-ionique.

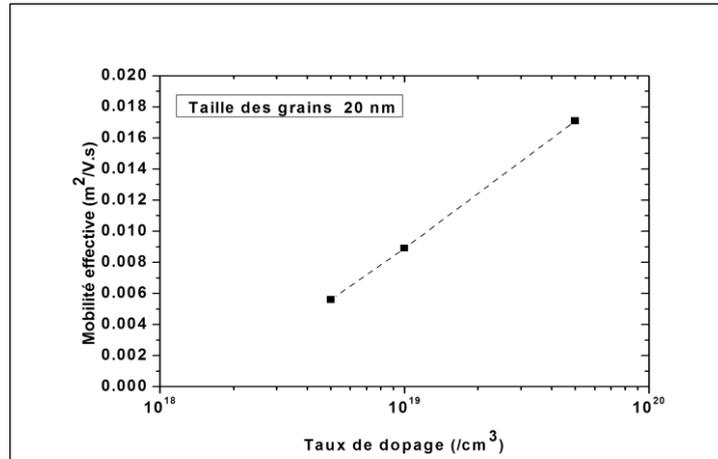


Figure III.5: Mobilité effective en fonction de la variation du taux de dopage.

De même sur la figure III.6, la variation de la conductivité aux niveaux des joints de grains est représentée en fonction de la variation du taux de dopage ; Le résultat obtenu, confirme l'allure des courbes obtenues ci-dessus.

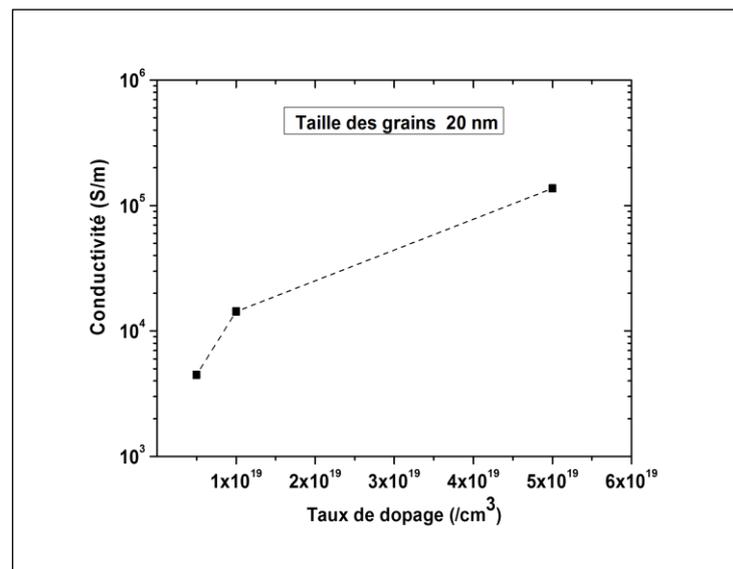


Figure III.6 : Conductivité électrique en fonction de la variation du taux de dopage

III.3.2 L'effet de la variation de la taille des grains (A taux de dopage fixe)

III.3.2.1 Barrière de potentiel

De même, on a procédé de la même manière que précédemment, fixant le dopage à 1×10^{19} (/cm³) et variant la taille des grains ; pour le choix des valeurs, on a commencé par une taille de grains de 20 nm pour pouvoir comparer et ensuite valider les résultats obtenus sur les nouvelles tailles de grains choisies. Les valeurs calculées sont reportées sur le tableau III.3 et représentées sur la figure III.7 ;

L_G = 20 (nm)		L_G = 80 (nm)		L_G = 160 (nm)	
V _b (V)	N (/cm ³)	V _b (V)	N (/cm ³)	V _b (V)	N (/cm ³)
0.000075329	1×10^{15}	0.00120527	1×10^{15}	0.004821	1×10^{15}
0.00075329	1×10^{16}	0.0120527	1×10^{16}	0.04821	1×10^{16}
0.0075329	1×10^{17}	0.120527	1×10^{17}	0.48210	1×10^{17}
0.075329	1×10^{18}	0.3308	2.745×10^{17}	0.53755	1.115×10^{17}
0.12881	1.7×10^{18}	0.090817	1×10^{18}	0.05993	1×10^{18}
0.01672	1×10^{19}	0.0090817	1×10^{19}	0.005993	1×10^{19}
0.001672	1×10^{20}	0.00090817	1×10^{20}	0.0005993	1×10^{20}
0.0001672	1×10^{21}	0.000090817	1×10^{21}	0.00005993	1×10^{21}

Tableau III.3 : Résultats de calculs.

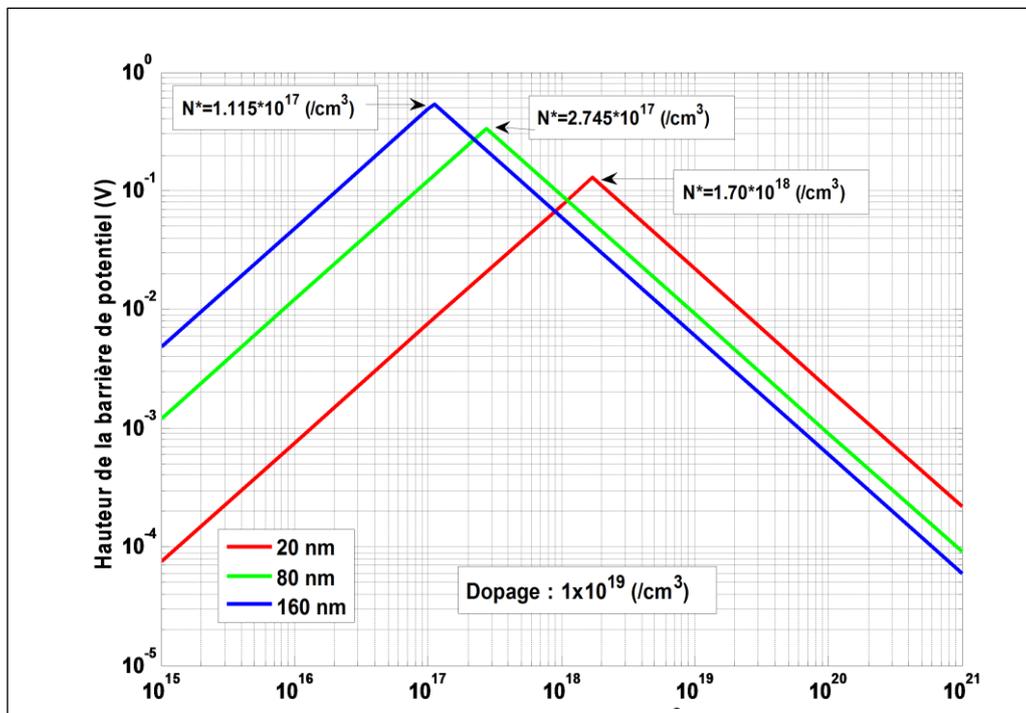


Figure III.7 : Hauteur de la barrière de potentiel en fonction de la variation de la taille des grains.

Les valeurs de la hauteur de la barrière de potentiel correspondante au dopage 1×10^{19} (cm^{-3}) et aux différentes tailles des grains choisies sont déterminées comme précédemment par le point d'intersection de la droite passant par l'axe de dopage correspondant à 1×10^{19} (cm^{-3}) et les différentes courbes tracées (voir figure III.8)

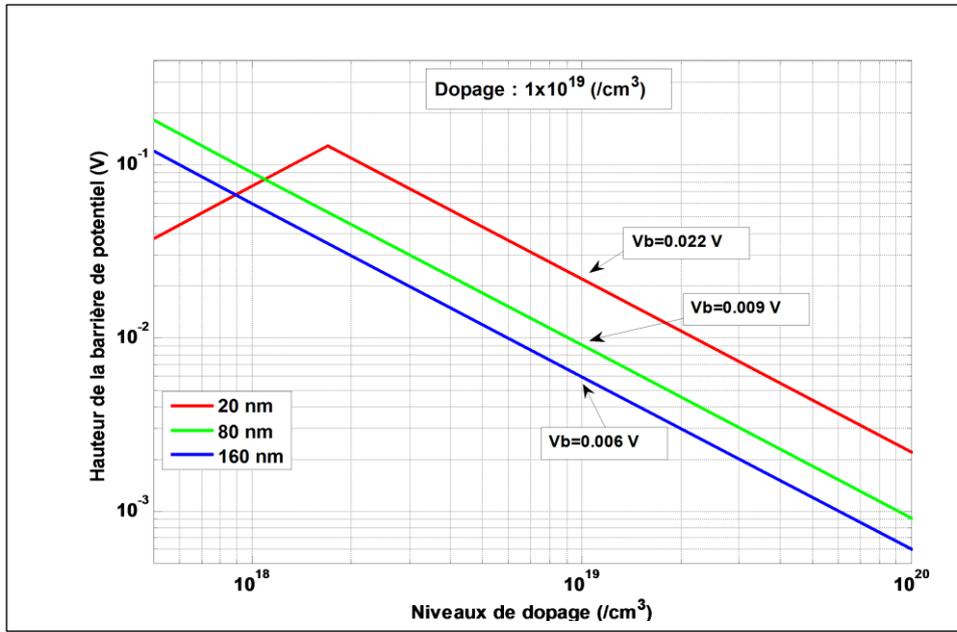


Figure III.8 : Valeurs de la hauteur de la barrière de potentiel repérées.

En résumé, les résultats obtenus sont reportés sur le tableau III.4 ; pour un taux de dopage choisi $N = 1 \times 10^{19}$ (cm^{-3}) et trois tailles de grains : 20 nm, 80 nm et 160 nm. On peut facilement conclure, que l'augmentation de la taille des grains diminue la barrière de potentiel aux niveaux des joints de grains et facilite ainsi le passage des porteurs d'un grain à un autre.

Taille des grains (nm)	Densité d'état de pièges (cm^{-2})	$N^* = Qt/L_G$ (cm^{-3})	Barrière de potentiel (V)
20	3.4126×10^{12}	1.49×10^{18}	0.022
80	2.196×10^{12}	2.745×10^{17}	0.009
160	1.7840×10^{12}	1.115×10^{17}	0.006

Tableau III.4 : Résultats obtenus

III.3.2.2 Courant thermo-ionique

Sur la figure III.9, est représentée la variation du courant thermo-ionique en fonction de la variation du potentiel appliqué, en considérant différentes tailles des grains. Le courant

thermoïonique augmente proportionnellement avec l'augmentation des grains ; ceci est confirmé par les valeurs obtenus de la mobilité et la conductivité, représentés sur les figures III.10 et III.11 ;

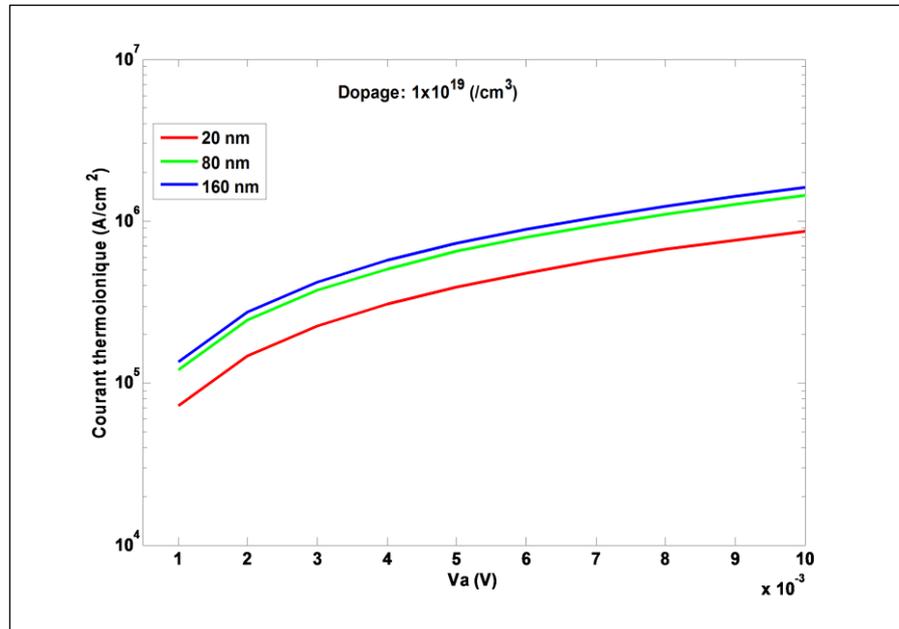


Figure III.9: Courant thermo-ionique en fonction de la variation du potentiel appliqué, lors de la variation de la taille des grains.

III.3.2.3 Mobilité effective et conductivité électrique

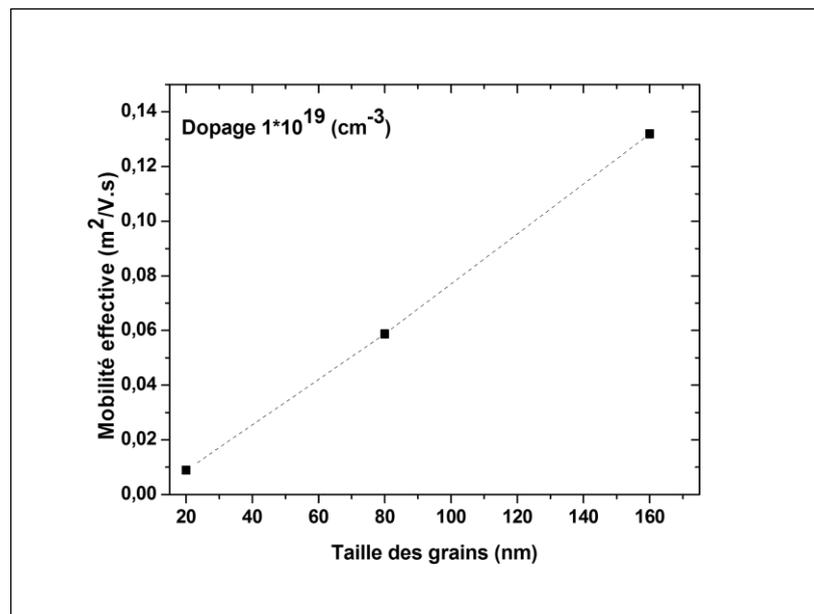


Figure III.10 : Mobilité effective en fonction de la variation de la taille des grains.

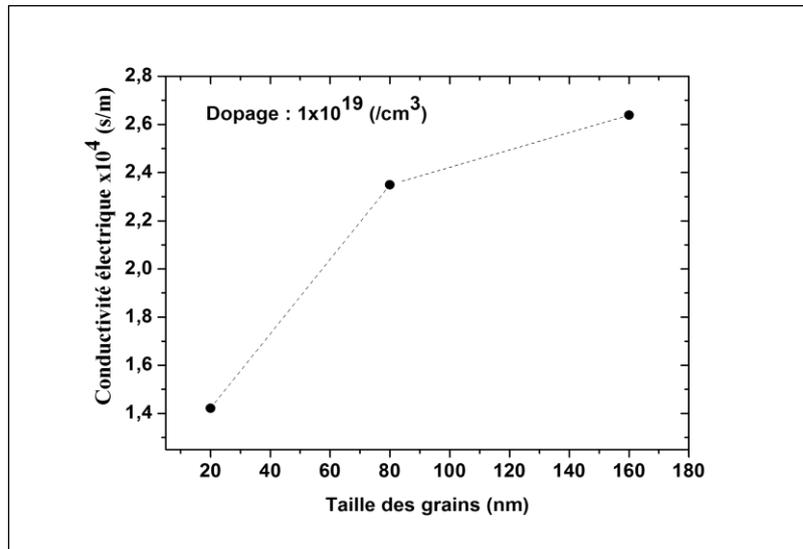


Figure III.11: Conductivité électrique en fonction de la variation de la taille des grains.

III.3.3 Confrontation des résultats avec ceux publiés dans la littérature

La mobilité effective décrit la facilité de déplacement des porteurs d'un grain à un autre et également la restriction du flux de courant par la barrière de potentiel aux joints de grains (V_b). De ce fait, elle dépend considérablement de la concentration de dopage. Dans cette dernière partie de notre travail, nous avons représenté l'allure de la mobilité et le courant thermoïonique en fonction du dopage sur la figure III.12 et la figure III.14 respectivement ; lors de la variation de la taille des grains pour pouvoir valider nos résultats obtenus avec d'autres travaux.

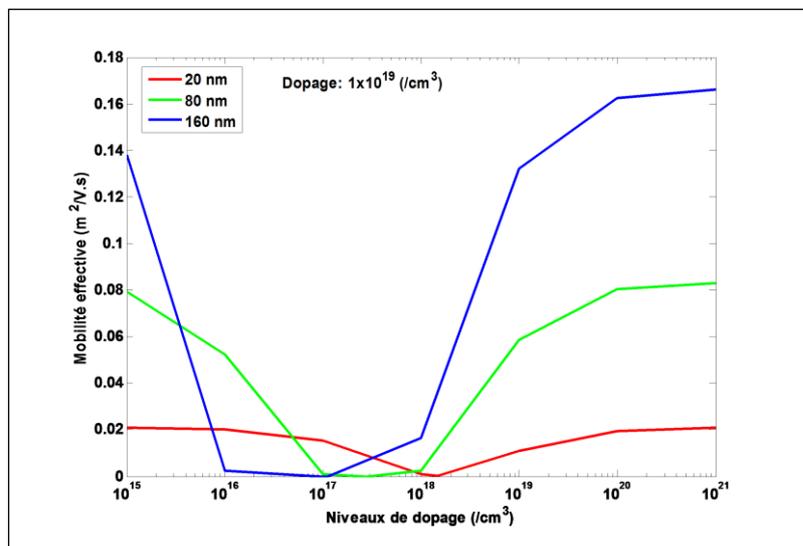


Figure III.12 : Mobilité effective en fonction de la concentration de dopage.

On remarque clairement que celle-ci (la mobilité), présente un minimum pour une concentration de dopage critique 'N*', elle diminue aux faibles dopages (V_b élevée) et augmente ensuite aux concentrations de dopage supérieures à 'N*' (V_b faible). Ce résultat est en bon accord avec d'autres recherches publiées dans la littérature, représentées sur la figure III.13 [29].

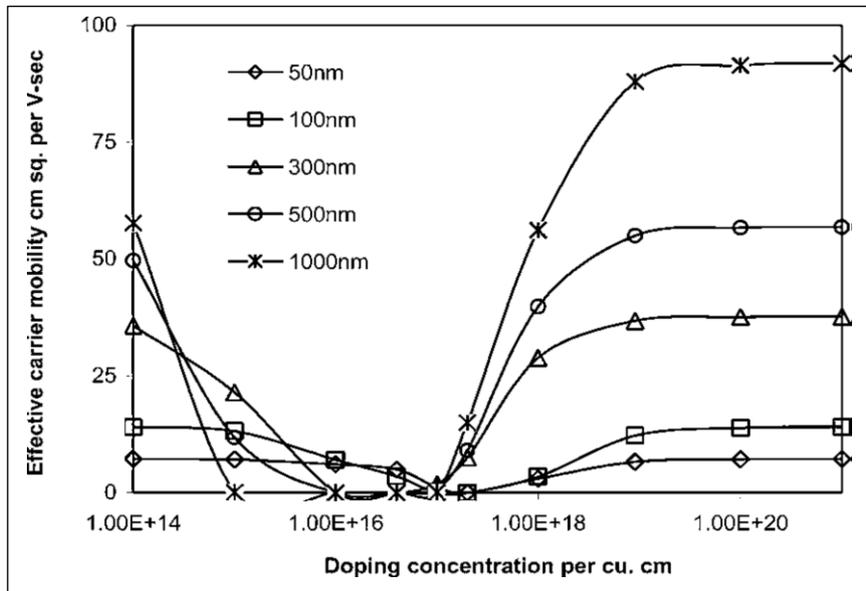


Figure III.13: Mobilité effective en fonction de la concentration de dopage [29].

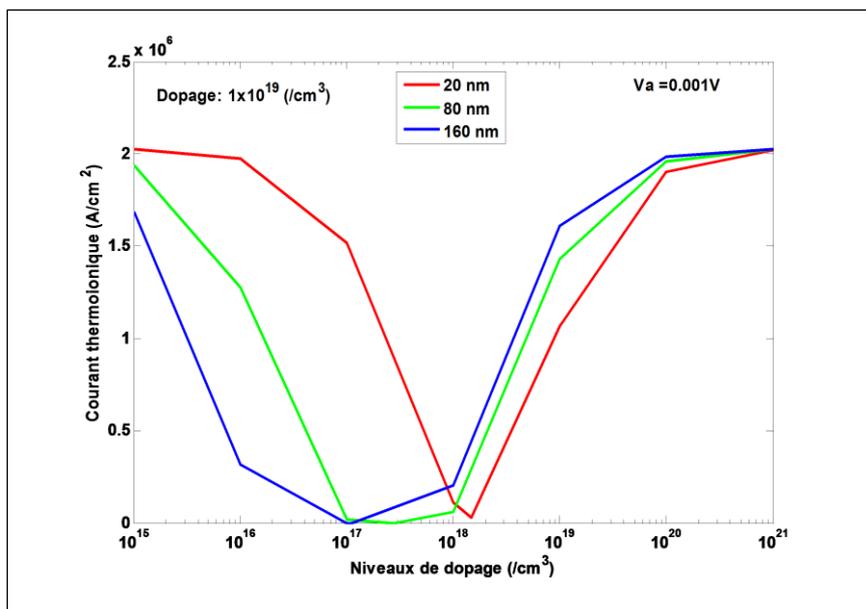


Figure III.14 : Courant thermoïonique en fonction de la concentration de dopage.

On remarque que le graphe du courant thermoïonique est similaire à celui présenté de la mobilité. Pour des niveaux de dopage faibles inférieurs à ' N^* ' le courant décroît, ceci est attribué à l'élévation de la barrière de potentiel atteignant son maximum en constituant un obstacle au passage des porteurs, au-delà de cette valeur, la barrière chute pour les niveaux de dopage élevés et le courant croît.

III. 4 Conclusion

Dans ce troisième chapitre, nous avons présenté les résultats de la simulation en utilisant un modèle standard largement utilisé. Les résultats montrent l'influence de la densité d'états pièges aux niveaux des joints de grains, sur l'estimation de la valeur maximale que peut atteindre la hauteur de la barrière de potentiel. Nous avons également rapporté que le courant thermoïonique, la mobilité et la conductivité évoluent proportionnellement avec la croissance du dopage et la taille moyenne des grains.

Et pour terminer, nous avons validé nos résultats obtenus en les comparant à ceux publiés ultérieurement.

Conclusion générale

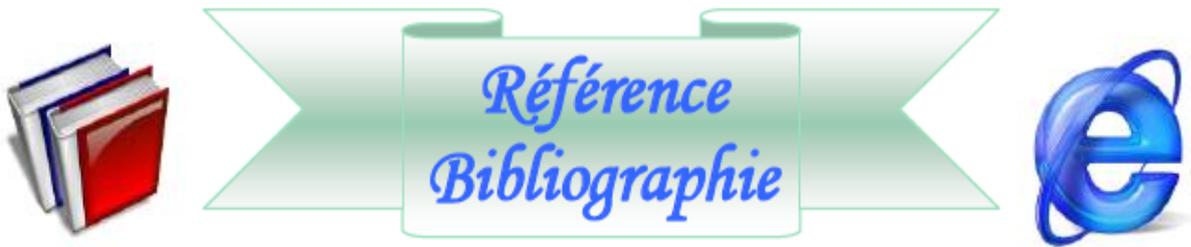
Ce travail de recherche portait sur l'étude et l'utilisation d'un modèle standard, destiné à l'étude de l'influence des joints de grains sur les propriétés physiques et électriques du silicium nanocristallin, polycristallin ou multicristallin ; qui nous a poussé à inspirer une méthode analogique et graphique liée à l'estimation de la hauteur de la barrière de potentiel.

En effet, ce matériau, très utilisé dans divers domaines, présente beaucoup de limitations liées aux joints de grains. Ces derniers forment un chemin privilégié pour une ségrégation rapide des porteurs où ils risquent d'être piégés. Par ailleurs, ces pièges peuvent être chargés électriquement et introduisent non seulement une barrière de potentiel qui s'oppose au passage des porteurs libres mais aussi une zone de déplétion située de part et d'autre du joint de grain.

Pour ce qui est de la hauteur de la barrière de potentiel, les résultats obtenus ont montré que la densité d'états pièges aux niveaux des joints de grains est un paramètre déterminant pour l'estimation de la valeur maximale de cette dernière (barrière). D'autre part, la densité d'états pièges est étroitement liée à la dimension des grains et au taux de dopage. Les propriétés de conduction (ou de transport) représentées par la mobilité effective, la conductivité et le courant thermoionique aux niveaux des joints de grains ont aussi vérifiés cette dépendance.

En conclusion, il s'avère indispensable de diminuer l'activité électrique des défauts aux joints de grains afin de renforcer le potentiel qu'offre le poly silicium ou le multi silicium en couche mince à l'industrie photovoltaïque ou circuits intégrés.

En perspective, il serait intéressant de poursuivre l'étude par une modélisation d'un transistor TFT à base de silicium polycristallin en utilisant les résultats obtenus et en prenant en compte, l'effet de la distribution des pièges (profonds et surfaciques) pour calculer le courant drain.



[1] D. Madi, Etude des propriétés de l'oxydation et de l'hydrogénation du poly silicium et de l'évolution du phénomène d'oxydation, Thèse de Doctorat en Sciences en Electronique, Université Mohammed Seddik Ben Yahia-Jijel, 2012.

[2] S. D. Brotherton, Introduction to Thin Film Transistors, Chapter 8: Poly-Si TFT Performance, DOI: 10.1007/978-3-319-00002-2_8, Springer International Publishing Switzerland, 2013.

[3] B. Rida et N. Cheniti, Modélisation compacte du transistor à effet de champs en couche minces, Mémoire de Master en Electronique, Université de Jijel, 2021.

[4] B. kaghouche, Etude et caractérisation de matériaux à base d'oxyde de silicium pour applications en micro technologies, Thèse de Doctorat en Sciences en Electronique, Université de Constantine, 2014.

[5] H. Milat et M. Mender, Modélisation de la distribution de la densité d'état des pièges dans le silicium polycristallin, Mémoire de Master en Electronique, Université de Jijel, 2019.

[6] D. Béchir, Etude des propriétés optiques, électriques et structurales de nanoparticules de silicium insérées dans une matrice diélectrique et étude de leur intégration pour des cellules photovoltaïques à haut rendement, Thèse de Doctorat, Ecole Doctorale Matériaux de Lyon, 2010.

[7] Kh. Kefif, Elaboration et caractérisation optique des semiconducteurs amorphes et nanocristallin de silicium (A-Si :H, Nc-Si :H) et de carbure de silicium (A-Sic :H, Nc-Sic, H, Thèse de Doctorat en Physique, Université d'Oran 1, 2015.

- [8] F. Boulgamh, Etude du comportement électrique des semiconducteurs multicristallins à base de silicium – Effet des joints de grains, Thèse de Doctorat en Sciences en Electronique Université Mentouri Constantine 1, 2018.
- [9] L. Saci, Etude de la diffusion et de la redistribution du bore dans des films bicouches PolySi/NIDOS destinés à des structures MOS, Thèse de Doctorat en Sciences en Electronique Université Mentouri Constantine, 2009.
- [10] Y. Laghla, Elaboration et caractérisation de couches minces de silicium polycristallin déposées par LPCVD pour application photovoltaïque, Thèse de Doctorat, Université Paul Sabatier de Toulouse, N° 3038, 1998.
- [11] S. Amtablian, Du transfert de films minces de silicium monocristallin vers un procédé cellule à faible budget thermique, Thèse de Doctorat, INSA Lyon, France, 2008.
- [12] J. Poortmans and V. Arkhipov, Thin Film Solar Cells, fabrication, characterization and application, Edition Wiley, England, 2007.
- [13] O.Vetter, F. Finger, R. Carius, P. Houben, O. Kluth, A. Lambertz, A. Much, B. Reh, H. Wagner, Sol. Energy. Mater. Sol. Cell. 62, p 97, 2000.
- [14] P. G. Le Comber, W. Spear, Doped amorphous semiconductors, Topic in Applied Physics Vol 36 eds. M. H. Brodsky, p 251 Springer Verlag, Berlin 1979.
- [15] P. Deruet, M. Laridjani, M. Essamet, Y. Marfaing, J. Dixmier, Journal of Non. Cryst. Physics 59/60, 18, 1983.
- [16] S. T. Kshirsagar, J. S. Lanin, Structural order in Anneal-Stable Amorphous Silicon, Phys. Rev B25, 2916, 1982.
- [17] R. Meaudre, P. Jensen et M. Meaudre, Metastable effects in the DC conductivity of undoped glow discharge and Sputtered Hydrogenated Amorphous Silicon, Phys. Rev., B 38,12449, 1988.

- [18] P. A. Fedders, R. Fisch, R. E. Norberg, [Dense H₂ and proton NMR in a-Si:H](#), Phys. Rev B 31, 6887, 1985.
- [19] Y. J. Chabal, C. K. N. Patel, [Internal reflection spectroscopy](#), Phys, Rev. Lett 53,210, 1984.
- [20] M. Stutzmann, W. B. Jackson et C. C. Tsai, Mécanismes de formation des défauts dans le a-Si:H à l'équilibre et sous l'illumination, Phys, Rev. B 32, 23, 1985.
- [21] R. A. Street et K. Winer, [Defect equilibria in undoped a-Si:H](#), Phys, Rev. B40, 6236, 1989.
- [22] J. Y. W. Seto, The electrical properties of polycrystalline silicon films, Journal of Applied Physics, vol. 46, no. 12, 1975.
- [23] M. Bouaziz et F. Amrouni, Modélisation d'un transistor TFT à canal à base de silicium polycristallin, Mémoire de Master en Electronique, Université de Jijel, 2020.
- [24] I. Rouag, Etude de comportement de la capacité d'une diode polycristalline latérale, Université de Mohamed Boudiaf de Msila, 2016.
- [25] T. I. Kamins, Hall mobility in chemically deposited polycrystalline silicon, J. Appl, Phys. 42 (11), p. 4357, 1971.
- [26] G. Baccarani, B. Riccò, Transport properties of polycrystalline silicon films, J. Appl, Phys, 49, p. 5565–5571, 1978.
- [27] J. P. Colinge et al., Grain size and resistivity of LPCVD polycrystalline silicon films, J. Electrochem. Soc. 128, Sep 1981, 2009-2014.
- [28] T. Kamins, Polycrystalline silicon for integrated circuits applications, Stanford University, 1988 by Kluwer Academic Publishers.

[29] N. Gupta, B. P. Tyagi, An analytical model of the influence of grain size on the mobility and transfer characteristics of polysilicon thin film transistors (TFTs), *Physica Scripta*. Vol. 71, 2005, 225-228.

[30] Bing-Hui Yan, Bin Li, Ruo-He Yao, et Wei-Jing Wu, A physics-based effective mobility model for polycrystalline silicon thin film transistor considering discontinuous energy band at grain boundaries, *Japanese Journal of applied Physics* 50, 2011, 094302.

[31] https://fr.wikipedia.org/wiki/Permittivit%C3%A9_du_vide .

[32] <https://perso.telecom-paristech.fr/urien/CE2011.pdf> .

Propriétés de conduction dans des films multicristallins

Présenté par :

CHELLOUCHE Asma
ABADA Imen

Rapporteur :

MERABET Souad

Résumé

Ce travail de recherche porte sur l'utilisation d'un modèle standard, destiné à l'étude de l'influence des joints de grains, sur les propriétés de transport dans le silicium nanocristallin, polycristallin ou multicristallin ; qui nous a poussé à inspirer une méthode analogique et graphique liée à l'estimation de la hauteur de la barrière de potentiel. Pour ce qui est de la hauteur de la barrière de potentiel, les résultats obtenus ont montré que la densité d'états pièges aux niveaux des joints de grains est un paramètre déterminant pour l'estimation de la valeur maximale de cette dernière (barrière). D'autre part, la densité d'états pièges est étroitement liée à la dimension des grains et au taux de dopage. Les propriétés de conduction (ou de transport) représenté par la mobilité effective, la conductivité et le courant thermoionique aux niveaux des joints de grains ont aussi vérifiés cette dépendance.

Mots clé : Barrière de potentiel, joints de grain, taille des grains, taux de dopage.

ملخص

يركز هذا البحث على استخدام نموذج معياري مخصص لدراسة تأثير حدود الحبوب على خصائص النقل في السيليكون النانوي أو متعدد البلورات؛ الأمر الذي دفعنا إلى إلهام طريقة تناظرية ورسومية تتعلق بتقدير ارتفاع حاجز القدرة. بالنسبة لارتفاع حاجز القدرة، أظهرت النتائج المتحصل عليها أن كثافة حالات المصيدة عند حدود الحبوب هي معامل محدد لتقدير القيمة القصوى لهذه الأخيرة (الحاجز). من ناحية أخرى، ترتبط كثافة حالات المصيدة ارتباطاً وثيقاً بحجم الحبوب ومعدل تعاطي الشوائب. كما أن خصائص التوصيل (أو النقل) التي تمثلها الحركة الفعالة والتوصيل والتيار الحراري عند حدود الحبوب أثبتت أيضاً هذا الاعتماد.

الكلمات المفتاحية : حاجز القدرة , حدود الحبوب , حجم الحبوب , معدل الشوائب

Abstract

This paper focuses on the use of a standard model dedicated to studying the grain boundaries effect on the transport properties of nano or polycrystalline silicon; Which prompted us to inspire an analog and graphical method to estimating the height potential barrier. For the height potential barrier, the obtained results showed that the traps density states at the grain boundaries is a limiting parameter for estimating the maximum value of the latter (the barrier). On the other hand, the density traps states are closely related to the grain size and the concentration of dopant. The conduction (or transport) properties represented by the effective mobility, conductivity and thermionic current at the grain boundaries also prove this dependence.

Keywords : Potential barrier, Grain boundary, Grains size, Doping level.