

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



Université El-hadj Lakhdar BATNA 1

Faculté des Sciences de la Matière
Département de Physique



THÈSE

Présentée en vue de l'obtention du
Diplôme de Doctorat

Par:

Benaïcha Mouna

Thème :

**Contribution à l'étude des propriétés physiques et électriques des
composés semi-conducteurs III-V. Application à l'effet
photovoltaïque.**

Spécialité : Physique Des Matériaux Métalliques et Semi-conducteurs

Soutenu le : 10/07/2018

Devant la commission d'examen composée de :

M. Belbacha Eldjemai	Prof, Université de Batna 1	Président
M. Dehimi Lakhdar	Prof, Université de Batna 1	Rapporteur
M. Athamna Nouredine	MCA, Université de Batna 2	Examineur
M. Saadoune Achour	MCA, Université de Biskra	Examineur
M. Bekhouche Khaled	MCA, Université de Biskra	Examineur

Résumé

Les cellules solaires à haut rendement étant souvent basées sur la technologie des semi-conducteurs III-V, on vise dans ce travail à améliorer les performances des cellules solaires en utilisant de nouveaux matériaux et de nouveaux concepts. L'objectif principal de ces recherches est de minimiser le coût de fabrication et d'augmenter le rendement de ces photopiles. L'utilisation des cellules multi-jonctions (Tandem), qui repose sur le concept de conversion multi-spectrale, conduit à une meilleure exploitation du spectre solaire, en élargissant la gamme utile du spectre.

Des cellules photovoltaïques de type III-V /Ge comme (GaInP/GaAs/Ge) existent, mais leur coût trop élevé les rend incompatibles avec des applications « grand public ». L'intégration monolithique de III-V sur Si permettrait de réduire sensiblement le coût de fabrication des cellules III-V en diminuant le coût du substrat, et constituerait un pas vers la démocratisation des applications solaires à fort rendement.

Dans ce contexte, nous avons étudiés le fonctionnement des cellules photovoltaïques Tandem à base des semi-conducteurs III-V/Si par la simulation numérique à deux dimensions sous éclairage avec un spectre AM1.5 effectuées sous Silvaco/Atlas. Nous définissons une cellule de référence avec un ensemble de paramètres physiques, afin d'analyser leurs influences sur le rendement de conversion.

Mots clés : Semi-conducteur III-V, cellule solaire, Tandem, simulation numérique, Atlas /Silvaco

Abstract

Because high-efficiency solar cells are often based on III-V semiconductor technology, the goal is to improve the performance of solar cells by using new materials and concepts. The main objective of this research is to minimize the manufacturing cost and increase the efficiency of these solar cells. The use of multi-junction cells (Tandem), which is based on the concept of multi-spectral conversion, leads to a better exploitation of the solar spectrum, by widening the useful range of the spectrum.

Type III-V / Ge photovoltaic cells such as (GaInP / GaAs / Ge) exist, but their high cost makes them incompatible with "general public" applications. The monolithic integration of III-V on Si would significantly reduce the manufacturing cost of III-V cells by reducing the cost of the substrate, and would be a step towards the democratization of high-efficiency solar applications.

In this context, we studied the operation of Tandem photovoltaic cells based on III-V / Si semiconductors by two-dimensional digital simulation under illumination with an AM1.5 spectrum performed under Silvaco / Atlas. We define a reference cell with a set of physical parameters, in order to analyze their influences on conversion efficiency.

Keywords: III-V Semi-conductors, solar cell, Tandem, numerical simulation, Atlas/Silvaco

Remerciements

Le travail présenté dans cette thèse a été effectué au Département de Physique, faculté des sciences, Université de Batna 1.

Il m'est agréable d'exprimer ma profonde reconnaissance à monsieur Lakhdar Dehimi, professeur à l'université de Batna 1 pour ses encouragements, de son expérience dans l'orientation et la direction de ce travail.

Monsieur le professeur, Eldjemai Belbacha, qui m'a fait l'honneur de présider le jury de cette thèse, je lui exprime mon respect et mes sincères remerciements.

Je tiens aussi à exprimer ma gratitude à monsieur N.Athamna, MCA à l'université de Batna 2, d'avoir accepté d'être examinateur.

J'exprime de même mes remerciements les plus sincères aux honorables membres de jury: Monsieur Bekhouche Kheled, MCA à l'université de Biskra et monsieur Saadoune Achour, MCA à l'université de Biskra d'avoir accepté d'être examinateurs.

Liste des symboles

Paramètres généraux			
c	Vitesse de la lumière dans le vide	299 792 458	m.s^{-1}
ϵ_0	Permittivité du vide	$8,85 \times 10^{-12}$	F.m^{-1}
h	Constante de Planck	$4,136 \times 10^{-15}$	eV.s
k	Constante de Boltzmann	$8,617 \times 10^{-5}$	eV.K^{-1}
m_0	Masse d'un électron	0,511	MeV.c^{-2}
e	Charge élémentaire	$1,602 \times 10^{-19}$	C
T	Température		K
v	vitesse de la lumière dans le matériau		m.s^{-1}
η	Rendement de conversion d'énergie d'une cellule		s.d (%)
Paramètres structurels			
a	Paramètre de maille d'un cristal dans le plan		Å
c	Paramètre de maille d'un cristal selon l'axe c		Å
e_{33} et e_{31}	Coefficients piézoélectriques		C.m^{-2}
1	Déformation dans le plan		s.d
3	Déformation selon l'axe c		s.d
u	Paramètre interne		Å
Paramètres électriques			
B	Paramètre de courbure dans la loi de Vegard		eV
D	Coefficient de diffusion des porteurs		$\text{cm}^{-2}.\text{s}^{-1}$
n	Densité d'électrons en excès dans un matériau N		cm^{-3}
p	Densité des trous en excès dans un matériau P		cm^{-3}
ϵ_r	Permittivité relative du matériau		F.m^{-1}
$E \leftrightarrow$	Champ électrique		V.m^{-1}
E_c	Energie minimale de la bande de conduction		eV
$E_F \leftrightarrow E_i$	Niveau de Fermi		eV
E_g	Gap d'énergie interdite d'un matériau		eV
E_v	Energie maximale de la bande de valence		eV
FF	Facteur de forme d'une caractéristique courant-tension		s.d
I	Courant		A
I_{cc}	Courant de court-circuit		A
$I_m = I_{\max}$	Courant maximum fourni par une cellule		A
I_{obs}	Courant d'obscurité		A
I_{ph}	Courant photo-généré		A
I_s	Courant de saturation		A
J	Densité de courant		A.cm^{-2}
L	Longueur de diffusion		M
m_e	Masse d'un électron dans la bande de conduction		MeV.c^{-2}
m_h	Masse d'un trou dans la bande de valence		MeV.c^{-2}
N_a	Densité de dopants accepteurs ionisés dans un matériau P		cm^{-3}
N_c	Densité d'états au bord de la bande de conduction		cm^{-3}
N_d	Densité de dopants donneurs ionisés dans un matériau N		cm^{-3}
N_v	Densité d'états au bord de la bande de valence		cm^{-3}

n	Densité d'électrons libres	cm^{-3}
$n_i \leftrightarrow n_{ie}$	Densité de porteurs libres intrinsèques	cm^{-3}
n_{p0}	Densité des électrons minoritaires à l'équilibre thermodynamique	cm^{-3}
p	Densité de trous libres	cm^{-3}
P_{in}	Puissance incidente	W.m^{-2}
p_{n0}	Densité des trous minoritaires à l'équilibre thermodynamique	cm^{-3}
$P_m = P_{max}$	Puissance fournie par la cellule	W
R_s	Résistance de série	Ω
R_{sh}	Résistance parallèle	Ω
N	Densité totale de charges	C.m^{-3}
S	vitesse de recombinaison en surface	cm.s^{-1}
τ	Temps de vie des porteurs	s
μ	Mobilité des porteurs	$\text{cm}^2.\text{V}^{-1}.\text{s}^{-1}$
V	Tension	V
V_{co}	Tension de circuit ouvert	V
$V_m = V_{max}$	Tension maximal de la cellule	V
χ	Affinité électronique	eV

Paramètres optiques

α	Coefficient d'absorption	cm^{-1}
K	Coefficient d'extinction (atténuation)	s.d
n	Indice de réfraction	s.d
R	Coefficient de réflexion	s.d
T	Coefficient de Transmission	s.d
ν	Fréquence de la lumière	Hz
λ	Longueur d'onde d'un photon	nm

Paramètres thermiques

α	Expansion thermique	s.d
κ	Conductivité thermique	$\text{W.cm}^{-1}.\text{K}^{-1}$
R_{th}	Résistance thermique	K.W^{-1}

SOMMAIRE

Introduction générale	01
<u>Chapitre I</u>	
Les matériaux semi-conducteurs III-V	
I.1 Introduction	05
I.2 Définition des semi-conducteurs III-V	05
I.3 Les composés binaires, ternaires et quaternaires des S/C III/V	06
I.3.1 Les composés binaires	06
I.3.2 Les composés ternaires et quaternaires	07
I.4 Matériau InGaN	07
I.4.1 Caractéristiques structurelles	08
a. Structure cristalline	08
b. Polarisation interne et piézoélectrique	10
Polarisation interne	10
Polarisation piézoélectrique (induite)	12
I-4-2. Propriétés électriques	14
I-4-2-1. Gap d'énergie interdite dans les nitrures	16
I-4-2-2. Evolution du gap d'énergie dans l' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$	17
I-4-2-3. Evolution du gap d'énergie interdite en fonction de la température	19
I-4-2-4. Concentration d'électrons dans les nitrures	20
I-4-2-5. Mobilité des porteurs dans les nitrures	22
I-4-2-6. Longueur de diffusion	23
I-4-3. Propriétés optiques	25
I-4-4. Propriétés thermiques	30
I-4-5. Croissance et substrats	31
a. Croissance sur saphir	31
b. Croissance sur SiC	33
c. Croissance sur AlN	35
d. Croissance sur ZnO	35
e. Croissance sur Si	36
f. Croissance sur verre	37

I-5. Le matériau GaInP	39
I-5-1. Propriétés du matériau GaInP	40
I-5-2. Mobilité des porteurs	41
I-5-3. Durée de vie des porteurs minoritaires	42
I-5-4. Propriétés optiques	43
a- Indice de réfraction et coefficient de réflexion	43
b- Coefficient d'absorption de GaInP	45
I-5-5. Résistivité thermique du matériau GaInP	46
I-6. L'Arséniure de Gallium (GaAs)	46
I-6-1. Structure cristalline d'Arséniure de Gallium (GaAs)	46
I-6-2. Propriétés électriques et physiques du GaAs	47
I-6-3. Structure des bandes d'énergie de GaAs	48
I-6-4. Mobilité des porteurs	49
I-6-5. Durée de vie des porteurs minoritaires	50
I-6-6. Propriétés optiques	51
a- Indice de réfraction et coefficient de réflexion	51
b- Coefficient d'absorption de GaAs	51
I-7. Conclusion	52
I-8. Références bibliographiques	53

Chapitre II

La conversion photovoltaïque

II-1. Introduction	58
II-2. Spectre solaire et l'air masse	59
II-2-1. L'air masse	60
II-2-2. Spectre solaire	61
II-3. Description de la structure d'une cellule solaire	62
II-4. Principe de fonctionnement d'une cellule solaire	63
II-5. Caractéristique I-V d'une cellule solaire	64
II-5-1. Caractéristique I-V sous obscurité	65
II-5-2. Caractéristique sous ensoleillement	65
II-5-2-1. Caractéristique (J-V) dans le cas idéal	66
II-5-2-1-1. Paramètres photovoltaïques d'une cellule solaire dans le cas idéal	67

II-5-2-2. Caractéristique (J-V) dans le cas réel	72
II- 6. Cellules solaires à multi-jonctions	73
II- 6- 1. Pourquoi la cellule à Multi-jonctions	73
II- 3- 1. Système Multi-spectrale	75
II- 3- 2. Système à empilement mécanique (mechanically stacked MSC)	76
II- 3- 3. Cellule monolithique (Tandem, Cascade ou Multicolore MC)	77
II-4. Les défis de fabrication d'une cellule solaire tandem	79
II-5. Limite théorique dans la conception des cellules solaires à multi-jonctions	86
II-6. Conclusion	87
II-7. Références bibliographiques	88

Chapitre III

Revue des modèles physiques utilisés dans la simulation numérique

III-1. Introduction	92
III-2. Equations fondamentales dans les semi-conducteurs	92
III-2-1. Equation de Poisson	93
III-2-2. Equations de continuité	93
III-2-3. Equations de transport	94
III-2-3-1. Diffusion	95
III-2-3-2. Drift	96
III-3. Génération optique	96
III-4. Mécanismes de recombinaison	97
III-4-1. Recombinaison SRH (Schokley-Read-Hall)	98
III-4-2. Recombinaison Auger	100
III-4-3. Recombinaison Radiative	103
III-4-4. Recombinaison en surface	103
III-5. Les modèles de Mobilité	105
III-5-1. Modèle de la mobilité « Masetti »	105
III-5-2. Modèle de la mobilité « Caughey et Thomas »	106
III-5-3. Modèle de la mobilité « Canali »	108
II-6. Rétrécissement de la bande interdite (Bandgap-Narrowing)	108
III-7. Conclusion	110
III-8. Références bibliographiques	111

Chapitre IV

Résultats et interprétations

IV1 Introduction	113
IV.2 Tandem monolithique $\text{In}_{0.46}\text{Ga}_{0.54}\text{N}/\text{Si}$	113
IV.2.1 Description de la structure	113
IV.2.2 Paramètres de simulation	114
IV-3 Simulation de la cellule inférieure (Si)	116
IV-4 Simulation de la cellule supérieure ($\text{In}_{0.46}\text{Ga}_{0.54}\text{N}$)	120
IV.5 La jonction tunnel	121
IV.6 La cellule empilée mécaniquement (MECHANICALLY STACKED TANDEM CELL)	122
IV.7 Simulation de la cellule tandem monolithique ($\text{In}_{0.46}\text{Ga}_{0.54}\text{N}/\text{Si}$)	125
IV.7.1 Optimisation des paramètres	128
IV.7.1.1 Influence des paramètres de la cellule supérieure	128
a. L'épaisseur de la base	128
b. Le dopage de la base	129
c. Le dopage de l'émetteur	131
IV.7.1.2 Influence des paramètres de la cellule inférieure	132
a. L'épaisseur de l'émetteur	132
b. Le dopage de l'émetteur	133
c. Le dopage de la base	134
d. L'épaisseur de la base	135
IV-7-1-3. Influence de la jonction tunnel	135
a. Le matériau de la jonction tunnel	135
b. L'épaisseur de la jonction tunnel	136
IV- 8. Tandem monolithique ($\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{P}/\text{Si}$)	138
IV-8-1. Description de la structure	138
IV-8-2. Paramètres de simulation	139
IV-8-3. Simulation des cellules individuelles	140
IV-8-4. Simulation de la jonction tunnel	141
IV-8-5. Simulation de la cellule empilée mécaniquement	142
IV-9. Simulation de la cellule tandem monolithique ($\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{P}/\text{Si}$)	144
IV- 10. Etude de l'effet de la température sur la cellule solaire	146

IV- 10- 1. Effet de la température sur les propriétés des matériaux	146
IV- 10- 2. Effet de la température sur la cellule solaire tandem optimisée (InGaN/Si)	147
IV- 10- 3. Effet de la température sur la cellule solaire tandem optimisée (GaInP/Si)	149
IV- 11. Conclusion	151
IV- 12. Références bibliographiques	152
Conclusion générale	154

Introduction Générale

Selon la majorité des prévisionnistes, la consommation d'énergie primaire commerciale devrait doubler d'ici 2030, puis tripler aux environs de 2050[1]. Cependant, la plupart de l'énergie électrique est produite par combustion de ressources non renouvelables [2] (Fig.1) : Pétrole 31.7%, Charbon 28.1%, Gaz naturel 21.6%, nucléaire 4.9%). De plus, ce type de production d'électricité est principalement responsable de la production de CO₂ rejet dans l'atmosphère engendrant le phénomène de l'effet de serre qui confronte la planète aux phénomènes de réchauffement climatique [3]. C'est pour cette raison que la production d'énergie est une problématique centrale de notre société.

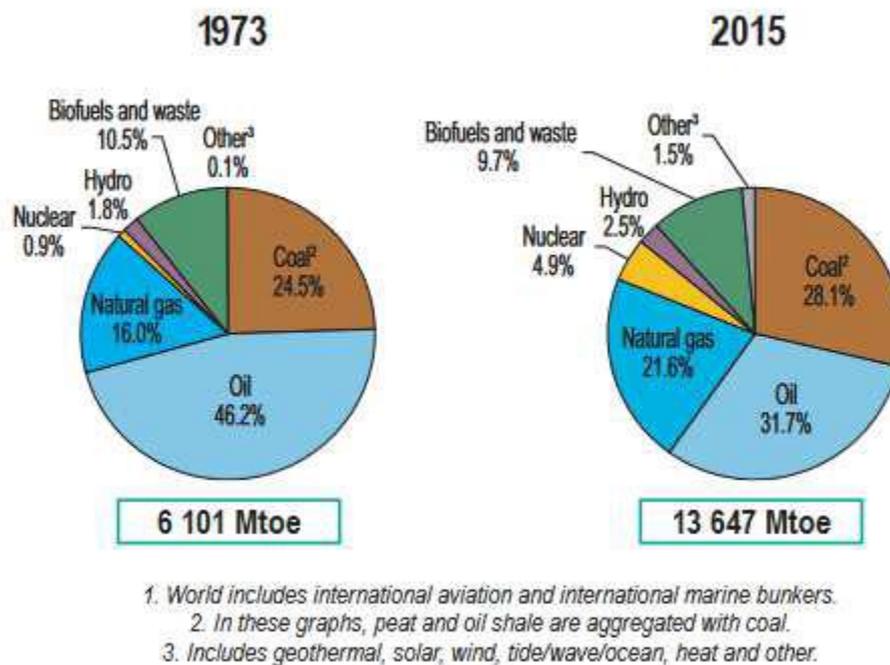


Figure I : Evolution de la production d'énergie primaire (en millions de tep) par source

Source: Key World Energy Statistics, IEA – 2017[2]

* «Autres» comprend l'énergie géothermique, énergie solaire, éolienne, thermique, etc

Actuellement, l'évolution de l'électricité est caractérisée par une croissance active du marché des énergies renouvelables et une part croissante d'électricité renouvelable. Parmi ces sources d'énergies, on compte l'énergie hydroélectrique, l'énergie géothermique, l'énergie éolienne, l'énergie de la biomasse et l'énergie photovoltaïque. Cette stratégie pose les jalons d'un futur approvisionnement énergétique renouvelable.

L'une des énergies renouvelable très utilisée dans le monde, non polluante, est le solaire photovoltaïque. Ce dernier reposant sur la transformation directe des rayons lumineux du soleil en électricité possède un potentiel important parmi les différentes énergies renouvelables. En effet, la puissance du rayonnement solaire au niveau du sol est d'environ 950 Watt/m² [4].

L'énergie solaire présente, outre tous les avantages des énergies renouvelables, ses propres avantages, à savoir :

- Energie maîtrisable et adaptable aux situations de toutes les régions
- Frais de maintenance relativement faibles
- Permette de produire l'énergie électrique sans dégrader l'environnement
- Constitue des ressources pratiquement inépuisables.
- Les systèmes exigeant peu d'entretien, sont fiables, non polluants et silencieux [5]

Aujourd'hui, la production d'électricité photovoltaïque est largement dominée par le silicium avec 95 % des panneaux photovoltaïques installés (monocristallin, poly-cristallin et couche mince) [6]. Cependant, ces panneaux commerciaux souffrent d'un faible rendement moyen, environ 13 % (entre 12 et 18 % pour le monocristallin, entre 12 et 15 % pour le poly-cristallin et entre 6 et 9 % pour les couches minces [7]). C'est pourquoi de nombreuses recherches se tournent vers l'augmentation de l'efficacité des panneaux en silicium (nanostructures, couches minces, etc.) et vers des matériaux alternatifs possédant un meilleur rendement (les matériaux semi-conducteurs III-V). Généralement, ces nouveaux matériaux sont déposés en couches minces (quelques centaines de nanomètres), mais présentent toujours des rendements intéressants, réduisant ainsi les coûts de production.

Objectifs du travail de thèse

L'optimisation des performances des cellules solaires liée à une réduction des coûts reste un problème clé pour la production industrielle. En effet, le paramètre principal limitant le rendement des cellules solaires réside dans leur spectre d'absorption inadéquat avec le spectre solaire incident, pour palier à la sensibilité spectrale des cellules solaires afin d'augmenter leur gamme d'absorption spectrale [8]. La solution proposée était la cellule solaire III-V à multi-jonction.

Des cellules photovoltaïques de type III-V /Ge comme (GaInP/GaAs/Ge) existent, mais leur coût trop élevé les rend incompatibles avec des applications « grand public ». L'intégration monolithique de III-V sur Si permettrait de réduire sensiblement le coût de fabrication des cellules III-V en diminuant le coût du substrat, et constituerait un pas vers la démocratisation des applications solaires à fort rendement [9].

Dans ce travail, nous proposons d'étudier deux structures de cellule solaire à base de matériau III-V/Si : la première structure ($\text{In}_{0.46}\text{Ga}_{0.54}\text{N/Si}$) et la deuxième ($\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{P/Si}$).

Organisation de la thèse

Le travail de la thèse est présenté de la manière suivante :

Le premier chapitre décrit les matériaux semi-conducteurs III-V ainsi que les principales propriétés des alliages : InGaN, InGaP, et GaAs.

Le deuxième chapitre présente des notions importantes sur le photovoltaïque, il explique le fonctionnement d'une cellule solaire, ses caractéristiques sous obscurité et sous ensoleillement, Ensuite, il présente les cellules solaires à multi-jonctions en matériaux III-V.

Dans le troisième chapitre, nous abordons une présentation des modèles physiques utilisés dans la simulation numérique. Dans une première partie, nous présentons les équations fondamentales dans les semi-conducteurs. Dans une seconde partie, nous nous concentrons sur quelques points particulièrement intéressants tels que la recombinaison qui correspond aux mécanismes conduisant à la perte de paires électron-trou et nous exposons les modèles de mobilité des porteurs de charges. Nous terminerons par la description des modèles de rétrécissement de la bande interdite.

Les résultats de simulations des cellules solaires à base des semi-conducteurs III-V/Si sont illustrés dans le quatrième chapitre.

Ce travail se termine par une conclusion générale des résultats obtenus au cours de la thèse.

Références bibliographiques

- [1] P.PAPET « *Nouveaux concepts pour la réalisation de cellules photovoltaïques à contacts interdigités sur substrats mince en silicium cristallin* » Thèse de doctorat, l'Institut National des Sciences Appliqués de Lyon, 2007
- [2] International Energy Agency (IEA). *Key World Energy Statistics*. 2017.
- [3] H.REEVES ; « *Mal de Terre* », science ouverte, éditions du seuil, mars 2003
- [4] OBSERV'ER. « *Baromètre du Solaire Photovoltaïque* », Système Solaires, Avril 2004, N° 160, pp.68-83.
- [5] J.F.LELIEVRE, « *Elaboration de SiNX : H par PECVD : optimisation des propriétés optiques, passivantes et structurales pour application photovoltaïques* », thèse de doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 2007.
- [6] Les technologies de fabrication des modules. *Photovoltaïque.info*.
<http://www.photovoltaïque.info/Les-differentes-technologies.html>.
- [7] ADEME. Energies et matières renouvelables - Solaire photovoltaïque. *Agence de l'environnement et de la maîtrise de l'énergie*. [Online] 02, 01, 2018.
<http://www2.ademe.fr/servlet/KBaseShow?sort=-1&cid=96&m=3&catid=13924>.
- [8] J. M. Olson, D. J. Friedman and S. Kurtz, “ High Efficiency III-V Multi-junction Solar Cells ”, Handbook of Photovoltaic Science and Engineering. John Wiley & Sons, 2003.
- [9] Azza CHETTAOUI, « *Croissance d'hétéro-structures III-V sur des couches tampons de SrTiO₃/Silicium* », thèse de doctorat, Ecole Centrale de Lyon, 2013.

Chapitre I

Les matériaux semi- conducteurs III-V

I-1. Introduction

Après les spectaculaires résultats enregistrés dans la technologie Silicium dans le domaine de la microélectronique, la recherche des composants électroniques présentant des propriétés de transport supérieures à celles du Silicium, conduit la plupart des grands laboratoires de recherches à s'intéresser à des nouveaux matériaux et en particulier les composés semi-conducteurs III-V.

C'est alors qu'une nouvelle classe de matériaux fait son apparition, basés sur la création d'un potentiel dans un cristal par:

- La modulation de dopage.
- La variation de composition d'un alliage.
- La combinaison des deux méthodes précédentes.

I-2. Définition des semi-conducteurs III-V

Les matériaux semi-conducteurs III-V sont des corps composés formés à partir d'un élément de la colonne III et d'un élément de la colonne V de la classification périodique de Mendeleïev. Le tableau (I-1) présente un extrait de cette classification (les chiffres en haut et bas représentent respectivement le nombre atomique et la masse atomique). Ainsi de nombreux composés binaires peuvent être réalisés.

	III	IV	V	VI
	5 B Bore	6 C Carbone	7 N Azote	8 O Oxygène
	13 Al Aluminium	14 Si Silicium	15 P Phosphore	16 S Soufre
30 Zn Zinc	31 Ga Gallium	32 Ge Germanium	33 As Arsenic	34 Se Sélénium
48 Cd Cadmium	49 In Indium	50 Sn Étain	51 Sb Antimoine	52 Te Tellure
80 Hg Mercure	81 Tl Thallium	82 Pb Plomb	83 Bi Bismuth	84 Po Polonium

Tableau (I.1) Tableau périodique partiel

I-3. Les composés binaires, ternaires et quaternaires des S/C III/V

I-3-1. Les composés binaires

Les composés binaires possibles n'ont pas tous le même intérêt potentiel. L'étude de leurs propriétés, et en particulier de la structure de bandes, montre que les éléments les plus légers donnent des composés dont lesquels la bande interdite est large et indirecte, et dans laquelle la masse effective des électrons est élevée. Les composés contenant du bore, de l'aluminium ou de l'azote entrent dans cette catégorie; ils ont en général peu d'intérêt pour l'électronique rapide [1], qui demande des semi-conducteurs à forte mobilité de porteurs ou pour l'optoélectronique ou une structure de bande directe est nécessaire pour que les transitions optiques soient efficaces [2]. A l'autre extrémité, les éléments lourds comme le thalium ou le bismuth donnent des composés à base de Galium (GaAs, GaSb) ou d'indium (InP, InAs, InSb) dont les propriétés sont les plus intéressantes. Le tableau (I-2) résume quelques paramètres pour différents matériaux de la famille III-V.

Composé III-V	E_g (ev)	m^*/m_0	μ (cm ² /VS)	α (A°)
BN	7,5 [4]			3,6150 [4]
AlP	2,45 [3]			5,4510 [4]
AlAs	2,16 [3]			5,6605 [4]
AlSb	1,58 [3]	0,12 [4]	200 [4]	6,1355 [4]
BP	2,0 [4]			4,5380 [4]
GaN	3,44 [3]	0,19 [4]	380 [4]	$\alpha=3,189$ [4] ($\beta=5,185$)
GaP	2,26 [3]	0,82 [4]	110 [4]	5,4512 [4]
GaAs	1,43 [3]	0,067 [3]	8500 [4]	5,6533 [4]
GaSb	0,68 [3]	0,042 [3]	5000 [4]	6,0959 [4]
InP	1,27 [3]	0,073 [3]	4600 [4]	5,8686 [4]
InAs	0,36 [3]	0,023 [3]	33000 [4]	6,0584 [4]
InSb	0,17 [3]	0,012 [3]	80000 [4]	6,4794 [4]

Tableau (I.2) Paramètres des principaux composés binaires III-V à 300 K.

I-3-2. Les composés ternaires et quaternaires

L'intérêt pratique des semi-conducteurs III-V est encore considérablement renforcé par la possibilité de réaliser des alliages par substitution partielle de l'un des éléments par un autre élément de la même colonne. On peut obtenir, par exemple, des alliages ternaires, ou quaternaires qui sont identifiés de la façon suivante :

Ternaires : S'il y a substitution de 2 atomes sur l'un des sous réseaux, soit,



Quaternaires 1+3 : S'il y a substitution de 3 atomes sur des sous réseaux soit :



Quaternaires 2+2 : S'il y a substitution de 2 atomes sur chacun des deux sous réseaux, soit $A_x A'_{(1-x)} B_y B''_{(1-y)}$. Exemple : $Ga_x In_{(1-x)} P_y As_{(1-y)}$.

La plupart des solutions solides ainsi réalisées sont complètes, la loi de Vegard (relation linéaire entre le paramètre de réseau et la composition) est approximativement suivie, et on observe une évolution progressive et régulière des propriétés (dont la bande interdite et les paramètres cristallins) en fonction du taux de substitution.

I-4. Matériau InGaN

L'InGaN apparaît à l'heure actuelle comme le matériau le plus prometteur pour les applications photovoltaïques. Il est activement étudié parce qu'il représente une nouvelle catégorie de matériaux possédant des propriétés uniques:

Un large gap d'énergie interdite directe, lui permettant une large couverture spectrale, de fortes liaisons interatomiques ou encore une forte conductivité thermique. Son gap est modulable avec le taux de substitution de l'Indium dans l'alliage. Avant d'étudier le composé ternaire l'InGaN, il convient d'étudier les propriétés essentielles de ses composés binaires qui sont le nitrure d'indium (InN) et le nitrure de gallium GaN.

I-4-1. Caractéristiques structurelles

a. Structure cristalline

Les nitrures GaN et InN se présentent essentiellement sous deux formes cristallines : la structure hexagonale « wurtzite » et la structure cubique « zinc -blende ».

Dans les conditions ambiantes, la structure la plus stable thermodynamiquement est la structure hexagonale « wurtzite » figure (I-1). Cette structure est définie par trois paramètres, la largeur d'un côté hexagonale a , la hauteur de la maille élémentaire c , et le paramètre interne u décrivant la séparation des sous-réseaux des anions (N^{-3}) et des cations (Ga^{+3}) selon l'axe c [5]. Ce dernier est défini comme étant la longueur de la liaison cation-anion divisée par c . Il est égal à 0,375 pour un cristal wurtzite idéal.

La deuxième structure dite « zinc-blende » figure (I-2) est constituée de deux sous réseaux cubiques à faces centrées, l'un est constitué d'un élément III et l'autre d'un élément V, les deux sous réseaux étant décalés du quart de la diagonale principale soit $a\sqrt{3}/4$, « a » étant la longueur du cube, Le tableau (I-3) présente les paramètres de maille des nitrures GaN et l'InN pour les deux structures.

Cette structure ne peut quant-à elle être obtenue que dans des conditions de croissance bien particulières, elle est thermodynamiquement instable.

Dans les nitrures les liaisons sont de type covalent présentant de propriétés partiellement ioniques, telle que l'une des quatre liaisons reçoit deux électrons de l'élément V.

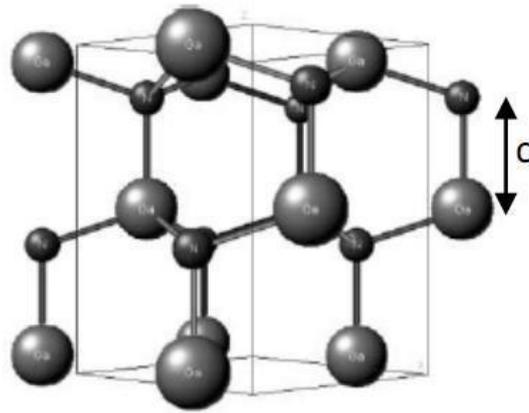


Figure (I-1) Structure wurtzite, exemple du GaN [6].

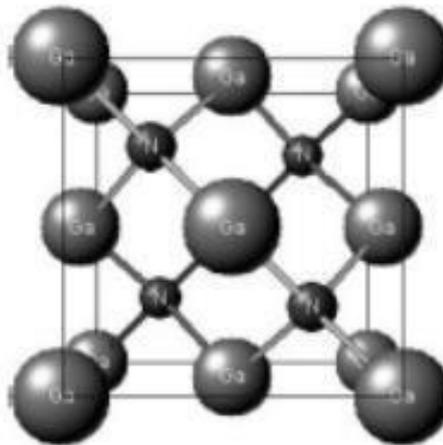


Figure (I-2) Structure cubique zinc-blende, exemple du GaN [6].

	Wurtzite			Cubique
	a (Å°)	c (Å°)	u (Å°)	a (Å°)
GaN	3.189	5.185	0.377	4.47
InN	3.54	5.70	0.378	4.96

Tableau (I-3) Paramètres structuraux a,c et u pour le GaN et l'InN [7,8].

Il existe théoriquement une troisième structure cristalline pour les nitrures-III, la structure cubique à face centrée (CFC) ou NaCl. Comme son nom l'indique, c'est une structure cubique, avec un atome à chaque sommet du cube, plus un atome au centre de chacune des 6 faces. Elle appartient au groupe de symétrie O_h [9]. Cette structure est néanmoins très difficile à obtenir pour le GaN puisqu'il faut se placer sous de très fortes pressions (52 GPa) pour la produire [10]. Elle est donc impossible à obtenir par épitaxie et ne sera donc pas davantage développée ici.

Pour résumer, les nitrures-III peuvent se présenter sous trois formes cristallines (wurtzite, zinc-blende et NaCl), mais la plus stable est la wurtzite. Par la suite, nous nous sommes donc attachés à décrire en détails cette structure.

b. Polarisation interne et piézoélectrique

b-1 Polarisation interne

La structure wurtzite peut être représentée par deux sous-réseaux interpénétrés, celui des anions (N^{3-}) et celui des cations (Ga^{3+}), décalés selon l'axe c . Ce décalage peut être décrit par le paramètre u . Cette structure est dite non-centro-symétrique, c'est-à-dire que les barycentres de ces deux sous-réseaux ne se superposent (coïncident) pas, créant ainsi une polarisation interne et un caractère piézoélectrique.

La polarisation interne va séparer spatialement les électrons et les trous, et créer ainsi une accumulation de charge aux extrémités de la couche perpendiculairement à l'axe c . Cette accumulation de charges peut changer les propriétés électriques et la réactivité du matériau. Il est donc important de connaître le sens de cette polarisation afin de pouvoir la contrôler. Ceci est possible avec le procédé de croissance. En effet, si la première couche atomique déposée est composée d'azote, alors la dernière sera composée d'atomes de gallium. On aura ainsi un excès de trous à la surface. Cette configuration est appelée polarisation Ga et la direction de croissance sera $[0\ 0\ 0\ 1]$. Inversement, si la première est composée de gallium, la dernière sera formée d'azote et présentera donc un excès d'électrons. On aura alors une polarisation N et l'axe de croissance sera appelé $[0\ 0\ 0\ \bar{1}]$.

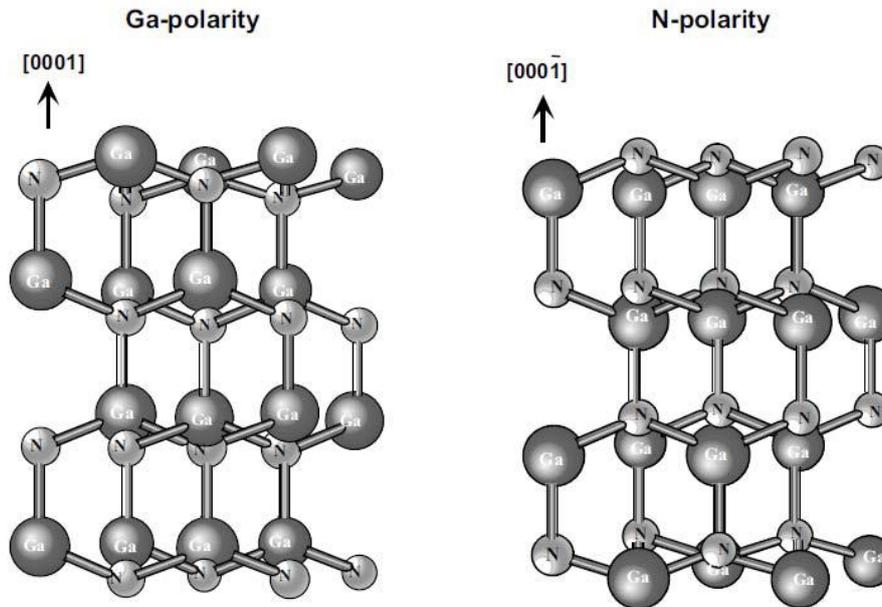


Figure (I-3) Polarisation Ga et N pour le GaN [10].

Le tableau (I-4) regroupe les valeurs de la polarisation spontanée dont le signe est toujours négatif pour les binaires GaN et InN.

	GaN		InN	
$P_{sp} \text{ (cm}^{-2}\text{)}$	Bernardini et al.	Vurgaftman et al.	Bernardini et al.	Vurgaftman et Meyer.
	-0.029	-0.034	-0.032	-0.042

Tableau (I-4) Valeur de polarisation spontanée pour In et GaN [11,12].

Dans le cas du matériau ternaire $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, la polarisation spontanée est décrite par une relation non linéaire reliant la composition et les valeurs des constantes P_{sp} des deux binaires GaN et InN, dont le troisième terme correspond à une correction quadratique liée à une constante b (paramètre de courbure) comme le montre l'expression suivante [13, 14].

$$P_{sp}(InGaN) = xP_{sp}(InN) + (1-x)P_{sp}(GaN) - bx(1-x) \quad (I-1)$$

Avec :

x	concentration en indium dans l'InGaN
$P_{sp}(InGaN)$	polarisation spontanée de l'InGaN (cm ⁻²)
$P_{sp}(InN)$ $P_{sp}(GaN)$	polarisations spontanées des binaires InN et GaN
b	paramètre de courbure de la polarisation spontanée dans l'InGaN

Bernardini et al. [13] et Fiorentini et al. [14] ont rapporté un paramètre de courbure pour l'InGaN de $b = 0,037 \text{ cm}^{-2}$.

b-2 Polarisation piézoélectrique (induite)

La piézoélectricité est l'aptitude de certains matériaux à produire un dipôle électrique proportionnel à la contrainte mécanique (tension ou compression) qui les déforme. En appliquant une certaine pression sur les matériaux nitrures, on oblige la structure à s'accommoder aux contraintes par une variation de ses paramètres de maille (a , c) par rapport à ceux du matériau à l'état massif (a_0 , c_0). Il en résulte une polarisation différente de la polarisation spontanée dite polarisation piézoélectrique (P_{pz}). Cette dernière est due au non centro-symétrie de la structure cristalline, à la nature fortement ionique des liaisons chimiques et aux déformations présentes dans le cristal. Ce type de polarisation peut être calculé à partir de la formule suivante :

$$P_{pz} = 2 \times \epsilon_{xx} \times \left(e_{31} - \frac{e_{33} c_{11}}{c_{33}} \right) = 2 \times \left(\frac{a-a_0}{a_0} \right) \times \left(e_{31} - \frac{e_{33} c_{11}}{c_{33}} \right) \quad (I-2)$$

Avec

ϵ_{xx}	Allongement relatif du matériau dans le plan de croissance
e_{31} et e_{33}	constantes piézoélectriques [Cm ⁻²]
c_{13} et c_{33}	constantes élastiques [GPa]
a et a_0	paramètres de maille dans le plan de la structure contrainte et à l'équilibre [Å]

Au regard des valeurs des constantes piézoélectriques et élastiques du GaN et de l'InN reportées dans le tableau (I-5), on remarque que l'expression $\left(e_{31} - \frac{e_{33} c_{11}}{c_{33}} \right)$ est toujours négative.

La polarisation piézoélectrique des nitrures d'élément III est donc négative si la structure est en tension sur son substrat ($a < a_0$) et positive dans le cas contraire ($a > a_0$).

	e_{31} (cm ⁻²)	e_{33} (cm ⁻²)	c_{13} (GPa)	c_{33} (GPa)
GaN	-0.49 [12] -0.32 [15]	0.73 [12, 15]	106 [16], 121 [17] 92 [18], 96 [19] 100 [20]	224 [18], 324 [19] 392 [20]
InN	-0.57 [12]	0.97 [12]	92 [21], 94 [20]	224 [21], 200 [20]

Tableau (I-5) Constantes piézoélectriques du GaN et InN.

D'après les études théoriques menées par Bernardini et Fiorentini [14], et contrairement à la polarisation spontanée, la polarisation piézoélectrique de l'alliage InGaN pourrait être décrite par une loi de Vegard du type :

$$P_{pz} (In_x Ga_{1-x} N, \epsilon_{xx}) = x \times P_{pz} (InN, \epsilon_{xx}) + (1 - x) \times P_{pz} (GaN, \epsilon_{xx}) \quad (I-3)$$

La polarisation totale dans un matériau à structure wurtzite est égale à la somme des polarisations spontanée et piézoélectrique :

$$\vec{P} = \vec{P}_{sp} + \vec{P}_{pz} \quad (I-4)$$

I-4-2. Propriétés électriques

Les propriétés électriques d'un matériau proviennent de son gap d'énergie interdite, E_g , et de sa densité de porteurs. Avant de détailler ces valeurs pour l'InGaN, nous allons rappeler rapidement quelques notions essentielles de physique. Le gap d'énergie interdite est défini comme étant la différence d'énergie entre le haut de la bande de valence et le bas de la bande de conduction. Le diagramme d'énergie d'un matériau est présenté dans la Figure (I-4).

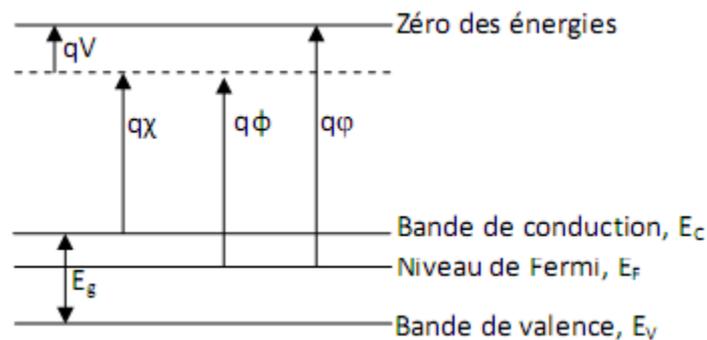


Figure (I-4) Diagramme des énergies pour un matériau.

Le bas de la bande de conduction varie spatialement avec le potentiel électrostatique macroscopique, V , régnant à l'intérieur du matériau. L'affinité électronique, χ , peut être définie comme la quantité d'énergie dégagée suite à la capture d'un électron par un atome en phase gazeuse [22]. Plus l'affinité électronique est grande plus la capture d'un électron par l'atome dégage de l'énergie et plus cette capture est stable. Le travail de sortie, ϕ , correspond au travail à fournir pour extraire une particule du système sans l'emmener à l'infini, mais en la laissant à proximité immédiate du système où elle reste soumise au même potentiel électrostatique, V . Enfin, le potentiel d'ionisation, φ , est l'énergie nécessaire pour extraire une particule du système et la mettre à l'infini.

Le niveau de Fermi, E_F , correspond au plus haut niveau énergétique occupé par un électron à 0 K. La probabilité d'occupation d'un niveau énergétique E par un électron obéit à la statistique de Fermi-Dirac, défini par l'Eq (I-5). La probabilité d'occupation de l'énergie E par un trou est $1-f(E)$.

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)} \quad (\text{I.5})$$

Avec E_F le niveau de Fermi (eV)
 K la constante de Boltzmann (8.617×10^{-5} eV.K⁻¹)
 T la température (K)

Il est également possible de représenter le diagramme de bande d'un semi-conducteur dans l'espace réciproque qui est l'espace des vecteurs d'onde, k , comme le montre la Figure (I-5).

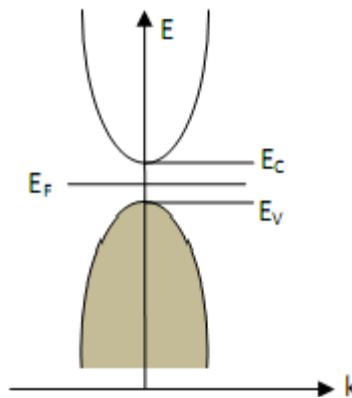


Figure (I-5) Schéma du diagramme de bande dans l'espace réciproque à 0 K. La bande de valence est remplie par les électrons et aucun électron ne se trouve dans la bande de conduction.

Les bandes de valence et de conduction sont composées de niveaux énergétiques continus, on parle aussi d'états. Le nombre de ces niveaux n'est cependant pas constant à cause des différents niveaux électroniques des atomes. On parle alors de densité d'état. Ces dernières dépendent des caractéristiques du matériau et de la température. Pour le GaN, la densité d'état aux bords des bandes de conduction et de valence, N_c et N_v respectivement, est donnée par :

$$N_c = 2 \left(\frac{2\pi m_e K_b T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \approx 4.82 \cdot 10^{15} \cdot \left(\frac{m_e}{m_0} \right)^{\frac{3}{2}} T^{\frac{3}{2}} \approx 4.3 \cdot 10^{14} T^{\frac{3}{2}} \quad (\text{I-6})$$

$$N_v = 2 \left(\frac{2\pi m_h K_b T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \approx 8.9 \cdot 10^{15} T^{\frac{3}{2}} \quad (\text{I-7})$$

La densité d'état des bandes de conduction et de valence pour l'InN est décrite par :

$$N_c \approx 4.82 \cdot 10^{15} \cdot \left(\frac{m_e}{m_0} \right)^{\frac{3}{2}} T^{\frac{3}{2}} \approx 1.76 \cdot 10^{14} T^{\frac{3}{2}} \quad (\text{I-8})$$

$$N_V = 10^{16} T^{\frac{3}{2}} \quad (\text{I-9})$$

Avec

m_e la masse effective des électrons dans la bande de conduction ($m_e=0,2m_0$ pour le GaN et $0,11m_0$ pour l'InN) [MeV.c⁻²]

m_h la masse effective des trous dans la bande de valence ($m_h=0,8m_0$ pour le GaN et $0,65m_0$ pour l'InN) [MeV.c⁻²]

m_0 la masse d'un électron [9.109×10^{-31} kg ou 0.5101 MeV/c²]

h la constante de Planck [$4,136 \times 10^{-15}$ eV.s]

I-4-2-1. Gap d'énergie interdite dans les nitrures

La caractéristique principale pour laquelle les nitrures sont tant étudiés est leur gap d'énergie interdite direct, y compris à travers leurs alliages [23]. Ceci permet d'avoir de meilleurs rendements de conversion ou d'émission de lumière, pour le photovoltaïque ou pour les LEDs, par exemple. De plus, leurs alliages permettent de couvrir quasiment tout le spectre solaire, de l'infrarouge (IR) à l'ultraviolet (UV).

Le gap d'énergie interdite est de 3,39 eV (366 nm) pour le GaN et de 0,7 eV (1771 nm) pour l'InN à température ambiante (300 K) [24]. Le diagramme de bande du GaN est montré dans la Figure (I-6).

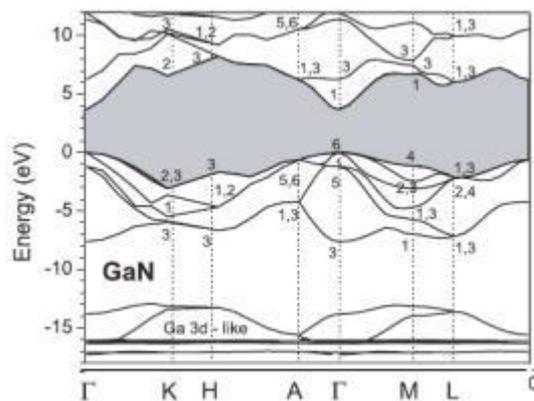


Figure (I-6) Diagramme de la bande du GaN. Le maximum de la bande de valence est pris comme le 0 des énergies. Le gap d'énergie interdite correspond à la partie grisée [25].

Le GaN est un matériau à gap direct, le minimum de sa bande de conduction est donc aligné au maximum de sa bande de valence dans l'espace des vecteurs d'onde. La Figure (I-6) résulte d'un calcul *ab initio* où seule la symétrie du cristal est prise en compte [25]. Cela donne lieu seulement à deux branches au point Γ ($\Gamma_1 + \Gamma_6$).

La Figure (I-7) présente le diagramme de bande de l'InN calculé avec la méthode empirique de pseudo-potentiels. Comme pour le GaN, la bande de valence de l'InN est divisée en trois branches à cause des interactions spin-orbites et de la symétrie du cristal. Fritsch *et al.* obtinrent un gap d'énergie de 0,79 eV [26], ce qui est très proche de la valeur du gap d'énergie à 0 K recommandé par Vurgaftman and Meyer de 0,78 eV [27]. Ils recommandent également de prendre $E_{so}=0,040$ eV et $E_{cr}=0,005$ eV pour l'InN [27].

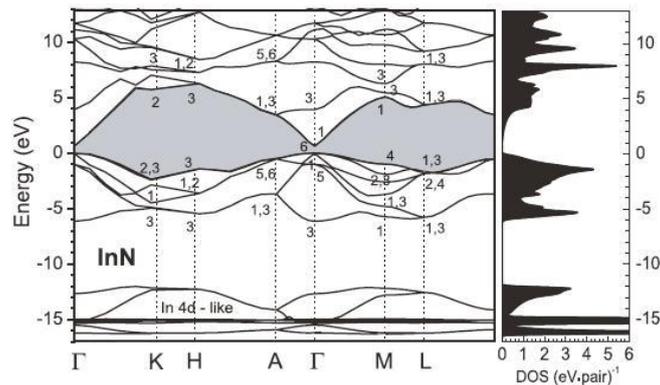


Figure (I-7) Diagramme de bande de l'InN. Le maximum de la bande de valence est pris comme le zéro des énergies. Le gap d'énergie interdite correspond à la partie grisée [25].

I-4-2-2. Evolution du gap d'énergie dans l' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$

A partir des gaps d'énergie interdite des composés binaires GaN et InN, il est possible de déterminer le gap d'énergie de l'InGaN en utilisant la loi de Vegard avec un paramètre de courbure, comme le montre la Figure (I-8). La loi de Vegard est une loi empirique indiquant que les valeurs des propriétés d'un alliage (gap d'énergie, paramètre de maille, constantes élastiques, etc.) peuvent être déterminées par une interpolation linéaire des valeurs des

propriétés de ses composants [28,29]. Cependant, les valeurs mesurées peuvent dévier de l'interpolation linéaire à cause de la taille relative des constituants, du volume relatif par électron de valence, les effets de la zone de Brillouin, et des différences électrochimiques entre les éléments [30,31]. On doit alors introduire un paramètre de courbure dans l'expression afin de suivre les données expérimentales. La loi de Vegard avec paramètre de courbure est définie par :

$$E_g^{InGaN} = (1 - x)E_g^{GaN} + x E_g^{InN} - b x (1 - x) \quad (I-10)$$

Avec x	la concentration d'indium dans l'InGaN
b	le paramètre de courbure [eV]
E_g^{InGaN}	le gap d'énergie de l'InGaN
E_g^{GaN}	le gap d'énergie de GaN
E_g^{InN}	le gap d'énergie de l'InN

La courbe en trait plein de la Figure (I-8) correspond à l'ajustement des points expérimentaux en utilisant l'expression Eq (I-10), avec $E_g(\text{GaN})=3,42$ eV, $E_g(\text{InN})=0,77$ eV, et comme paramètre de courbure $b=1,43$. La courbe en pointillés représente l'ajustement des points du côté riche en Ga en utilisant l'ancien gap de l'InN, soit 1,9 eV. On voit alors la grande déviation de cette courbe avec les mesures expérimentales à partir d'environ 30 % d'indium. Cette valeur de 1,43 eV pour le paramètre de courbure a également été rapportée par Wu *et al.* [32, 23] et est en accord avec la plupart des prédictions théoriques [23]. Cependant, des effets extérieurs tels que la déformation, le dopage, ou la fluctuation de la composition peuvent faire varier ce paramètre.

On peut noter que, comme le gap d'énergie de l'InN, le paramètre de courbure de l'InGaN est controversé. Par exemple, il a été souvent rapporté un paramètre de courbure $b=2,5$ eV [33]

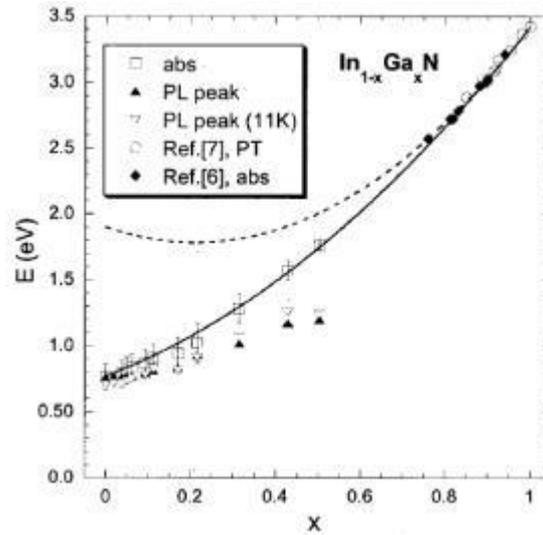


Figure (1-8) Evolution du gap d'énergie interdite de l' $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}$ en fonction de la concentration du Ga. [9].

I-4-2-3. Evolution du gap d'énergie interdite en fonction de la température

L'évolution du gap d'énergie interdite en fonction de la température peut généralement être décrite par l'expression de Varshni :

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{T + \beta} \quad (\text{I-11})$$

Avec $E_g(0)$ le gap d'énergie du matériau à 0 K [eV]
 α une constante empirique [$\text{eV} \cdot \text{K}^{-1}$]
 β une constante associée à la température de Debye [K]

Ces paramètres pour le GaN et l'InN sont rassemblés dans le Tableau (I-6). L'évolution des gaps d'énergie de GaN et de l'InN en fonction de la température est représentée dans la Figure (I-9) et la Figure (I-10), respectivement.

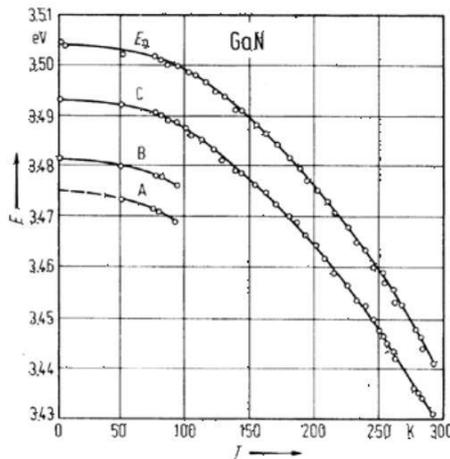


Figure (I-9) : Evolution du gap d'énergie de GaN en fonction de la température. Les courbes A, B et C font référence aux excitons du même nom [35]

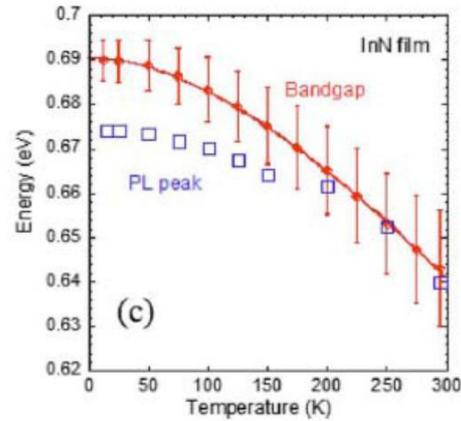


Figure (I-10) : Evolution du gap d'énergie pour InN en fonction de la température. Les données expérimentales de photoluminescence sont également montrées [37]

	GaN			InN	
	Monemar [35]	Bougrov et al. [36]	Vurgaftman et Meyer [27]	Wu et al. [37]	Vurgaftman et Meyer [27]
α [meV.K ⁻¹]	0,508	0,77	0,909	0,41	0,245
β [K]	996	600	830	454	624
$E_g(0K)$ [eV]	3,50	3,47	3,510	0,69	0,78
$E_g(300K)$ [eV]	3,44	3,39	3,44	0,64	0,75

Tableau (1-6) Paramètres de Varshni et gap d'énergie à 0 K et 300 k du GaN et de l'InN.

I-4-2-4. Concentration d'électrons dans les nitrures

Les mesures électriques sur les nitrures (GaN, InN et InGaN) montrent une forte concentration d'électrons, généralement de l'ordre de 10^{18} cm⁻³, leur donnant un caractère intrinsèquement de type N [23, 33,38]. Il semble que cette forte densité d'électrons puisse avoir plusieurs origines. Dans un premier temps, les défauts structuraux ont été proposés comme étant à l'origine de la forte concentration d'électrons, avec au premier rang les lacunes d'azote [23, 39, 40]. En effet, d'après les calculs, ces dernières ont la plus faible énergie de formation dans GaN et InN [41].

Il a été également supposé que des impuretés comme l'oxygène, le carbone, etc. provenant des procédés de croissance participent au caractère de type N [41, 42, 43, 23].

Schaff *et al.* [38] ont montré que la concentration d'électrons dans InN est dépendante de l'épaisseur de la couche. En effet, la concentration des électrons suit la densité de défauts dus au désaccord de maille, qui diminue avec l'augmentation de l'épaisseur des couches, voir Figure (I-11). C'est pourquoi les défauts, et pas les contaminants, sont la principale source d'électrons dans InN [23].

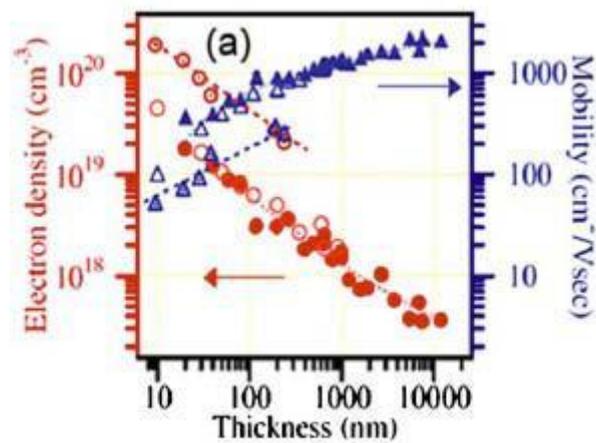


Figure (I-11) Densité d'électrons et mobilité dans InN en fonction de l'épaisseur de la couche. Les symboles pleins correspondent à des couches d'InN déposées sur une couche de GaN tampon. Les symboles vides, identifient les couches déposées sur une couche tampon d'AlN [38].

La Figure (I-12) montre l'évolution de la concentration d'électrons en fonction de la température dans différents alliages d' $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}$, x étant la concentration de Ga. On remarque que la concentration d'électrons augmente avec la fraction de Ga dans l' $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}$ ce qui confirme l'hypothèse de l'augmentation de la densité de charges libres avec l'augmentation de défauts structuraux. Cependant, cette concentration est très peu dépendante de la température entre 77 et 300 K. A noter que la densité d'électrons est maximale pour 50 % de Ga ou d'indium. Si on continue à augmenter la concentration de Ga dans $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}$, la densité d'électrons diminue.

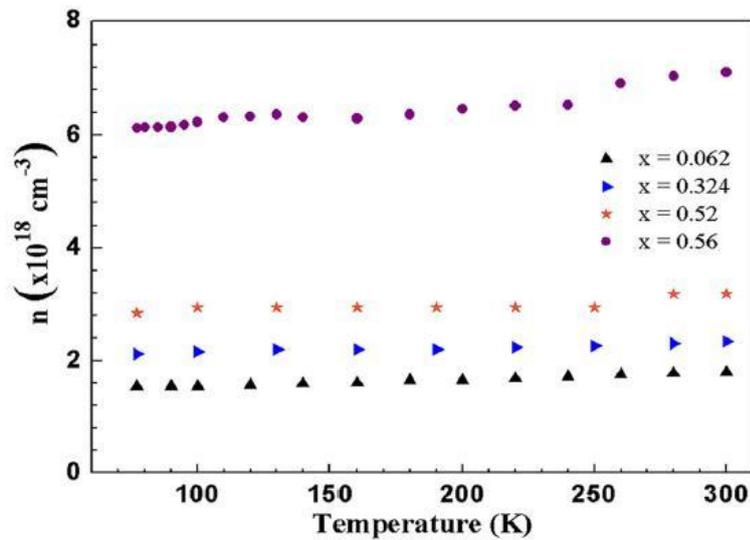


Figure (1-12) Concentration d'électrons en fonction de la température dans $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}$ avec différentes concentrations d'indium [33].

Cette forte concentration de porteurs libres dans le matériau peut interférer dans la détermination du gap d'énergie. Donmez *et al.* [33] ont montré que des densités d'électrons libres au dessus de 10^{18} cm^{-3} provoquent une sous-estimation de la dépendance du gap d'énergie avec d'une part, la température et d'autre part, la composition, à partir de données de photoluminescence. Ce phénomène peut être à l'origine de la variation des données publiées dans la littérature.

I-4-2-5. Mobilité des porteurs dans les nitrures

Comme le montre la Figure (I-11), la mobilité des porteurs dans InN est inversement proportionnelle à la densité d'électrons libres présents dans le matériau. Ce phénomène est également présent dans les autres nitrures (GaN, InGaN).

La mobilité des porteurs libres dans l' $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}$ est présentée dans la Figure (I-13) avec x la concentration de Ga [33]. On observe que la mobilité diminue avec la concentration de Ga. Ceci est dû à la fois à l'augmentation de la masse effective des électrons avec l'augmentation de la concentration de Ga dans l' $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}$ ($m_e^{\text{GaN}} = 0,2 m_0$ et $m_e^{\text{InN}} = 0,11 m_0$), mais aussi à l'augmentation du phénomène de diffusion des porteurs à cause de l'alliage

et des défauts qui augmentent avec la concentration de Ga dans l' $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}$. On remarque également que la mobilité est quasiment indépendante de la température.

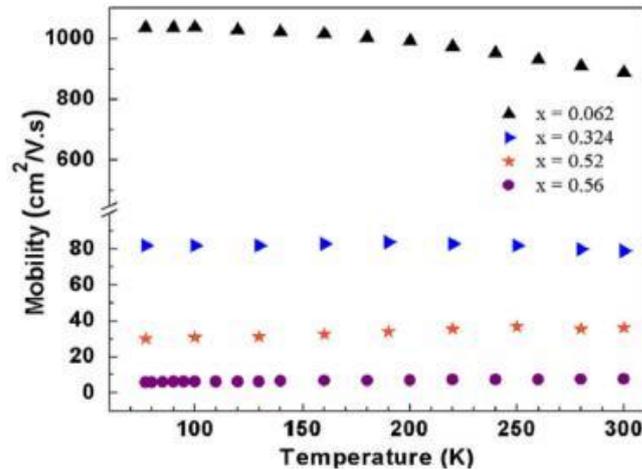


Figure (1-13) Mobilité des porteurs libres dans $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}$ en fonction de la température [33].

I-4-2-6. Longueur de diffusion

La longueur de diffusion, L , est la distance moyenne sur laquelle les porteurs peuvent se déplacer par diffusion. Elle est définie par :

$$L = \sqrt{D \tau} \quad (\text{I-12})$$

Avec τ le temps de vie des porteurs [s]
 D le coefficient de diffusion des porteurs [$\text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$], défini par :

$$D = \frac{kT}{q} \mu \quad (\text{I-13})$$

Avec μ la mobilité des porteurs [$\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$]

La longueur de diffusion est un paramètre à connaître lors de la conception d'un composant électronique, comme une cellule solaire. En effet, si les électrodes collectant le courant produit par la cellule sont éloignées d'une distance supérieure à la longueur de diffusion, alors

les charges se recombineront avant d'être collectées. La Figure (I-14) présente l'évolution de la longueur de diffusion des trous dans le GaN en fonction de la concentration d'électrons. On observe que la longueur de diffusion des trous chute de manière quasiment exponentielle avec l'augmentation de la concentration des électrons à cause de l'augmentation de la probabilité de recombinaison.

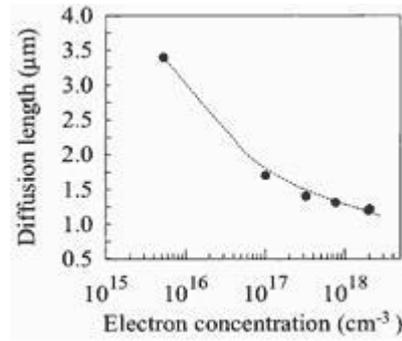


Figure (1.14) Longueur de diffusion des trous dans GaN en fonction de la concentration d'électrons [33].

Les propriétés électriques du GaN et de l'InN sont rassemblées dans le tableau (I-7). Généralement, les paramètres de l'InGaN ne peuvent pas être déduits à partir d'une interpolation linéaire avec les paramètres de GaN et InN.

	GaN	InN
Gap d'énergie interdite [eV]	3,39	0,7
Affinité électronique [eV]	4,1	5,8
Energie de division due à la symétrie du cristal, E_{cr} [eV]	0,010	0,005
Energie de division spin-orbite, E_{so} [eV]	0,017	0,040
Masse effective des électrons, m_e	0,20 m_0	0,11 m_0
Masse effective des trous, m_h	0,80 m_0	0,65 m_0
		$m_{hh}=1,63m_0$ $m_{hl}=0,27m_0$
Densité d'états effective de la bande de conduction, N_c [cm ⁻³]	2,3×10 ¹⁸ (4,3×10 ¹⁴ .T ^{3/2})	9×10 ¹⁷ (1,76×10 ¹⁴ .T ^{3/2})
Densité d'états effective de la bande de valence, N_v [cm ⁻³]	4,6×10 ¹⁹ (8,9×10 ¹⁵ .T ^{3/2})	5,3×10 ¹⁹ (10 ¹⁶ .T ^{3/2})
Mobilité des électrons [cm ² .V ⁻¹ .s ⁻¹]	1400	3200
Mobilité des trous [cm ² .V ⁻¹ .s ⁻¹]	<20	17-36
Paramètres de Varshi : α [meV/K]	0,909	0,41
B [K]	830	454

Tableau (1-7) Résumé des propriétés électriques du GaN et de l'InN à 300 K.

I-4-3. Propriétés optiques

Les propriétés optiques d'un matériau recouvrent principalement son indice de réfraction et son coefficient d'absorption. Ces propriétés sont primordiales pour les composants optoélectroniques puisqu'elles régissent le déplacement de la lumière dans le composant. Par exemple, dans un composant composé de différents matériaux, la lumière a tendance à se propager dans les matériaux ayant le plus fort indice de réfraction. On peut alors confiner la lumière dans une couche particulière, comme dans les lasers. Cette propriété est aussi très intéressante pour les applications de cellules solaires afin d'augmenter les efficacités d'absorption de la lumière.

L'indice de réfraction d'un matériau est défini par le rapport de la vitesse de la lumière dans le vide, c , sur la vitesse de la lumière dans le matériau, v , par :

$$n = \frac{c}{v} \quad (\text{I-14})$$

La vitesse de la lumière dans un matériau n'est pas constante, elle change avec la longueur d'onde. La Figure (I-15) présente l'indice de réfraction du GaN en fonction de la longueur d'onde entre 0,35 et 10 μm . La valeur de l'indice de réfraction est extraite de la partie constante, loin de la zone d'absorption. Dans le cas du GaN, elle est égale à environ 2,3. Pour l'InN, elle vaut environ 2,9 dans l'infrarouge.

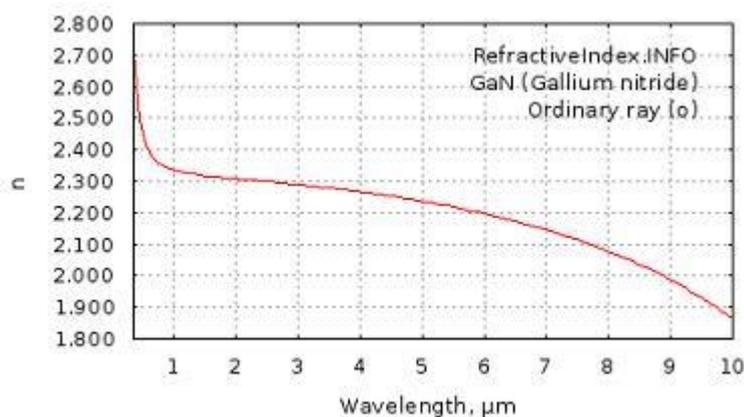


Figure (1-15) Indice de réfraction du GaN entre 0.35 et 10 μm [44].

Anani et al. [45] estimèrent la variation de l'indice de réfraction d'alliages de nitrides-III, voir la Figure (I-16). Ils relient la formule de l'indice de réfraction, n , à l'énergie d'un photon absorbé par un matériau, E_g , définie par :

$$E_g = \frac{hc}{\lambda} \quad (\text{I.15})$$

Puisque le gap d'énergie interdite possède un paramètre de courbure, ils proposèrent que l'indice de réfraction ait également un paramètre de courbure.

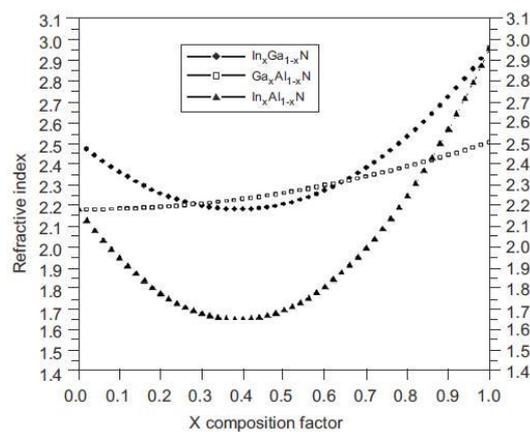


Figure (I-16) Estimation de la variation de l'indice de réfraction dans l'InGaN, le GaAlN et l'InAlN [45]

L'indice de réfraction intervient également dans la détermination des coefficients de réflexion et de transmission à travers la relation de Snell-Descartes :

$$n_1 \sin \theta_1 = n_2 \sin \theta_2 \quad (\text{I-16})$$

Avec n_1 et n_2 les indices de réfractons de deux milieux

θ_1 et θ_2 les angles des rayons lumineux par rapport à la normale

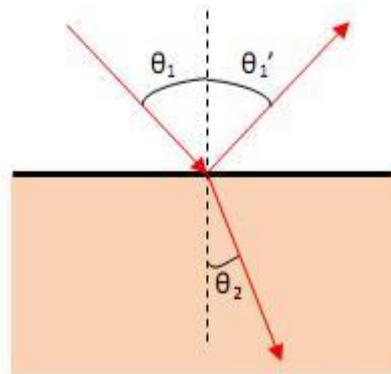


Figure (1-17) Schéma des chemins optiques au niveau d'un dioptre plan.

Le coefficient de réflexion, R , (transmission, T) est défini comme le rapport de l'intensité réfléchie, I_r , (transmise, I_t) sur l'intensité incidente, I_i :

$$R = \frac{I_r}{I_i}; \quad T = \frac{I_t}{I_i} \quad (\text{I-17})$$

On a alors :

$$R = \frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2} \quad \text{et} \quad T = \frac{2 n_1}{n_1 + n_2} \quad (\text{I-18})$$

La permittivité relative d'un matériau, aussi appelée constante diélectrique, décrit la réponse d'un matériau à un champ électrique appliqué et est définie par :

$$\epsilon_r = \chi \epsilon_0 \quad (\text{I-19})$$

Avec χ la susceptibilité du matériau
 ϵ_0 la permittivité du vide [$8,85 \times 10^{-12}$ F.m⁻¹]

Elle est reliée à l'indice de réfraction par la relation :

$$n = \sqrt{\epsilon_r} \quad (\text{I-20})$$

En introduisant la permittivité relative dans les coefficients de réflexion et de transmission, on obtient :

$$R = \frac{\sqrt{\varepsilon_1} - \sqrt{\varepsilon_2}}{\sqrt{\varepsilon_1} + \sqrt{\varepsilon_2}} \text{ et } T = \frac{2\sqrt{\varepsilon_1}}{\sqrt{\varepsilon_1} + \sqrt{\varepsilon_2}} \quad (1-21)$$

On considérant le dioptre air/GaN, on obtient un coefficient de réflexion de 39 % et un coefficient de transmission de 61 %.

Toute la description ci-dessus est valable pour des longueurs d'onde loin de la zone d'absorption, c'est-à-dire, loin du gap d'énergie interdite. Si un photon a une énergie inférieure au gap d'énergie du matériau, E_g , il ne sera pas absorbé. Le matériau est transparent pour cette énergie. En revanche, si un photon à une énergie supérieure ou égale à E_g , il sera alors absorbé et formera une paire électron-trou. Lorsque le phénomène d'absorption a lieu dans un matériau alors l'indice de réfraction a une composante complexe et est défini par :

$$\tilde{n}(\lambda) = n(\lambda) - ik(\lambda) \quad (I-22)$$

Avec k le coefficient d'atténuation, ou d'extinction [s.d]

On parle alors d'une permittivité relative complexe

$$\tilde{\varepsilon}_r(\lambda) = (n(\lambda) - ik(\lambda))^2 \quad (I-23)$$

Le coefficient d'absorption, α , est défini par :

$$\alpha(\lambda) = \frac{4\pi k(\lambda)}{\lambda} \quad (I-24)$$

Un exemple de courbe de transmission, de réflexion et d'absorption du GaN est montré dans la Figure (I-18) et la Figure (I-19). Le seuil de transmission ou d'absorption que l'on peut voir dans ces figures autour de 360 nm correspond au gap d'énergie du matériau. On peut alors, d'après ces mesures déterminer le gap du matériau, ici, 3,41 eV, ce qui correspond bien au gap du GaN.

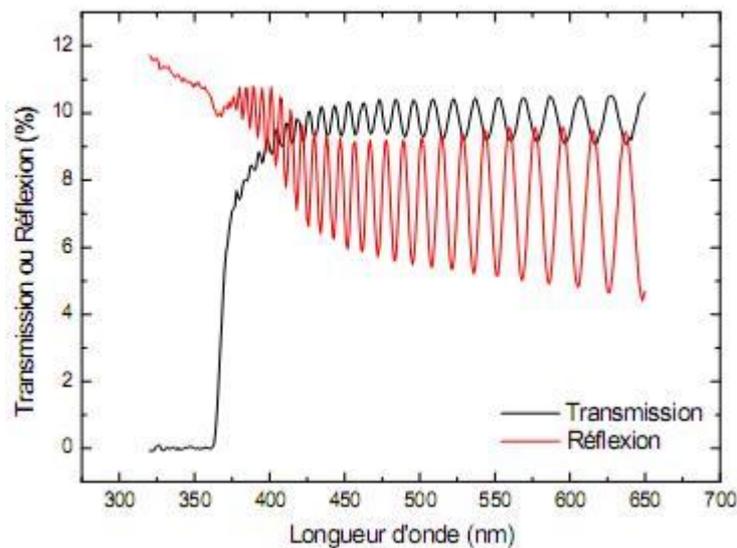


Figure (1-18) Courbe de transmission (noire) et de réflexion (rouge) du GaN [20].

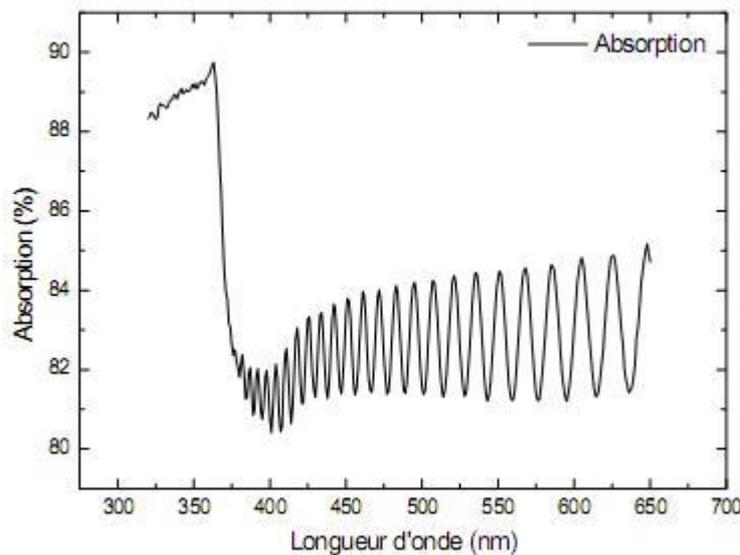


Figure (1-19) Courbe d'absorption du GaN [20].

Pour les cellules solaires, le coefficient d'absorption est un paramètre important puisqu'il va déterminer la quantité de photons absorbés par le matériau, et donc la quantité de porteurs pouvant être produits. On choisira donc des matériaux avec de forts coefficients d'absorption pour la fabrication de cellules solaires.

I-4-4. Propriétés thermiques

Les principales propriétés thermiques sont rassemblées dans le Tableau (I-8). Le coefficient d'expansion thermique (CET), α , décrit la dilatation ou la contraction d'un réseau cristallin à une variation de température. Dans le plan cristallin, il est défini par :

$$\alpha_a = \frac{\Delta a}{a \Delta T} \text{ et } \alpha_c = \frac{\Delta c}{c \Delta T} \quad (\text{I-25})$$

Avec a et c la variation des paramètres de maille suite à une variation de température dans le plan et perpendiculairement au plan [Å]
 T la variation de température [K]

De plus, le CET dépend également de la stœchiométrie, des défauts étendus, et de la concentration de charges libres dans le matériau. Les mesures effectuées sur la gamme de température 300-900 K indiquent que le coefficient d'expansion thermique moyen du GaN dans le plan est égal à $\alpha_a=5,59 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$, et perpendiculairement à $\alpha_c=3,17 \times 10^{-6}$ et $7,75 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ entre (300-700) K et (700-900) K, respectivement [46]. La différence du TEC entre le matériau déposé et le substrat peut créer des contraintes lors du refroidissement de la structure à température ambiante après la croissance, entraînant la création de défauts (dislocations) et détériorant ainsi les performances du composant.

	GaN	InN
Expansion thermique [s.d.]	$a/a=5,59 \times 10^{-6}$ $c/c=3,17 \times 10^{-6}$	$a/a=2,85 \times 10^{-6}$ $c/c=3,75 \times 10^{-6}$
Conductivité thermique, κ [W.cm ⁻¹ .K ⁻¹] à 300 K	2,3	0,8
Température de Debye [K]	600	660
Température de fusion [K]	>1993 à 2kbar	1373

Tableau (I-8) Résumé des propriétés thermiques du GaN et InN [46]

I-4-5. Croissance et substrats

La croissance de l'InGaN est un point critique pour le développement de ce matériau. En effet, il n'est pas possible de le fabriquer de manière massive comme pour le silicium. Il est donc déposé en film fin sur un substrat. Le problème est qu'il n'existe pas de substrat possédant un paramètre de maille proche de celui de l'InGaN. Une épaisse couche tampon est alors utilisée pour adapter les paramètres du substrat et de la couche déposée. Cette technique a l'inconvénient de produire une grande quantité de défauts réduisant les performances des composants.

Traditionnellement, le saphir (Al_2O_3) est utilisé comme substrat pour les couches d'InGaN avec une couche tampon de GaN ou d'AlN. Le carbure de silicium (SiC) a également été sérieusement étudié comme substrat. Bien que les paramètres de maille du SiC et InGaN soient assez proche, leur coefficient d'expansion thermique est très différent provoquant de nouveaux défauts lors du refroidissement des structures après la croissance. D'autre part, le nitrure d'aluminium (AlN) serait une bonne alternative. Cependant, il est également très difficile à fabriquer de manière massive. C'est aussi le cas pour l'oxyde de zinc (ZnO). Enfin, le silicium et le verre pourraient être utilisés comme substrat pour des composants InGaN malgré leur structure très différente, grâce à leur faible coût et leurs diverses applications. Ces différents substrats seront décrits dans les paragraphes suivants.

On peut noter que pour les cellules photovoltaïques, la technique des films fins est très intéressante puisqu'elle limite l'utilisation de matière première et permet d'optimiser l'épaisseur de la cellule.

a. Croissance sur saphir

Le premier substrat utilisé pour l'hétéroépitaxie du GaN était du saphir (Al_2O_3), par Maruskas et Tietjen's en 1969, en utilisant l'épitaxie en phase vapeur hybride (HVPE) [47]. Malgré un paramètre de maille et un coefficient d'expansion thermique très éloignés de ceux du GaN, le saphir est devenu son substrat le plus largement utilisé. Ces différences

provoquent des défauts dans le matériau GaN comme des dislocations, des défauts d'empilement, etc., réduisant la qualité des couches. A ce jour, la solution pour palier à ce problème consiste à déposer des couches très épaisses (plusieurs microns) afin de s'éloigner de l'interface. En outre, le saphir est un matériau relativement cher rendant impossible son utilisation à grande échelle.

Le saphir appartient au groupe d'espace $R3c$ et est principalement composé de liaisons ioniques. Il peut être décrit par une maille élémentaire rhomboédrique avec un volume de $84,9 \text{ \AA}^3$, mais aussi par une maille élémentaire hexagonale avec un volume de $254,8 \text{ \AA}^3$ [48]. Ces structures sont présentées dans la Figure (I-20).

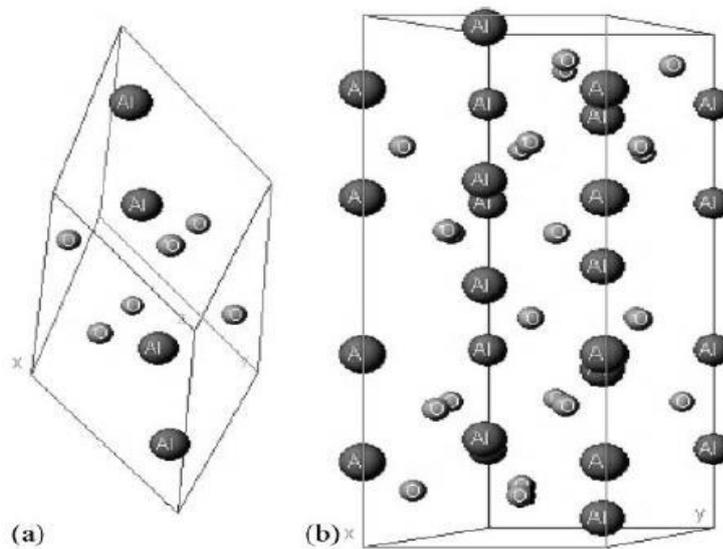


Figure (I-20) Schéma de la maille élémentaire du saphir (a) rhomboédrique (b) hexagonale [48]

La première étape du processus de croissance est le nettoyage de la surface. La méthode la plus utilisée dans les systèmes *MOCVD* est un recuit entre 1000 et 1100°C sous flux d'hydrogène. La deuxième étape est la nitruration de la surface. Pour cela, la surface du saphir nettoyée est exposée à un mélange de gaz ammoniac/hydrogène. Ce procédé permet d'augmenter la mouillabilité de la surface en formant une couche inférieure à 1 nm d' AlN , et ainsi d'améliorer la qualité cristalline de la couche de GaN épitaxiée. Enfin, la dernière étape avant la croissance de la couche de GaN proprement dite est la croissance d'une couche

tampon de GaN à basse température (500-550°C contre 800-1000°C pour la croissance du GaN à haute qualité cristalline) [48].

Le GaN épitaxié sur saphir par *MOCVD* présente une polarité de type Ga. La densité de défauts dans le GaN épitaxié reste élevée, de l'ordre de 10^{10} cm^{-2} .

b. Croissance sur SiC

Le carbure de silicium (SiC) est souvent mentionné comme substrat alternatif au saphir. Il existe plus de 250 polytypes (variations unidimensionnelles de la séquence d'empilement des plans biatomiques) de SiC. La maille élémentaire de tous les polytypes est un tétraèdre de carbone avec un atome de silicium en son centre, ou vice-versa, voir Figure (I-21).

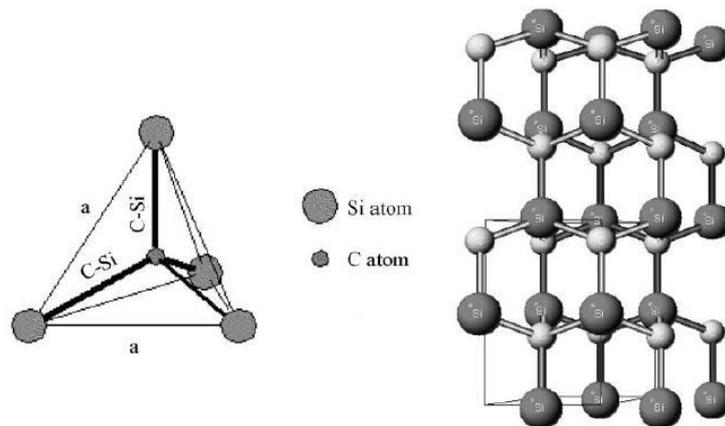


Figure (I-21) Schéma d'une maille élémentaire de SiC avec 4 atomes de silicium et un atome de carbone en son centre, et la structure d'empilement du 2H-SiC. La direction verticale de la figure correspond à la direction [0001] du cristal [48].

Les polytypes se différencient par leur séquence d'empilement comme le montre la Figure (I-22).

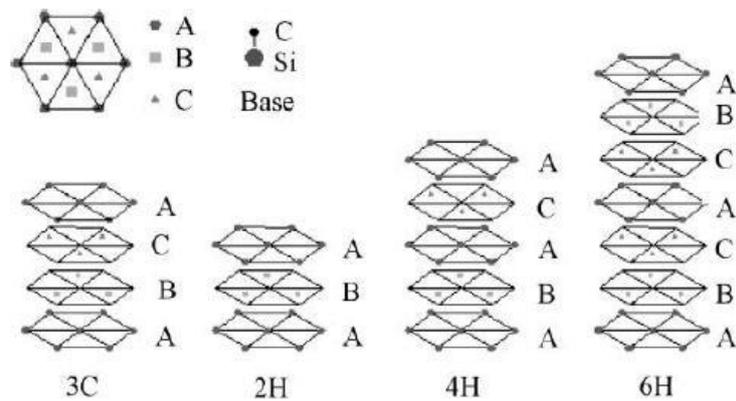


Figure (I-22) Schéma de la séquence d'empilement des couches pour les quatre formes les plus communes de polytypes de SiC [48].

Parmi ces poly-types, 6H-SiC est le substrat le plus utilisé pour la croissance du GaN car il appartient au même groupe de symétrie (P63mc). De plus, il est largement disponible. Il a également l'avantage de présenter un désaccord de maille avec le GaN bien inférieur à celui du saphir, d'environ 3 % pour les couches orientées selon la direction [0001], et d'avoir un coefficient d'expansion thermique plus grand (3,8 W.cm-1.K-1). Il peut également devenir conducteur en fonction du dopage, et ainsi devenir le contact arrière simplifiant la conception de composants. Enfin, ce substrat peut se présenter sous les deux polarités, Si et C, permettant ainsi de contrôler la polarité de la couche GaN épitaxiée.

Par ailleurs, SiC présente certains inconvénients. Le premier est sa faible mouillabilité avec GaN limitant une croissance directe. Pour remédier à ce problème, il est possible de faire croître une couche tampon d'AlN ou d'AlGaIn, mais cette dernière augmente la résistivité entre la couche de GaN et le substrat. Le deuxième inconvénient du SiC est son désaccord de maille avec GaN. Même s'il est bien inférieur à celui du saphir, il reste suffisant pour créer de nombreux défauts dans la couche épitaxiée. Le troisième désavantage de SiC est sa rugosité importante, de l'ordre de 1 nm RMS (0,1 nm RMS pour le saphir), qui peut être source de défauts dans la couche de GaN. Il est possible d'aplanir la surface et de réduire la quantité de défauts à l'aide de gravure chimique ou de recuit à haute température sous hydrogène, mais ces procédés rajoutent des étapes de fabrication et augmentent le coût du substrat [48]. Enfin, le coût du SiC est élevé ce qui limite son développement à grande échelle. Ces inconvénients expliquent pourquoi le SiC ne s'est pas généralisé comme substrat pour l'épitaxie du GaN.

c. Croissance sur AlN

Le nitrure d'aluminium (AlN) est un substrat idéal pour le GaN puisqu'il a la même structure wurtzite, des paramètres de maille et coefficient d'expansion thermique similaires. L'AlN a également l'avantage d'être facilement gravé chimiquement avec le KOH, d'être un isolant électrique et de posséder une bonne conductivité thermique.

Cependant, le plus grand défaut de l'AlN est qu'il n'est pas disponible sous forme massive industriellement. On ne peut le trouver que sous forme de couche épitaxiée sur saphir [49]. C'est pourquoi, à ce jour, il reste principalement utilisé comme couche tampon.

d. Croissance sur ZnO

L'oxyde de zinc (ZnO) apparaît également comme un substrat possible grâce à son paramètre de maille proche de celui du GaN (3,25 Å, soit 1,9 % de désaccord de maille). Il se présente sous la structure wurtzite.

L'énergie de stabilisation du niveau de Fermi, E_{FS} , se trouve seulement à 0,2 eV sous la bande de conduction du ZnO conduisant à une forte densité d'électrons sans dopage intentionnel, comme dans les nitrures [50].

On peut trouver maintenant dans le commerce le ZnO sous forme de substrat massif mais il reste très cher [49], ce qui limite son utilisation à grande échelle. Pour réduire les coûts tout en gardant les avantages de ce matériau, il est possible de l'utiliser en tant que couche tampon entre le GaN et un autre substrat.

Un avantage du ZnO est sa particularité à réduire la densité de défauts (dislocations) en provenance du désaccord de maille avec le substrat, grâce à l'inclinaison des dislocations de 30° permettant leur annihilation lorsque deux dislocations se rencontrent. C'est pourquoi le ZnO est utilisé dans nos structures en tant que couche tampon entre le substrat et le GaN.

Un autre avantage du ZnO est le fait que l'InGaN avec 17 % d'indium est en accord de maille avec le ZnO ⁴, pouvant ainsi permettre d'obtenir des couches d'InGaN de bonne qualité cristalline.

Li et al. [51] rapportèrent la croissance de couches d'InGaN avec 43 % d'indium sur ZnO sans ségrégation de phase.

e. Croissance sur Si

Ses propriétés physiques, sa haute qualité cristalline et son faible coût font du silicium (Si) un substrat très attractif pour des composants à base de GaN. De plus, il ouvre la possibilité d'une intégration de composants optoélectroniques à base GaN avec les composants électroniques à base de silicium.

Le silicium a une structure cubique, en maille diamant et appartient à l'espace de symétrie $Fd\bar{3}m$. Sa structure peut être présentée par deux sous-réseaux cubiques à face centrée (cfc) interpénétrés et décalés d'une distance équivalente à un quart de la diagonale de la maille élémentaire ($(a\sqrt{3})/4$ avec $a=5,43 \text{ \AA}$). La Figure (I-31) présente la structure du cristal de silicium selon différentes directions. Pour la croissance du GaN sous forme wurtzite, Si(111) est le substrat le plus utilisé.

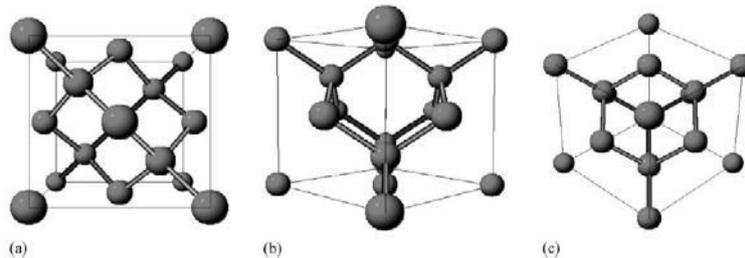


Figure (I-23) Schéma de la maille élémentaire du silicium selon les directions (a) [001], (b), [011], et (c) [111] [48].

Le GaN sur Si présente un important désaccord de maille (17 %) et de coefficient d'expansion thermique ($2,6 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ contre $5,6 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ pour le GaN [48]) provoquant d'importants cracs au refroidissement à température ambiante après la croissance [52]. Néanmoins, le silicium présente une forte réactivité avec l'azote créant une couche de SiN_x amorphe à la surface du substrat [52]. Ceci provoque ensuite une croissance poly-cristalline du GaN avec de nombreux défauts. Afin de palier à ce problème, une couche tampon, généralement en AlN, est déposée avant le GaN. Elle permet d'éviter la couche de SiN_x amorphe et réduit la différence de coefficient d'expansion thermique entre le Si et le GaN.

La croissance directe du GaN sur le Si(111) donne une polarité N, alors que l'introduction d'une couche tampon en AlN donne une polarité Ga [48].

On peut noter que Romanyuk et al. [52] ont réussi à faire croître de l' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ (0-0,32) sur un substrat de Si(111) avec une couche tampon intentionnelle en Si_xN_y fabriqué par la technique d'épitaxie par jet moléculaire assisté par plasma. La qualité cristalline du InGaN était haute et l'incorporation de l'indium élevée. Ces observations ont été expliquées par la réduction de la déformation élastique locale à l'interface et la polarité N de la surface.

f. Croissance sur verre

La croissance de cellules solaires sur verre est très intéressante puisqu'elle permet de réduire le coût des matériaux, et ouvre un grand champ d'applications, comme par exemple, des panneaux photovoltaïques intégrés au bâtiment.

Il existe une multitude de verres différents allant du verre sodocalcique utilisé dans les bouteilles ou les vitrages, à l'oxynitride d'aluminium qui sert de verre blindé, en passant par le verre borosilicate (Pyrex) ou le poly-méthacrylate de méthyle (PMMA) [53]. Dans la suite, nous allons décrire seulement le verre sodocalcique et le verre borosilicate parce que ce sont les moins coûteux.

Le verre possède une structure amorphe avec de nombreux défauts et impuretés. Sa structure microscopique est telle qu'il n'existe aucun ordre à grande distance. La Figure (I-24) présente un schéma de la structure cristalline d'un verre silicaté possédant des cations (Na, K, ou Ca)

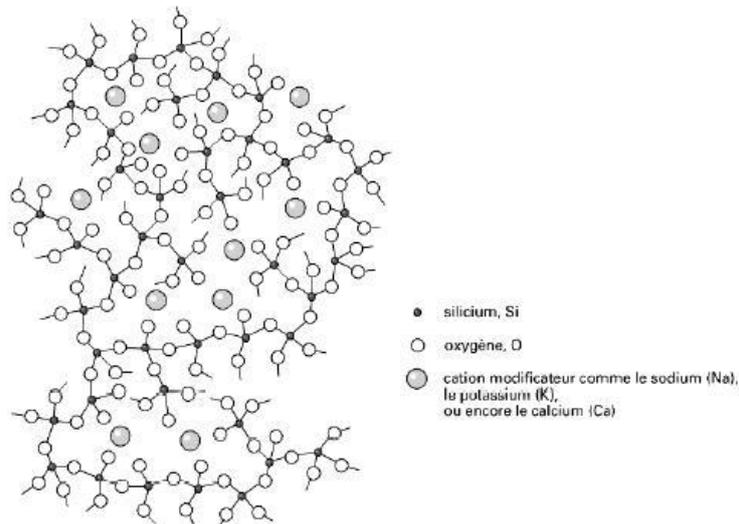


Figure (I-24) Structure cristalline d'un verre silicaté possédant des cations (Na, K ou Ca) [53].

Le verre peut être caractérisé par sa température de transition vitreuse, T_g , c'est-à-dire la température à laquelle le verre passe de l'état solide à l'état fluide visqueux. Elle vaut environ 570 °C pour le verre sodocalcique, et 820 °C pour le verre borosilicate [53].

On peut donc identifier trois difficultés principales pour la croissance du GaN sur verre. La première est l'épitaxie d'un matériau sur un substrat amorphe. Cela entraîne généralement une grande densité de défauts et des couches multi-cristallines. La seconde est la faible température de transition des verres par rapport à la température de croissance du GaN. En effet, comme il sera détaillé dans le paragraphe suivant, la température de croissance du GaN est au moins de 800 °C pour obtenir une bonne qualité cristalline, ce qui est au dessus de la température de transition des verres. Les substrats alors se déformeront et changeront de structure cristalline limitant la qualité des couches déposées. Enfin, la troisième difficulté est la diffusion des impuretés contenues dans le verre qui peuvent migrer dans les couches de GaN créant ainsi des défauts ponctuels.

I-5. Le matériau GaInP

Le $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ est un matériau ternaire, composé à partir des deux semi-conducteurs binaires : GaP ($x=1$, $E_g=2.26$ eV) et InP ($x=0$, $E_g=1.344$ eV). Comme la plupart des matériaux semi-conducteurs III-V, le GaInP cristallise en un réseau zinc-blende, présentée sur la figure (I-25). Il a un gap direct pour une fraction molaire du Gallium inférieure à 0.74 et un gap indirect sinon. Il forme une bonne interface avec le matériau GaAs pour $x = 0.516$. En lui ajoutant l'Aluminium, on obtient l'alliage AlInGaP qui possède un gap variant entre 1.43 et 2.2 eV et qui maintient toujours une bonne interface avec le GaAs, ce qui donne plusieurs combinaisons dans la conception des cellules solaires monolithiques. En plus, pour la réalisation des couches fenêtres, le matériau GaInP a des propriétés excellentes par rapport au matériau AlGaAs [54,55]. Il ne présente pas de défauts liés à l'incorporation de l'oxygène lors de sa croissance et il possède une faible vitesse de recombinaison à la surface. Avec la possibilité d'utiliser le Ge comme une couche substrat pour la cellule tandem GaInP/GaAs, l'addition d'une troisième cellule devient possible.

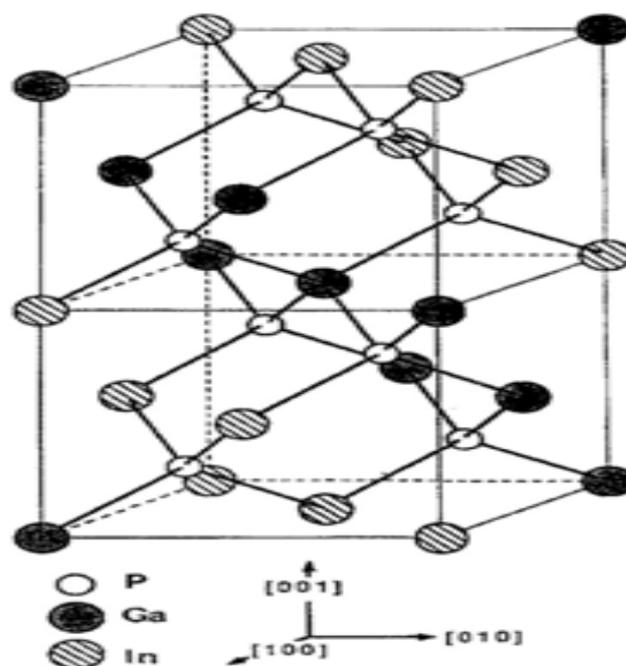


Figure (I-25) Structure cristalline de GaInP [56].

I-5-1. Propriétés du matériau GaInP

Les propriétés du matériau $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ sont présentées dans le tableau (I-9).

Paramètre	$\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$	$\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{P}$	Réf
Energie de gap E_g (eV)	$E(x) = -0.2722x^2 + 1.1925x - 1.3399$	1.849	[57]
Densité (g/cm^3)	$4.81 - 67x$	4.47	[58]
Coefficient de dilatation thermique α ($\times 10^{-6} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$)		5.3	Calculé
Constante électrique ϵ	$\epsilon(x) = 12.5 - 1.4x$	11.8	[58]
Affinité électronique χ (eV)	$\chi(x) = 4.38 - 0.58x$	4.1	[58]
Constante de maille (Å)	5.65 pour $x=0.5$	5.65	[58]
Coefficient d'Auger A (cm^6/s)	$A(x) = -8.2 \times 10^{-30}x^2 + 8.3 \times 10^{-30}x + 9 \times 10^{-31}$	3×10^{-30}	[57]
Recombinaison radiative A_0 (cm^3/s)	$A_0(E_g) = -2.362 \times 10^{-10}E_g^2 + 7.202 \times 10^{-10}E_g - 4.214 \times 10^{-10}$ $A_0(E_g) = (1 \pm 0.3)10^{-10}$; pour $x=0.5$ et $T=300\text{K}$		[57]
Recombinaison en surface (cm/s)	Surface libre : $(2 \div 5) \times 10^4$ GaInP/GaAs : 1.5		[58]
Densité effective d'états N_c (cm^{-3})	$N_c = 2 \left(\frac{\pi q K T m_e^*}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}}$	6.5×10^{17}	[59]
Densité effective d'états N_v (cm^{-3})	$N_v = 2 \left(\frac{\pi q K T m_h^*}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}}$	1.45×10^{19}	[59]
Masse effective des électrons et des trous	$\frac{m_e^*(x)}{m_0} = 0.0254x^2 - 0.114x + 0.08$ $\frac{m_h^*(x)}{m_0} = 0.19x + 0.6$	$\frac{m_e^*(x)}{m_0} = 0.111$ $\frac{m_h^*(x)}{m_0} = 0.5$	[60] [60]

Concentration des Porteurs intrinsèques n_i	$n_i = \sqrt{N_c N_v} \exp\left(-\frac{E_g}{2KT}\right)$	391	[60]
---	--	-----	------

Tableau (I-9) Propriétés électriques et cristallines du matériau GaInP à 300 K.**I-5-2. Mobilité des porteurs**

Pour le matériau GaInP, les résultats expérimentaux d'Ikeda [36] et Shitara [63] peuvent être approximés par les formules (I-26) et (I-27). Ceci permet d'avoir des valeurs de la mobilité des électrons et des trous, en fonction de la concentration du dopage qui varie entre 10^{16} cm^{-3} et 10^{19} cm^{-3} : tableau (I-10) et figure (I-26).

$$\mu_n \left(\frac{\text{cm}^2}{\text{V.s}}\right) = \frac{4000}{\left[1 + \left(\frac{N}{1E15}\right)^{0.2}\right]} \quad (\text{I-26})$$

$$\mu_p = 40 \text{ [62]}; \mu_p = 34 \text{ [54]} \quad (\text{I-27})$$

Concentration du dopage $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{P}$	Mobilité des (électrons) [$\text{cm}^2/\text{V.s}$]	Mobilité des (trous) [$\text{cm}^2/\text{V.s}$]
1.0×10^{16}	1547.45	40
2.0×10^{16}	1418.16	40
4.0×10^{16}	1293.96	40
6.0×10^{16}	1224.02	40
8.0×10^{16}	1175.69	40
1.0×10^{17}	1138.99	40
2.0×10^{17}	1029.50	40
4.0×10^{17}	927.12	40
6.0×10^{17}	870.62	40
8.0×10^{17}	832.07	40
1.0×10^{18}	803.04	40
2.0×10^{18}	717.74	40
4.0×10^{18}	639.69	40

6.0×10^{18}	597.30	40
8.0×10^{18}	568.65	40
1.0×10^{19}	547.23	40
2.0×10^{19}	484.98	40
4.0×10^{19}	428.93	40
6.0×10^{19}	398.85	40
8.0×10^{19}	378.66	40

Tableau (I-10) Variation de la mobilité du matériau $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{P}$ en fonction de la concentration du dopage.

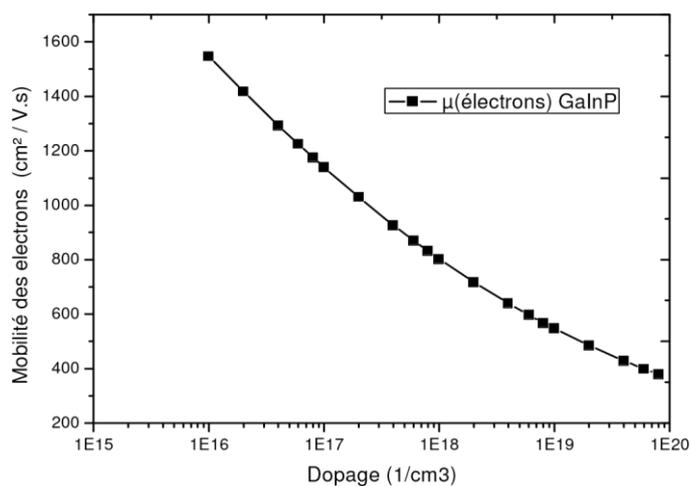


Figure (I-26) Variation de la mobilité des électrons et en fonction de la concentration du dopage dans le matériau GaInP [63].

I-5-3. Durée de vie des porteurs minoritaires

La durée de vie des porteurs minoritaires dans le matériau GaInP est donnée par l'expression suivante :

$$1/\tau_{n,p} = 1/\tau_{n,r} + BN_{A,D} \quad (\text{I-28})$$

Où : B est le coefficient de la recombinaison radiative $(1 \pm 0.3) \times 10^{-10} \text{ cm}^3/\text{s}$ à 300K et $\tau_{n,r}$ est la durée de vie de la recombinaison non radiative donnée par la formule suivante :

$$\frac{1}{\tau_{n,r}} = \frac{1}{\tau_{SRH}} + CN_{A,D}^2 \quad (\text{I-29})$$

Pour le GaInP (0.5), τ_{SRH} est égal à $5\mu\text{s}$ et C est le coefficient de recombinaison d'Auger : $3.10^{-30} \text{ cm}^6/\text{s}$.

I-5-4. Propriétés optiques

a- Indice de réfraction et coefficient de réflexion

L'un des paramètres les plus influents sur le rendement de la cellule solaire et qui permet de réduire les pertes optiques dans la cellule solaire est l'indice de réfraction (n).

L'expression de ce dernier est donnée par la formule suivante [64] :

$$n = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\sqrt{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2} + \varepsilon_1} \quad (\text{I-30})$$

Où ε_1 et ε_2 sont respectivement les composantes réelle et imaginaire de la constante diélectrique complexe ε^* qui s'écrit comme :

$$\varepsilon^* = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2 \quad (\text{I-31})$$

Par ailleurs, le coefficient d'extinction (k) est exprimé par l'équation suivante :

$$K = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\sqrt{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2} - \varepsilon_1} \quad (\text{I-32})$$

Il permet de calculer par la suite le coefficient d'absorption (α) par la formule suivante :

$$\alpha = 4\pi K/\lambda \quad \text{Où} \quad \lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{hc}{h\nu} = \frac{1.24}{E_g} \quad (\text{I-33})$$

h est la constante de Planck, c et ν : sont la vitesse et la fréquence de la lumière dans le vide.

Ces deux paramètres nous permettent de calculer le coefficient de réflexion normal à l'interface matériau/vide qui est donné par :

$$R = \frac{(n-1)^2 + K^2}{(n+1)^2 + K^2} \quad (\text{I-34})$$

Les propriétés optiques du matériau GaInP sont représentées sur les figures (I-27) et (I-28).

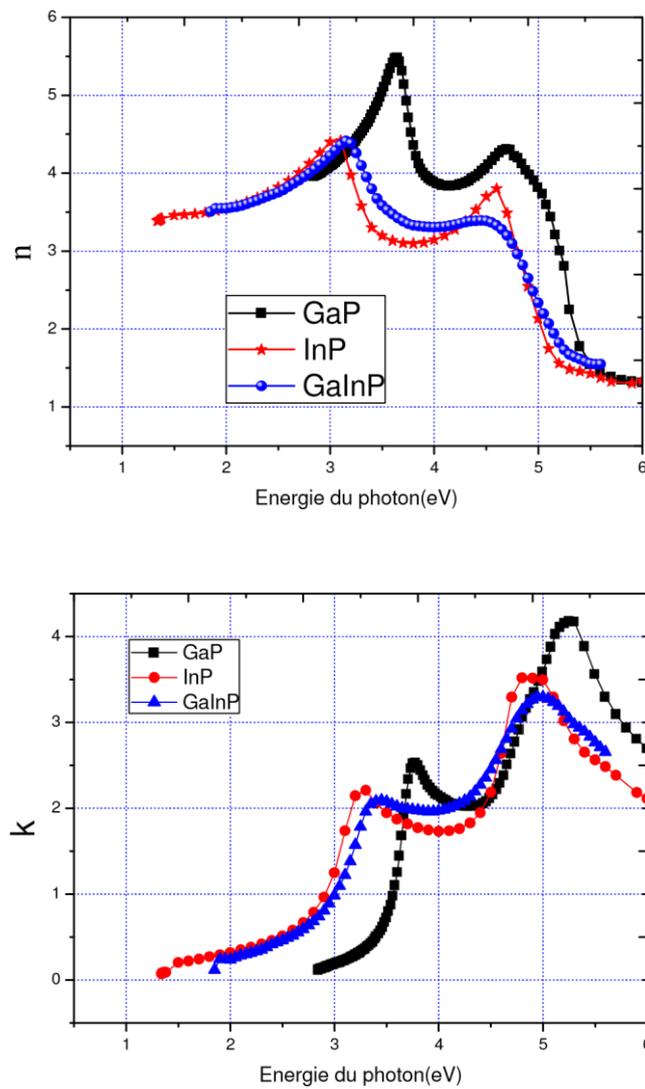


Figure (I-27) Indice de réfraction $n(E)$ et coefficient d'extinction $k(E)$, des matériaux GaP, InP et $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{P}$ [64].

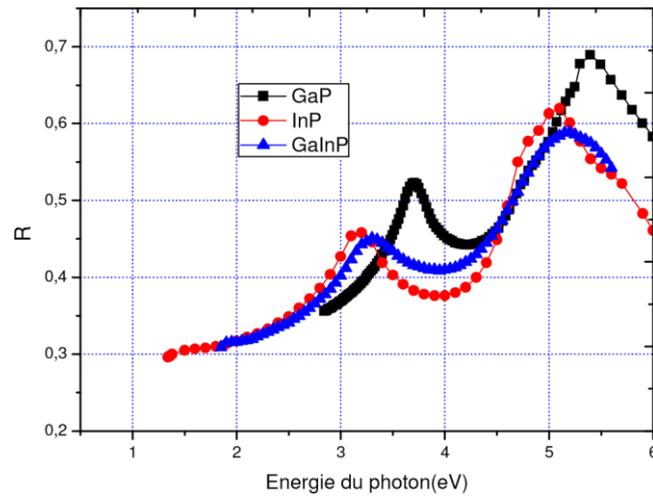


Figure (I-28) Coefficient de réflexion des matériaux GaP, InP et Ga_{0.5}In_{0.5}P [64].

b- Coefficient d'absorption de GaInP

La modélisation des cellules solaires à base du semi-conducteur GaInP nécessite une connaissance précise de ses propriétés optiques. Plusieurs modèles ont été proposés pour le coefficient d'absorption du semi-conducteur GaInP, mais pour la plupart, les propriétés optiques à large bande du spectre adapté au GaInP ne sont pas décrites de manière adéquate. Le tableau (I-11) donne les différents modèles du coefficient d'absorption de GaInP et les variations de ce dernier en fonction de la longueur d'onde.

Le model	Valeur
Model de Kurtz et al Réf. [65-61]	$\alpha(GaInP) = 5.5\sqrt{E - E_g} + 1.5\sqrt{E - (E_g - 0.1)}$
Model Réf. [66]	$\alpha(GaInP) = 4.55\sqrt{E - E_g} + 2.05\sqrt{E - (E_g - 0.1)}$
Model S. Adachi [64]	Tableau
Model Silvaco	Référence [67]

Tableau (I-11) Coefficient d'absorption du matériau InGaP.

I-5-5. Résistivité thermique du matériau GaInP

La variation de la résistivité thermique du matériau $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$, en fonction de la concentration (x) de Ga, est donnée par la figure (I-29). On voit que le maximum de la résistivité thermique est obtenu pour $x=0.5$; ce qui fait de ce matériau un candidat potentiel dans les applications spatiales et dans les systèmes à concentrateurs.

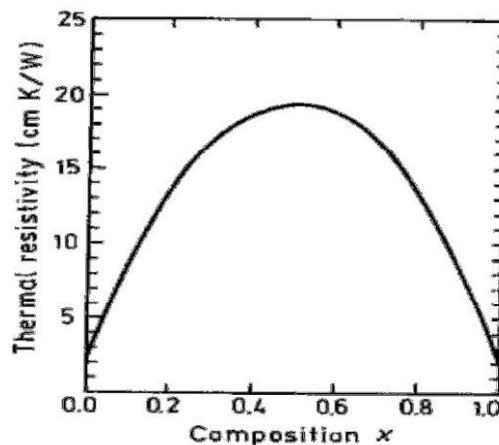


Figure (I-29) Variation de la résistivité thermique en fonction de la fraction molaire (x) dans un alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ à 300K [58].

I-6. L'Arséniure de Gallium (GaAs)

Le GaAs est un semi-conducteur III-V complexe composé de l'élément de gallium (Ga) de la colonne III et l'élément de l'arsenic (As) de la colonne V du tableau périodique des éléments. Le GaAs a d'abord été créé par la société Goldschmidt en 1929, mais les premières propriétés électroniques de ce semi-conducteur ne furent démontrées qu'en 1952.

I-6-1. Structure cristalline d'Arséniure de Gallium (GaAs)

L'arséniure de gallium (GaAs) est un composé de la famille III-V. Il cristallise dans la structure du Zinc Blende. Figure (I-30) [68]. son réseau cristallin peut se décomposer en deux sous-réseaux cubiques à faces centrées interpénétrés, l'un étant constitué des atomes de l'élément du groupe III (Ga), l'autre des atomes de l'élément du groupe V(As) ; Ces deux sous-

réseaux sont décalés l'un par rapport à l'autre du quart de la diagonale principale, c'est-à-dire d'une quantité de $a_0/4$ (1, 1, 1), a_0 étant le paramètre cristallin, où chaque atome se trouve donc au centre d'un tétraèdre régulier dont les sommets sont occupés par un atome de l'autre espèce.

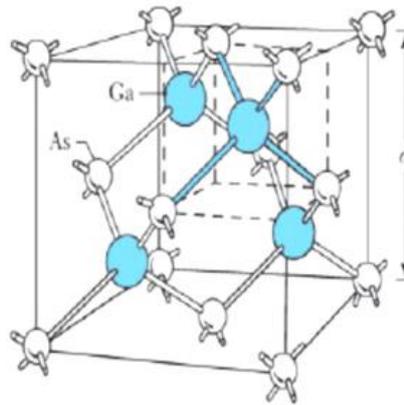


Figure (I-30) Structure cristalline du GaAs [58].

I-6-2. Propriétés électriques et physiques du GaAs

Les propriétés physiques et électriques de l'arséniure de gallium à la température ambiante (300K°) sont regroupées dans le tableau (I-12).

Paramètre	Valeur
Paramètre de maille	5.65 Å [58] [69]
Energie de gap E_g	1.424 eV [58] [69]
Densité	5.32 g/cm ³ [54]
Coefficient de dilatation thermique linéaire	5.73.10 ⁻⁶ °C ⁻¹ [58]
Constante diélectrique ϵ_r	13.18 [69]
Affinité électrique χ	4.07 eV [58] [69]
Recombinaison radiative A_0	10 ⁻¹⁰ cm ³ /s [58]
Recombinaison en surface	Surface libre : 4.10 ⁵ cm/s [58]
Densité effective d'état N_c	4.7.10 ¹⁷ cm ⁻³ [58]
Densité effective d'état N_v	9.8.10 ¹⁸ cm ⁻³ [58]

m_e^*/m_0	0.067 [70]
m_h^*/m_0	0.642 [70]

Tableau (I-12) Propriétés du GaAs à température ambiante (300 K)

I-6-3. Structure des bandes d'énergie de GaAs

Les bandes d'énergie donnent les états d'énergie possibles pour les électrons en fonction de leurs vecteurs d'onde. On les représente donc dans l'espace réciproque, et pour simplifier, dans les directions de plus hautes symétries de la première zone de Brillouin. Elles se décomposent en bandes de conduction la plus haute, la bande de valence la plus basse, et la bande interdite qui les sépare qui détermine principalement les propriétés de transport du semi-conducteur.

Pour le GaAs, le maximum de la bande de valence est en $K=0$ et celle-ci est doublement dégénérée avec deux branches $E=f(K)$ confondues au centre de la zone de Brillouin figure (I-31).

Les deux bandes décrivent la disposition de porteurs de masses effectives différentes, la masse des trous lourds est de $0.68m_0$, celle des trous légers de $0,12m_0$ où m_0 est la masse de l'électron au repos. Une troisième branche de la bande de valence est abaissée par rapport aux deux premières d'une énergie Δ , égale à $0,33$ eV La bande de conduction présente, au centre de la zone de Brillouin ($K=0$) un minimum non dégénérée, qui est une vallée à symétrie (Γ) appelée vallée centrale. Il existe également d'autres minima à des niveaux d'énergie plus élevée, les 4 vallées à symétrie L dans la direction $\langle 111 \rangle$ et les directions équivalentes.

D'après la courbure des différentes vallées, à la quelle est reliée la masse effective des électrons beaucoup plus légers et donc beaucoup plus mobiles que dans les vallées X et L. Cette propriété est en partie responsable de certaines caractéristiques des phénomènes de transport dans le semi-conducteur GaAs.

L'arséniure de gallium étant un composé à gap direct, les transitions électriques les moins énergétiques entre la bande de valence de la bande de conduction peuvent se faire avec conservation du vecteur d'onde K (sans l'intervention des phonons).

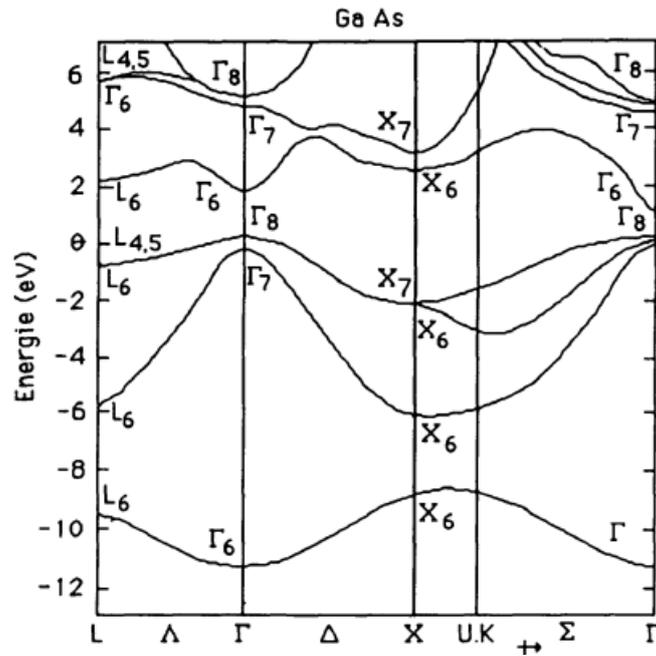


Figure (I-31) Structure de bande de GaAs [58].

I-6-4. Mobilité des porteurs

La variation de la mobilité des trous, dans le matériau GaAs en fonction de la concentration du dopage et de la température, est obtenue à partir des données expérimentales des travaux de Wiley [54] :

$$\mu_p = \left[0.0025 \left(\frac{T}{300} \right)^{2.3} + 4 \cdot 10^{-21} N \left(\frac{T}{300} \right)^{1.5} \right]^{-1} \quad (\text{I-35})$$

Où T est la température absolue en °K et N la concentration du dopage des trous.

D'une part, la variation de la mobilité des électrons, en fonction de la concentration dans le matériau GaAs, est donnée par Rode [54].

$$\mu_n = 9400 \left(\frac{300}{T} \right)^{0.67} \left[1 + \frac{N}{10^{17}} \right]^{-0.5} \quad (\text{I-36})$$

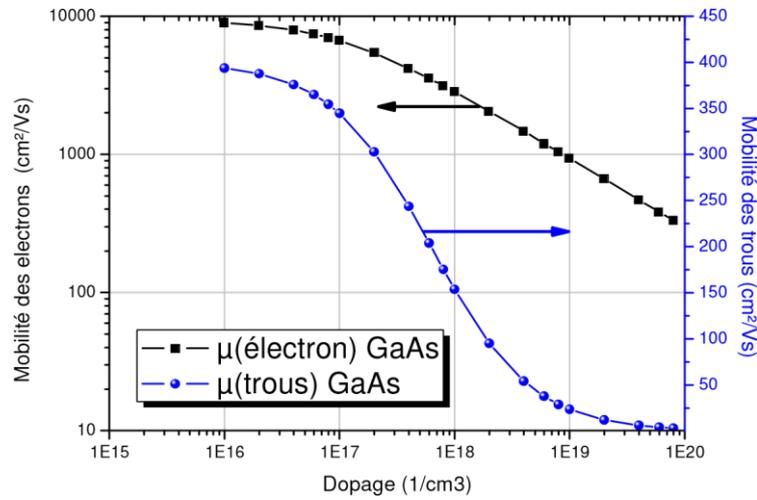


Figure (I-32) Variation de la mobilité des électrons et des trous en fonction de la concentration du dopage dans les matériaux : a) GaAs, b) GaInP.

I-6-5. Durée de vie des porteurs minoritaires

La durée de vie des porteurs minoritaires dans GaAs est donnée par l'expression (I-37) [54] :

$$\frac{1}{\tau_{n,p}} = \frac{1}{\tau_{n,r}} + BN_{A,D} \quad (\text{I-37})$$

Où B est le coefficient de la recombinaison radiative, sa valeur moyenne est de l'ordre de $1.36 \times 10^{-10} \text{ cm}^3/\text{s}$ à 300K dans les deux régions n et p, $\tau_{n,r}$ est la durée de vie de la recombinaison non radiative donnée par la formule suivante [54] :

$$\frac{1}{\tau_{n,r}} = \frac{1}{\tau_{SRH}} + CN_{A,D}^2 \quad (\text{I-38})$$

Où C est le coefficient de recombinaison d'Auger dont la valeur optimale est de $5 \times 10^{-31} \text{ cm}^6/\text{s}$. La valeur expérimentale de τ_{SRH} (Shockley-Read-Hall) est $0.9 \mu\text{s}$ [54].

I-6-6. Propriétés optiques

a- Indice de réfraction et coefficient de réflexion

Les propriétés optiques du matériau GaAs sont représentées sur la figure (I-33).

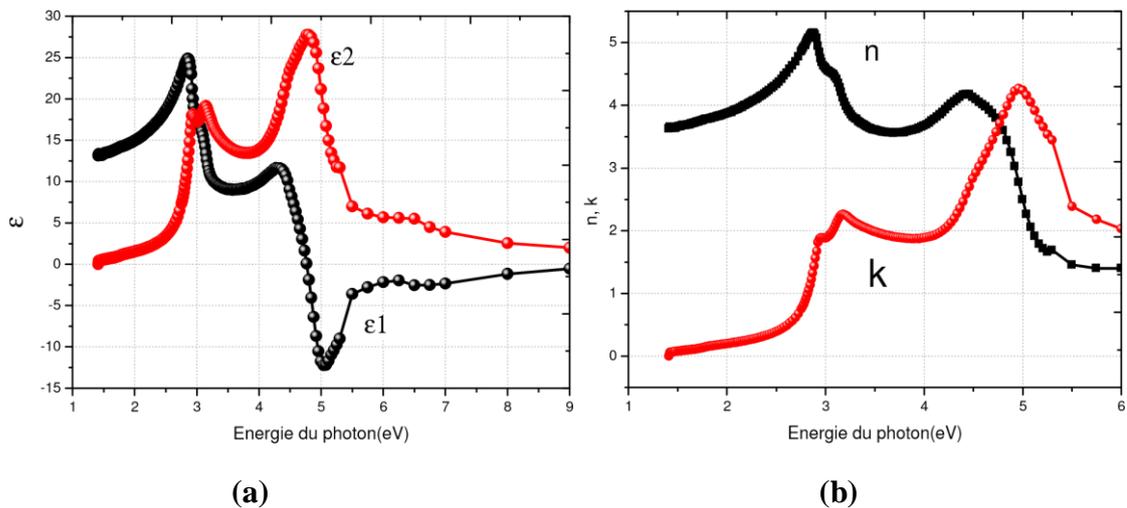


Figure (I-33) (a) Spectre de la constante diélectrique, (b) Spectre de l'indice de réfraction $n(E)$ et coefficient d'extinction $k(E)$ du matériau GaAs [64].

b- Coefficient d'absorption de GaAs

La figure (I-34) présente le coefficient d'absorption et de réflexion du matériau GaAs selon S. Adachi Réf [64].

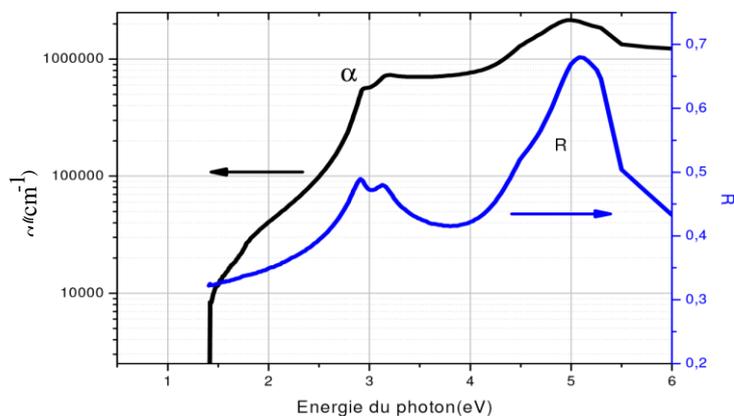


Figure (I-34) Coefficient d'absorption et de réflexion du matériau GaAs [64].

I-7. Conclusion

Nous avons vu dans ce premier chapitre les caractéristiques et les propriétés des semi-conducteurs III-V, et en particulier les matériaux utilisés dans notre simulation : l'InGaN, l'InGaP et le GaAs. Nous avons élargi l'étude sur l'InGaN parce qu'il représente une nouvelle catégorie des matériaux possédant des propriétés uniques : un large gap d'énergie interdite, de fortes liaisons interatomiques ou encore une forte conductivité thermique qui les rendent très intéressants pour l'optoélectronique à haute température et grande puissance.

Nous avons détaillé les différents substrats possibles pour l'épitaxie de l'InGaN.

Nous allons maintenant passer au deuxième chapitre décrivant l'effet photovoltaïque, les paramètres des cellules solaires. Afin de mieux comprendre les enjeux, nous décrirons également le spectre solaire arrivant sur la Terre, les autres filières photovoltaïques et le rendement maximum d'une cellule.

I-8. Références bibliographiques

- [1] R. Castagné et all. Circuits Intégrés en arséniure de Gallium. Physique, technologie et règles de conception. Masson et CINET ENST Paris, (1989).
- [2] S.Laval .Physique des semi-conducteurs III-V, Ecole d'été d'optoélectronique. Lyon (2002).
- [3] Henry Mathieu. Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques, Masson, (1987).
- [4] Gerald Bastard, Wave mechanics applied to semiconductor hetero-structures. Les éditions de physique, paris, (1988).
- [5] Bernardini, F., Fiorentini, V. and Vanderbilt, D. Spontaneous polarization and piezoelectric Communications. 11, 617, (1972).
- [6] Liu, L. and Edgar, J.H. Substrates for gallium nitride epitaxy. Materials Science and Engineering R. 2002, Vol. 37, 61.
- [7] A. Dussaigne, " Diodes électroluminescentes blanches monolithiques", thèse de doctorat, Université de Nice-Sophia Antipolis, (2005).
- [8] Wright, A.F. and Nelson, J.S. Explicit treatment of the gallium 3d electrons in GaN using the plane-wave pseudo-potential method. Physical Review B, Vol.50, 2159,(1994).
- [9] Edger, J.H. Properties of Group III Nitrides. Electronic Materials Information Service (EMIS) Datareviews Series. London: Institution of Electrical Engineers, (1994).
- [10] Morkoç, H. Handbook of Nitride Semiconductors and Devices. Weinheim: WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Vol 1, 2008.
- [11] I. Vurgaftman and J. R. Meyer. Band parameters for nitrogen-containing semiconductors. Journal of Applied Physics, 94(6):3675–3696, (2003).
- [12] F. Bernardini, V. Fiorentini, and D. Vanderbilt. Spontaneous polarization and piezoelectric constants of III-V nitrides. Physical Review B, Vol 56:10024–10027, Oct (1997).
- [13] F. Bernardini and V. Fiorentini. Nonlinear Behavior of Spontaneous and Piezoelectric Polarization in III-V Nitride Alloys. physica status solidi (a), 65- 73, March (2002).
- [14] Vincenzo Fiorentini, Fabio Bernardini, and Oliver Ambacher. Evidence for nonlinear macroscopic polarization in iii–v nitride alloy heterostructures. Applied Physics Letters, 80(7):1204–1206, (2002).

- [15] K. Shimada, T. Sota, and K. Suzuki. First-principles study on electronic and elastic properties of BN, AlN, and GaN. *Journal of Applied Physics*, 84(9):4951–4958, (1998).
- [16] A. Polian, M. Grimsditch, and I. Grzegory. Elastic constants of gallium nitride. *Journal of Applied Physics*, 79(6) :3343–3344, (1996).
- [17] El Guemili youssef « Etude et caractérisations par cathodoluminescence de couches minces d’InGaN pour le photovoltaïque ». Thèse de doctorat, université de Lorraine, (2013).
- [18] A. F. Wright. Elastic properties of zinc-blende and wurtzite AlN, GaN, and InN. *Journal of Applied Physics*, 82(6) :2833–2839, (1997).
- [19] V. Yu. Davydov, Yu. E. Kitaev, I. N. Goncharuk, Mirgorodsky, and R. A. Evarestov. Phonon dispersion and Raman scattering in hexagonal GaN and AlN. *Physical Review B*, 58:12899–12907, Nov (1998).
- [20] K. Kim, W. R. L. Lambrecht, and B. Segall. Elastic constants and related properties of tetrahedrally bonded BN, AlN, GaN, and InN. *Physical Review B*, 53:16310–16326, Jun (1996).
- [21] H. Morkov. *Handbook of Nitride Semi-conductors and Devices*. Weinheim : WILEY-VCH Verlag GmbH and Co, (2008).
- [22] Pousse, A., Atkins, P. and Jones, L. *Chimie : molécules, matière, métamorphoses*. 3ème édition. Paris: DeBoeck Université, (1998).
- [23] Wu, J. When group-III nitrides go infrared: New properties and perspectives. *Journal of Applied Physics*, Vol 106. (2009).
- [24] Yam, F.K. and Hassan, Z. InGaN : An overview of the growth kinetics, physical properties and emission mechanisms. *Superlattices and Microstructures*, Vol 43 (1). (2008).
- [25] Cláudio de Carvalho, L., Schleife, A. and Bechstedt, F. Influence of exchange and correlation on structural and electronic properties of AlN, GaN, and InN polytypes. *Physical Review B*, Vol (84), (2011).
- [26] Fritsch, D., Schmidt, H. and Grundmann, M. Band dispersion relations of zinc-blende and wurtzite InN. *Physical Review B*, Vol (69). (2004).
- [27] Vurgaftman, I. and Meyer, J.R. Band parameters for nitrogen-containing semiconductors. *Journal of Applied Physics*. Vol (94) 3675. (2003).
- [28] Vegard, L. *Z. Phys.* 1921, Vol. 5, 17.
- [29] Denton, A.R. and Ashcroft, N.W. Vegard's Law. *Physical Review A*, Vol. 43. (1991).
- [30] Axon, H.J. and Hume-Rothery, W. *Proc. R. Soc. London A*, Vol. 1, A193. (1948).

- [31] Katsikini, M., et al. Raman study of Mg, Si, O, and N implanted GaN. *Journal of Applied Physics*, Vol (94), 4389. (2003).
- [32] Wu, J., et al. Universal bandgap bowing in group-III nitride alloys. *Solid State Communations*, Vol. (127), 411. (2003).
- [33] Donmez, O., et al. High carrier concentration induced effects on the bowing parameter and the temperature dependence of the band gap of $Ga_xIn_{1-x}N$. *Journal of Applied Physics*. Vol. 110. (2011).
- [34] Shan, W., et al. Optical properties of $In_xGa_{1-x}N$ alloys grown by metal organic chemical vapor deposition. *Journal of Applied Physics*, Vol. 84, 4452. (1998).
- [35] Monemar, B. Fundamental energy gap of GaN from photoluminescence excitation spectra. *Physical Review B.*, Vol. 10, 676. (1974).
- [36] Bougrov, V., et al. *Properties of Advanced Semiconductor Materials GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe*. New York: John Wiley & Sons, Inc., (2001).
- [37] Wu, J., et al. Temperature dependence of the fundamental band gap of InN. *Journal of Applied physics*, Vol 94, 4457 (2003).
- [38] Schaff, W.J., et al.: *Physica Status Solidi B*, Vol (245): 1520- 1526, (2008).
- [39] Duan, X.M. and Stampft, C. 115207, s.l.: *Physical Review B*, Vol. 77. (2008).
- [40] Yildiz, A., et al. Structural, electrical and optical characterization of InGaN layers grown by MOVPE. *Chinese Physics B*, Vol. 18, 4007. (2009).
- [41] Neugebauer, J. and Van de Walle, C.G. Atomic geometry and electronic structure of native defects in GaN. *Physical Review B.*, Vol. 50, 8067. (1994).
- [42] Gorczyca, I., Svane, A. and Christensen, N.E. Theory of point defects in GaN, AlN, and BN: Relaxation and pressure effects. *Physical Review B.*, Vol. 60, 8147. (1999).
- [43] Stampfl, C., et al. Native defects and impurities in InN: First principles studies using the localdensity approximation and self-interaction and relaxation-corrected pseudo-potentials. *Physical Review B.*, Vol. 61, 7846. (2000).
- [44] Optical constants of GaN (Gallium nitride). *Refractive Index.Info*. [Online] 2011. [Cited: 12 23, 2011.] <http://refractiveindex.info/?group=CRYSTALS&material=GaN>.
- [45] Anani, M., et al. $In_xGa_{1-x}N$ refractive index calculations. *Microelectronics Journal* Vol. 38, 262. (2007).
- [46] Morkoç, H. *Handbook of Nitride Semiconductors and Devices*. Weinheim : WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA. Vol. 1. 978-3-527-40837-5. (2008).

- [47] Maruskas, H.P. and Tietjen, J.J. The preparation and properties of vapor-deposited singlecrystalline GaN. *Applied Physical Letters*. Vol. 15, 327. (1969).
- [48] Liu, L. and Edgar, J.H. Substrates for gallium nitride epitaxy. *Materials Science and Engineering R*. Vol. 37, 61. (2002).
- [49] MTI Corporation. Crystals substrates: A-Z. [Online] [Cited: 11 16, 2011.]
- [50] Walukiewicz, W. Intrinsic limitations to the doping of wide-gap semiconductors. *Physica B*. Vols. 302-303, 123-134. (2011).
- [51] Li, N., et al. Suppression of phase separation in InGaN layers grown on lattice-matched ZnO substrates. *Journal of Crystal Growth*. Vol. 311, 4628. (2009).
- [52] Romanyuk, Y.E., et al. Molecular beam epitaxy of InGaN thin films on Si(111): Effect of substrate nitridation. *Thin Solid Films*. Vol. 517 : 6512-6515. (2009).
- [53] Barton, J. and Guillemet, C. *Le Verre, Science et Technologie*. s.l: EDP Sciences,. ISBN 2- 86883-789-1. (2005).
- [54] D. Ahmari, M. Fresina, Q. Hartmann, P. Barlage, M. Feng, G. Stillman. InGaP/GaAs Heterojunctions bipolar transistor grown on a semi-insulating InGaP buffer layer. *IEEE Electron Device Letters*, Vol. 18 (1997).
- [55] W. Lour, J. Tsai, L. Laih, W. Liu. Influence of channel doping-profile on camel-gate field-effect transistor. *IEEE Transactions on Electron Devices*, Vol.43: 871-876, (1996).
- [56] Peter S. Zory Jr., Paul F. Liao, Paul K. *Quantum Well Lasers*. Academic Press. (1993).
- [57] A. Haas, J. Wilcox, J. Gray, and R. Schwartz. Design of a GaInP/GaAs tandem solar cell for maximum daily, monthly, and yearly energy output. *Journal of Photonics for Energy* Vol. 1, (2011).
- [58] Y. A. Goldberg. *Handbook Series on Semiconductor Parameters*. Vol. 2, World Scientific, London (1999).
- [59] S. M. Sze. *Physics of Semiconductors Devices*. 2nd Edition, John Wiley & Sons, (2001).
- [60] A. Mc. Evoy, T. Markvart and L. Castaner. *Practical Handbook of Photovoltaics Fundamentals and Applications, Second Edition*”, Elsevier Ltd, (2012).
- [61] J. M. Olson, D. J. Friedman and S. Kurtz. High Efficiency III-V Multijunction Solar Cells. *Handbook of Photovoltaic Science and Engineering*. John Wiley & Sons, (2003).
- [62] M. Green. *Solar Cells, Operating Principles, Technology and System Applications*. University of New South Wales, (1998).

- [63] Brozel MR, Stillman GE. Properties of Gallium Arsenides. 3rd edition, Institution of Electrical Engineers, (1996).
- [64] S. Adachi. Optical Constants of Crystalline and Amorphous Semiconductors- Numerical Data And Graphical Information. Springer, NewYork, NY,USA, (1999).
- [65] S. R. Kurtz, J. M. Olson, D. J. Friedman, J. F. Geisz, K. A. Bertness, and A. E. Kibbler . Passivation of Interfaces in High-Efficiency Photovoltaic Devices. conference paper Materials Research Society's Spring Meeting San Francisco, California April 5-9, (1999).
- [66] P. J. Faine, Sarah R. Kurtz, J. M. Olson. Modeling of two-junction, series-connected Tandem solar cells using Top –cell and coating thicknesses as adjustable parameters. Photovoltaic Specialists Conference, Conference Record of the Twenty First IEEE, Kissimmee, FL, Vol.1: 339 – 344, 21-25 May (1990).
- [67] SILVACO International, “ATLAS User’s Manual device simulation software-Volume I”, February (2000).
- [68] A. F. Maftah, N.Sengouga, A. M. Maftah, S. Khelifi. Numerical simulation of the effect of the Al molar fraction and thickness of an $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ Window on sensitivity of a p+n-n+ GaAs solar cell to 1Mev electron irradiation. Renewable Energy Vol. 34: 2426-2431, (2009).
- [69] S. Adachi. GaAs, AlAs, and $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$: Material parameters for use in research and devise applications. J. Appl. Phys, Vol. 58(3): R1-R29, (1985).
- [70] A. Ryan. Modeling Solutions and Simulations for Advanced III-V Photovoltaics based on Nanostructures. Master of Science thesis, Rochester Institute of Technology Rochester, NY, December (2008).
- [71] S. Adachi. Properties of Group-IV, III–V and II–VI Semiconductors. John Wiley & Sons Ltd, Wiley series in materials for electronic and optoelectronic applications, (2005).

Chapitre II

La conversion photovoltaïque

II-1. Introduction

Le mot « photovoltaïque » vient du grec « photos » qui signifie lumière et de « Volta » du nom du physicien italien qui en 1800 découvrit la pile électrique.

L'énergie solaire photovoltaïque convertit directement le rayonnement lumineux (solaire ou autre) en électricité. Elle utilise pour ce faire des modules photovoltaïques composés de cellules solaires ou de photopiles qui réalisent cette transformation d'énergie. La conversion photovoltaïque a été réalisée pour la première fois dans le laboratoire Bell en 1954 sur une simple jonction P-N au Silicium. Par suite, plusieurs semi-conducteurs ont été utilisés pour cet objectif.

L'application terrestre et spatiale de ces matériaux en photovoltaïque dépend fortement de leurs propriétés optoélectroniques et thermiques. Ces deux applications sont très importantes, notamment, l'application spatiale pour alimenter les satellites en électricité utilisés dans plusieurs domaines (télécommunication, militaires, météorologie,...). L'application terrestre ayant ainsi un impact important sur l'éclairage des routes désertiques, les signalisations dans les ports. L'alimentation des habitations et des radars isolés.

Les cellules photovoltaïques ou photopiles sont des dispositifs de conversion d'énergie de la lumière. Trois processus élémentaires interviennent dans l'effet photovoltaïque :

- L'absorption de la lumière dans le matériau.
- Le transfert d'énergie des photons aux charges électriques.
- La collecte des charges.

Il est donc clair, qu'un matériau doit avoir des propriétés optiques et électriques spécifiques pour permettre la conversion photovoltaïque. Jusqu'à l'année 1976, époque où les premières jonctions ont vu le jour, le principal matériau à utilisation photovoltaïque était le Silicium monocristallin. Les jonctions réalisées grâce à ce matériau permettent en effet de transformer les photons en un courant électrique avec des rendements de

conversion η qui sont à l'heure actuelle, de l'ordre de 15% au niveau industriel, mais qui ont atteint 20% dans le laboratoire. Comme le Silicium monocristallin, des composés tels que le GaAs ont abouti à des rendements assez importants (plus qu'un quart de la puissance incidente est convertie par des cellules à base de GaAs), ainsi que des rendements de plus de 30% ont été obtenus grâce à des cellules multi-jonctions (tandems solaires) [1].

II-2. Spectre solaire et l'air masse

Le soleil est une étoile de forme pseudo-sphérique dont le diamètre atteint 1391000Km. Il est situé à une distance moyenne de 149598000Km de la terre. Composé de matière gazeuse, essentiellement de l'hydrogène et de l'hélium, il est le siège de réactions de fusion nucléaire permanentes et sa température de cœur atteint 10^7 K [2].

L'énergie radiative provient du soleil est à cause des réactions de fusion nucléaire au cœur de cette étoile. A chaque seconde une énorme quantité de masse (6.10^{11} Kg) de l'hydrogène (H_2) est convertie en Hélium (He), avec une perte de masse nette environ de 4.10^3 Kg, ce qui est équivalent à 4.10^{20} j d'après la relation d'Einstein ($E = mc^2$). Cette énergie est émise principalement en tant que rayonnement électromagnétique dans une large gamme s'étalent de l'ultraviolet à l'infrarouge et même dans les ondes radio [2,3].

L'énergie lumineuse dite « extraterrestre » c'est à dire hors atmosphère a été évaluée avec précision par la NASA et vaut $1367w/m^2$. Il s'agit de l'irradiante reçue, ou rayonnement solaire instantané à un instant donné au dessus de l'atmosphère terrestre, en incidence normale (c'est à dire sur un plan perpendiculaire à la direction du soleil). On appelle cette valeur « constante » solaire mais elle ne l'est pas tout à fait à cause des légères variations de la distance terre-soleil.

Cette énergie qui descend en ligne droite vers notre planète ne peut pas nous parvenir sur la terre en intégralité car elle va subir des transformations en traversant l'atmosphère par absorption et par diffusion.

En effet l'atmosphère est formée, d'une majorité d'azote et d'oxygène (respectivement 78% et 21%), mais aussi de l'argon. Du CO_2 , de la vapeur d'eau, et la fameuse couche

d'ozone de la stratosphère, dont le rôle de filtrage des UV les plus durs est si important. Les poussières et les nuages ont aussi leur importance dans la diffusion du rayonnement solaire. Le degré auquel l'atmosphère affecte la lumière du soleil reçu sur la surface de la terre est traduit par plusieurs « air mass », et l'angle entre le rayonnement provenant du soleil et le zénith définit l'air masse [2-3].

II-2-1. L'air masse

L'intensité lumineuse issue du soleil normalement incidente sur la surface de la Terre est appelée la constante solaire. Cette constante est approximativement d'une valeur de $1,4 \text{ kW/m}^2$ au-dessus de la couche atmosphérique et est réduite sur Terre à 1 kW/m^2 par réflexion et absorption des particules présentes dans la couche atmosphérique. Cette perte est appelée la « masse d'air » (AM). La désignation AM0 correspond à une masse d'air nulle pour la lumière arrivant au-dessus de notre atmosphère à incidence normale. Le titre AM1 correspond lui à une même lumière arrivant à la surface terrestre. L'appellation AM1.5 désigne la masse d'air rencontrée pour la lumière arrivant à $48,2^\circ$ sur la surface de la Terre, soit une lumière plus faible du fait que l'épaisseur de la couche atmosphérique traversée est plus grande figure (II-1)

De manière générale, l'indice m associée à la masse d'air (AM m) est calculé comme suit : $m \approx 1 / \sin(A)$. A étant l'angle entre l'incidence des rayons lumineux et l'horizontale à la terre.

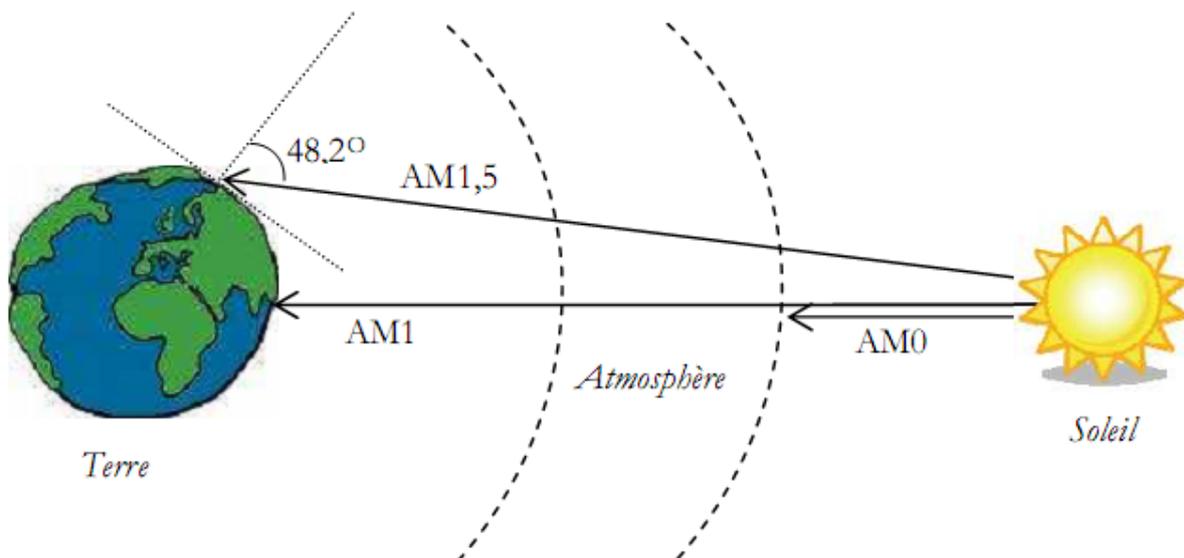


Figure (II-1) Définition de l'air masse [4].

II-2-2. Spectre solaire

Le spectre du soleil c'est sa décomposition en longueurs d'onde. La lumière solaire est en effet composée de toutes sortes de rayonnements de couleurs différentes, caractérisées par leur gamme de longueur d'onde. Les photons, grains de lumière qui composent ce rayonnement électromagnétique, sont porteurs d'une énergie qui est reliée à leur longueur d'onde par la relation :

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$$

Où h est la constante de Plank, ν : la fréquence, c : la vitesse de la lumière et λ la longueur d'onde.

C'est cette relation mise à jour par Louis de Broglie en 1924 qui a confirmé la nature à la fois corpusculaire et ondulatoire de la lumière : présence de corpuscules- les photons – et propagation d'ondes avec une fréquence de vibration et une longueur d'onde.

Une courbe standard de la répartition spectrale du rayonnement solaire extraterrestre, compilée selon les données recueillies par les satellites est désignée sous le nom de AMO. Sa distribution en énergie est répartie comme suit :

Ultraviolet UV	$0,20 < \lambda < 0,38 \mu\text{m}$	6,4%
Visible	$0,38 < \lambda < 0,78 \mu\text{m}$	48%
Infra- Rouge IR	$0,78 < \lambda < 10 \mu\text{m}$	45,6%

La figure (II-2) montre quatre courbes liées à la radiation spectrale solaire qui est la puissance par unité de superficie par unité de longueur d'onde. La courbe supérieure qui représente le spectre solaire en dehors de l'atmosphère de la terre, est l'état de la masse d'air zéro (AMO) ; sa puissance vaut 1367 w/m^2 , cette condition peut être simulée par un corps noir à 5800k , montrée par la courbe en pointillée. Le spectre AMO est utilisé pour les applications (satellites et véhicules spatiaux). Le spectre AM1 représente la lumière du soleil sur la surface de la terre quand le soleil est au zénith, la puissance d'incidence est environ 925 w/m^2 . Le spectre AM2 est obtenu pour un angle de 60° et à une puissance d'environ 691 w/m^2 . L'air masse AM 1,5 est défini par l'angle 48.2° , au dessus de l'horizon et une intensité de 844 w/m^2 , cet air masse est approprié par des applications terrestres.

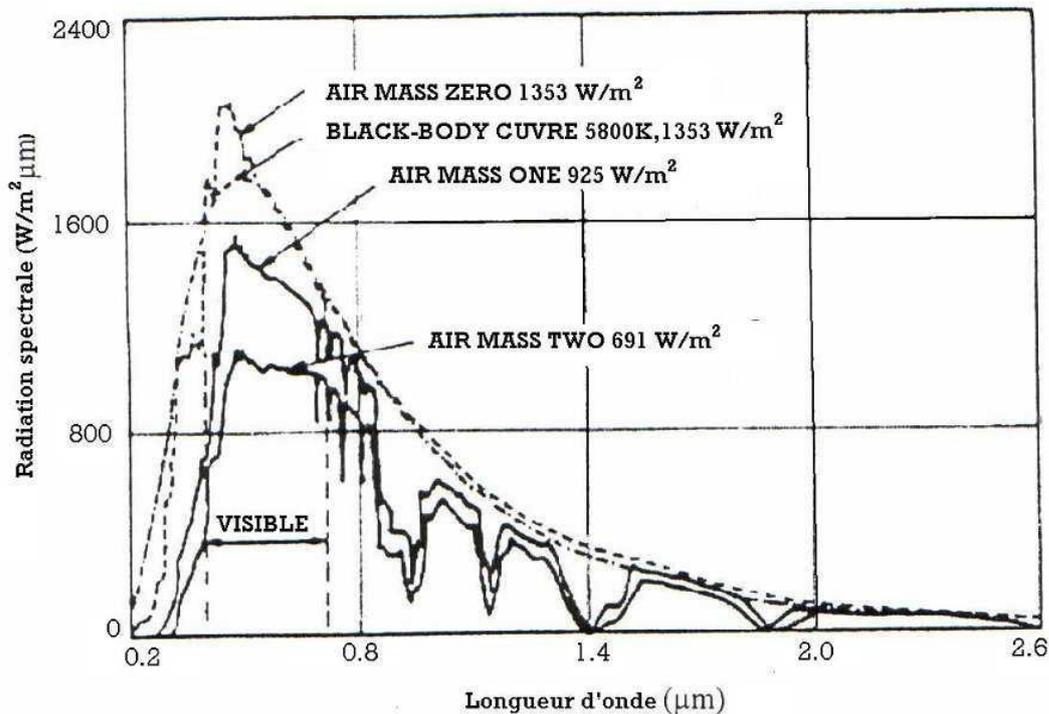


Figure (II-2) Radiation spectrale pour différents air masses [3].

II-3. Description de la structure d'une cellule solaire

La première structure de la cellule solaire était très simple. Elle était incapable d'offrir des performances élevées et de délivrer une puissance satisfaisante aux charges. Elle avait aussi beaucoup d'inconvénients et des pertes importantes soit par réflexion, soit par les contacts ohmiques et par la recombinaison. Cette structure a subi plusieurs modifications. La structure actuelle tient à optimiser les performances de la structure classique. Elle est constituée de plusieurs couches, l'élément de base de ces structures est la jonction P-N, elle joue le rôle principal dans le dispositif solaire, et elle est le siège de la génération des porteurs et de leurs séparations. Pour que la pile solaire soit utile, et pour que l'électricité qu'elle produise passe convenablement dans la charge, la grille doit avoir une forme spéciale afin que la surface active de la cellule ne soit pas occultée.

Quand la lumière du soleil traverse le verre et l'adhésif, elle rencontre une couche antireflet (ARC). Cette couche est également transparente, elle réduit la quantité de lumière du soleil

reflétée par la cellule. Sans ARC, la pile solaire agit comme un miroir et reflète jusqu'à 30% de la lumière frappant la cellule. L'ARC réduit au minimum cette réflexion, en ramenant les pertes de réflexion à moins de 5% de sorte que la lumière du soleil va atteindre la surface de la cellule et diminuer les pertes optiques. La couche extérieure de la cellule est en verre pour protéger la structure contre l'environnement. Il est attaché au reste de la cellule avec un adhésif transparent. Les deux régions principales de la jonction sont appelées respectivement émetteur et base.

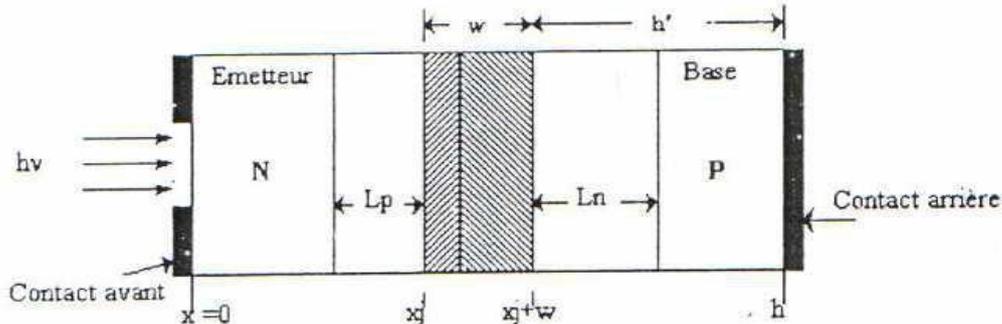


Figure (II-3) Structure d'une cellule solaire (N/P) [3].

II-4. Principe de fonctionnement d'une cellule solaire

Une cellule solaire se compose d'un certain nombre de couches, généralement deux couches principales, l'une est constituée d'un semi-conducteur de type N et l'autre de type P et inversement. C'est à la jonction ou interface métallurgique de ces deux couches que la cellule produit de l'électricité, celle-ci est un élément très important dans l'optoélectronique [5]. Ces semi-conducteurs sont des matériaux électroniques spéciaux, sensibles à la lumière, ayant deux propriétés principales pour produire l'électricité :

- Quand la lumière est absorbée, des électrons seront libérés dans le semi-conducteur et contribuent au courant.
- Lorsque les deux semi-conducteurs constituent une jonction, un champ électrique s'établit.

Le principe de fonctionnement d'une cellule solaire est illustré sur la figure (II-4). Les photons incidents créent des porteurs dans les régions N, P et la zone de charge d'espace. Le comportement de ces porteurs libres diffère suivant le lieu de leur création. Dans les zones électriquement neutres P et N, les photo-porteurs minoritaires diffusent. Ceux qui atteignent la région de charge d'espace sont propulsés par le champ électrique vers la région où ils

deviennent majoritaires. Ces photo-porteurs contribuent donc au courant par leur diffusion, ils créent un photo-courant de diffusion. Dans la zone de charge d'espace, les paires électrons-trous créés par les photons sont dissociées par le champ électrique, l'électron est propulsé vers la région de type n et le trou vers la région de type p. Les porteurs donnent naissance à un photo-courant de génération. Ces deux contributions s'ajoutent pour créer un photo-courant résultant J_{ph} qui contribue au courant inverse de la diode [6].

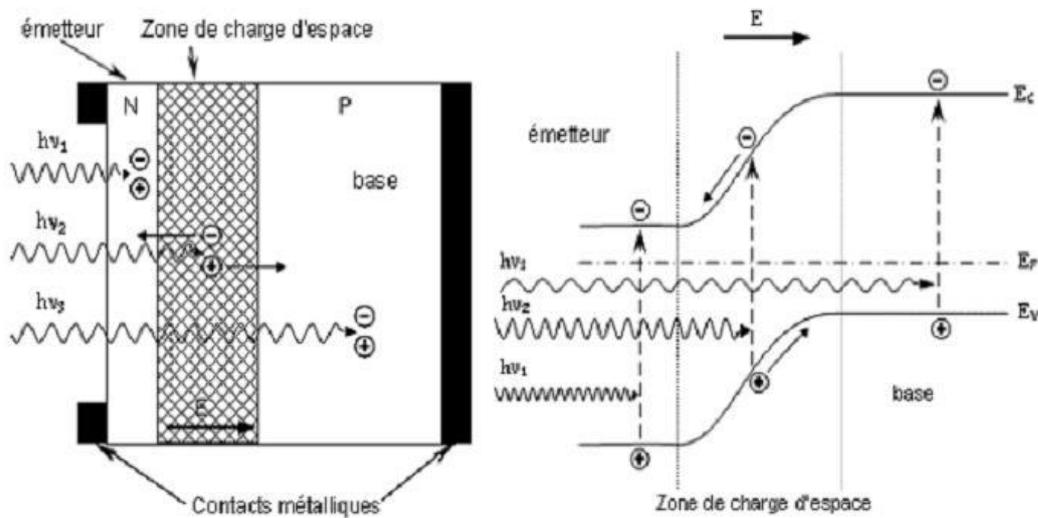


Figure (II-4) Principe de fonctionnement d'une cellule solaire [6].

II-5. Caractéristique I-V d'une cellule solaire

Les performances de la cellule solaire sont représentées à travers la caractéristique courant-tension $I(V)$. Cette dernière apporte une lecture claire des paramètres caractérisant la cellule solaire, comme le rendement de la cellule, les différents types des résistances parasites et le facteur de forme. Aussi on peut utiliser cette caractéristique pour contrôler et commander les paramètres physiques de la cellule tels que le dopage et l'épaisseur des couches. Le courant est mesuré en fonction de la tension appliquée sous obscurité et sous ensoleillement, la lumière permet de décaler la courbe I-V vers le bas dans le quatrième quadrant, car le courant photoélectrique provoque la production de l'énergie.

II-5-1. Caractéristique I-V sous obscurité

Dans l'obscurité la cellule solaire se comporte comme un composant actif (pas de production de courant). La densité de courant totale traversant la cellule solaire dans l'obscurité est donnée par :

$$J = J_0 \left[\exp\left(\frac{qV}{AK_B T}\right) - 1 \right] \quad (\text{II.1})$$

Ou par le courant :

$$I = I_0 \left[\exp\left(\frac{qV}{AK_B T}\right) - 1 \right]$$

Où K_B est la constante de Boltzmann ($1.38 \cdot 10^{-23}$ J/K), T la température absolue en degrés kelvin, q la charge élémentaire ($1.602 \cdot 10^{-19}$ C), A le facteur d'idéalité de la diode et J_0 le résultat de la recombinaison des porteurs minoritaires dans les deux régions quasiment neutres n et p, leur valeur est définie par l'équation (II.2).

$$J_0 = \left(\frac{D_p n_i^2}{L_p N_D} + \frac{D_n n_i^2}{L_n N_A} \right) \quad (\text{II.2})$$

Où D_p et D_n sont respectivement les coefficients de diffusion des porteurs minoritaires dans le matériau p et n, n_i la concentration intrinsèque, L_p et L_n la longueur de diffusion du porteur minoritaire dans le matériau p et n et N_D et N_A la concentration des deux régions P et n.

II-5-2. Caractéristique sous ensoleillement

L'étude de la cellule solaire sous ensoleillement peut se faire selon deux cas : Le cas idéal (pas de pertes) et le cas réel où l'on tient compte de l'effet des résistances parasites.

II-5-2-1. Caractéristique (J-V) dans le cas idéal

Lorsque la cellule solaire sous ensoleillement est traversée par un spectre solaire riche en photons de différentes énergies, un photo-courant est créé à ses bornes. Sa valeur est relative au flux lumineux. La caractéristique (J-V) de la cellule éclairée dans le cas idéal est représentée par l'équation (II.3). Ce modèle s'appelle modèle à simple exponentielle (on n'utilise qu'une seule diode dans la représentation). Le premier terme à gauche représente le courant de la cellule sous obscurité (J_{dark} : dark current) et le deuxième terme J_L représente le courant généré par la lumière.

$$J = J_0 \left[\exp\left(\frac{qV}{AK_B T}\right) - 1 \right] - J_L \quad (\text{II.3})$$

Le terme J_{01} représente la recombinaison dans les deux régions quasiment neutres N et P. Si on tient compte de la recombinaison dans la zone de charge d'espace, la représentation du schéma équivalent de la cellule contiendra deux diodes, ce modèle s'appelle modèle à double exponentielle.

Le courant sous obscurité est donné par la formule suivante :

$$J_{\text{dark}} = J_0 \left[\exp\left(\frac{qV}{K_B T}\right) - 1 \right] + J_{02} \left[\exp\left(\frac{qV}{K_B T}\right) - 1 \right] \quad (\text{II.4})$$

Où :

$$J_{02} = \frac{qn_i}{\tau_n + \tau_p} W \quad (\text{II.5})$$

W étant la largeur de la zone charge d'espace et τ_n, τ_p les durées de vie des électrons et des trous.

La figure (II-5) représente le schéma équivalent de la cellule solaire à simple et double exponentielle.

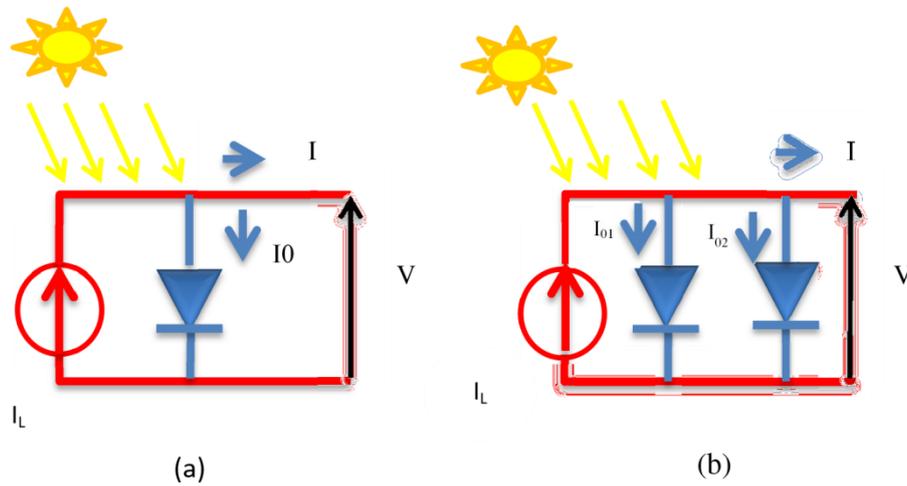


Figure (II-5) Schéma électrique équivalent de la cellule solaire. a) modèle à simple exponentielle, b) modèle à double exponentielle.

II-5-2-1-1. Paramètres photovoltaïques d'une cellule solaire dans le cas idéal

Le comportement de la cellule solaire est examiné à travers les quatre paramètres électriques (J_{CC} , V_{CO} , FF, η) où : J_{SC} représente la densité du courant de court-circuit, V_{CO} la tension en circuit ouvert, FF le facteur de forme et η le rendement de conversion de la cellule solaire. La figure (II-6) présente la caractéristique $J(V)$ d'une cellule solaire en obscurité et sous ensoleillement avec tous les paramètres électriques.

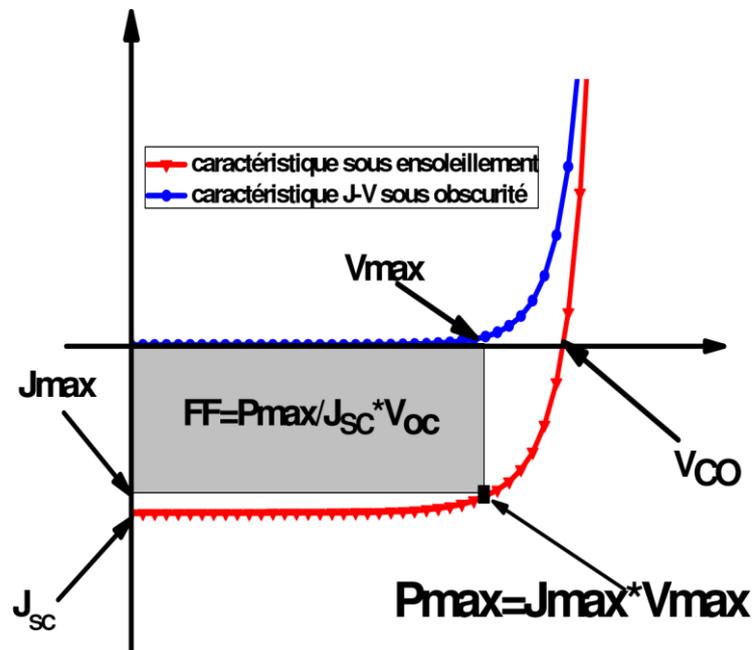


Figure (II-6) Caractéristique J(V) de la cellule solaire sous ensoleillement et sous obscurité.

a) La densité du courant de court-circuit (J_{CC})

C'est la densité de courant à une tension, aux bornes de la cellule solaire, nulle ($V=0$). Sa valeur peut être déterminée à partir du spectre solaire et du rendement quantique (QE) de la cellule solaire par l'équation (II.6) [7].

Dans les conditions idéales ($R_s = 0$, et $R_{sh} = \infty$) la densité du courant de court-circuit varie proportionnellement avec l'éclairement ($J_{CC} = J_L = K\Phi$) (où K est une constante et Φ le flux lumineux) [13].

$$J_{cc} = q \int F(\lambda) \{1 - R(\lambda)\} IQE(\lambda) d\lambda \quad (\text{II-6})$$

Où $F(\lambda)$ est la densité du flux incident sur une unité de surface par unité de temps (nombre de photons avec l'énergie dans la gamme de $[E, E + dE]$), $R(\lambda)$ est le coefficient de réflexion à partir de la surface supérieure et IQE est le rendement quantique interne de la cellule solaire (seuls les photons qui ne sont pas réfléchis sont considérés dans la valeur de IQE). Une bonne valeur du photo-courant s'obtient avec une cellule solaire qui a une forte absorption dans le visible et le proche de l'infrarouge et qui a aussi un rendement quantique QE proche de 1(100%) [8].

b) Rendement quantique de la cellule QE

Le rendement quantique donne la probabilité qu'un photon incident d'énergie E fournira un électron à un circuit externe. Il est considéré comme un paramètre quantitatif et qualitatif dans la description de la cellule solaire. Il permet de mesurer le nombre des électrons en sortie de la cellule solaire par rapport au nombre de photons incidents. Il permet aussi la quantification des pertes dans la cellule solaire (réflexion à la surface, pertes des photons de faible et forte énergie) figure (II-7). Ce qui nous aide à interpréter nos résultats et introduire des améliorations sur la cellule [9].

Le rendement quantique dépend de plusieurs propriétés du matériau; coefficient d'absorption, profondeur de jonction X_j , l'épaisseur de la zone de charge de déplétion, la durée de vie des porteurs et leur mobilité, la recombinaison en surface etc. [8].

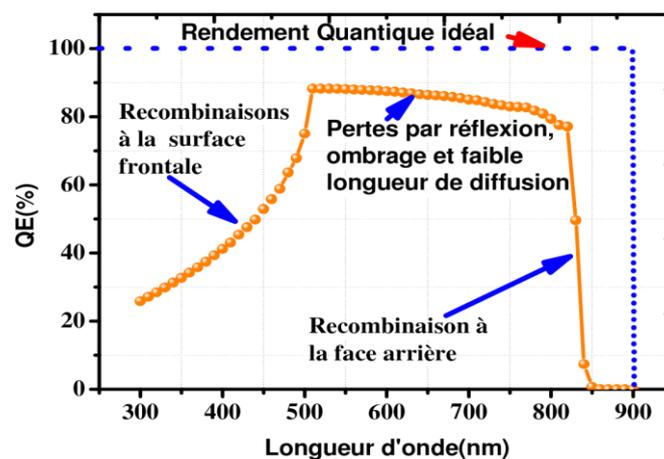


Figure (II-7) Rendement quantique externe de la cellule solaire et les différents types de pertes [10].

On note ici que la réponse spectrale est conceptuellement similaire au rendement quantique, elle s'exprime par le rapport entre le courant produit par la cellule solaire et la densité des photons incidents sur sa surface. Elle est strictement dépendante de la profondeur de la jonction et de l'état de la surface de la cellule (mince ou texturisée) [11].

$$SR(\lambda) = \frac{q\lambda}{hc} QE(\lambda) = 0.808 * \lambda * QE(\lambda) \quad (\text{II.7})$$

La réponse spectrale interne est définie comme le nombre de paires électron-trou, collectées en court circuit, par rapport au nombre de photons pénétrant dans le matériau. Cependant, la réponse spectrale externe n'est autre que la réponse interne, mais elle tient compte de la réflexion au niveau de la surface avant, c'est-à-dire, du rapport entre le nombre de paires électron-trou collectées par la jonction, et du nombre de photons incidents par unité de temps et de surface :

$$SR(\lambda)_{ext} = (1 - R - T)SR(\lambda)_{int} \quad (\text{II.8})$$

c) Tension en circuit ouvert (V_{CO})

Elle représente le maximum de tension aux bornes de la cellule solaire, pour un courant nul :

$$V_{CO} = \frac{AK_B T}{q} \ln \left[1 + \frac{J_L}{J_0} \right] \quad (\text{II.9})$$

La valeur du courant d'éclairement J_L est très grande par rapport à J_0 , donc on peut écrire l'équation (II.9) sous la forme :

$$V_{CO} = \frac{AK_B T}{q} \ln J_L - \frac{AK_B T}{q} \ln J_0 \quad (\text{II.10})$$

Cette formule montre bien qu'il faut minimiser le courant (J_0) qui représente le phénomène de recombinaison pour augmenter la tension en circuit ouvert. En plus, on remarque qu'il y a une

variation inverse entre le courant de saturation et la tension en circuit ouvert avec le gap des matériaux semi-conducteurs; quand ce dernier augmente le V_{CO} augmente et le courant de saturation diminue. Il en est de même pour la température ; quand cette dernière augmente le courant de saturation augmente et le V_{CO} diminue [8].

d) Facteur de forme FF (facteur de pertes)

Le facteur de forme est un critère de qualité de la cellule solaire. Il est représenté par la forme rectangulaire dans la caractéristique (J-V) de la figure 10. Dans une cellule parfaite, la courbe sera un parfait rectangle et le facteur de forme sera égal à 1. Sa valeur est déterminée à partir du rapport du maximum de puissance produite par la cellule solaire et le produit du courant de court-circuit et la tension en circuit ouvert :

$$FF = \frac{P_{MAX}}{V_{CO} * J_{CC}} = \frac{V_{MAX} * J_{MAX}}{V_{CO} * J_{CC}} \quad (II.11)$$

Où P_{MAX} représente la puissance maximum de la cellule solaire.

Mathématiquement, on peut exprimer le facteur de forme par la tension en circuit ouvert ou par la résistance série et shunt de la cellule solaire. Avec une cellule solaire idéale, ce paramètre dépend uniquement de la tension en circuit ouvert. Il s'exprime par l'équation (II.12), qui dépend uniquement de la quantité $v_{co} = V_{CO}/K_B T$ [12]

$$FF_0 = \frac{v_{co} - \ln(v_{co} + 0.72)}{v_{co} + 1} \quad (II.12)$$

Dans le cas réel, le facteur de forme est très sensible aux résistances parasites R_s et R_{sh} de la cellule solaire [13]

$$FF = FF_0 (1 - r_s) \quad (II.13)$$

$$r_s = R_s I_{CC} / V_{CO} \quad (II.14)$$

Une expression analogue existe également pour la résistance parallèle.

e) Rendement de conversion η

Le rendement de conversion est le paramètre le plus important dans la cellule solaire. Il exprime la capacité de la cellule à convertir efficacement les photons de la lumière incidente en courant électrique. Il est calculé par le rapport entre la puissance de sortie P_{out} et la puissance d'entrée de la cellule P_{in} (puissance d'éclairement solaire incident). Dans les applications terrestres on utilise le spectre solaire AM1.5G avec une puissance totale incidente égale à 1000W/m^2 .

$$\eta = \frac{P_{out}}{P_{in}} = \frac{V_{co} * J_{cc} * FF}{P_{in}} \quad (\text{II.15})$$

II-5-2-2. Caractéristique (J-V) dans le cas réel

La cellule solaire en fonctionnement réel peut être assimilée à un générateur de courant, auquel il faut soustraire le courant de polarisation direct (I_{obs}) de la jonction. Le modèle le plus simple de la cellule solaire est celui qui se compose d'un générateur de courant avec une diode, qui représente le comportement de la cellule en obscurité (jonction PN). Les deux résistances parasites série R_s et parallèle ou shunt R_{sh} , représentent les pertes dans la cellule.

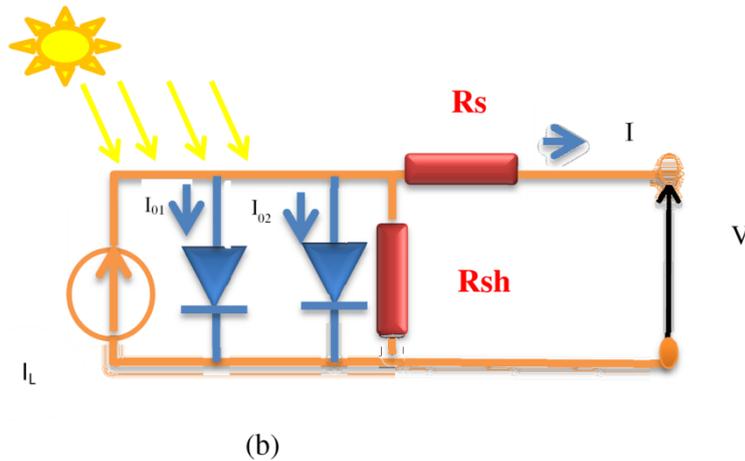


Figure (II-8) Schéma équivalent d'une cellule solaire dans le cas réel.

Le modèle mathématique de ce circuit est représenté par l'équation (II.16) [14].

$$J = J_L - J_0 \left[\exp \left(\frac{q(V+JR_s)}{AK_B T} \right) - 1 \right] - \left(\frac{V+JR_s}{R_{sh}} \right) \quad (\text{II.16})$$

II- 6. Cellules solaires à multi-jonctions

II- 6- 1. Pourquoi la cellule à Multi-jonctions

La lumière du soleil est composée d'un spectre d'ondes continues très riches en photons dont l'énergie varie entre 0 et 4eV [15]. Dans les cellules solaires mono jonction, les photons incidents ayant une énergie ($h\nu$) inférieure au gap (E_g) du semi-conducteur ne sont pas absorbés et ceux dont l'énergie est supérieure en restituent une partie en pure perte sous forme de chaleur. Une étude faite par Masden et Backus sur une cellule solaire mono jonction GaAs [16] prouve que les sources de pertes majeures viennent soit d'un excès ou d'une faiblesse d'énergie des photons (pertes par thermalisation ou par transmission) figure (II-9). Afin de minimiser ces types des pertes et pour avoir une large plage d'absorption du spectre solaire, il suffit de choisir un matériau à très faible gap [1eV-1.5eV] [17]. Ceci augmente le photocourant et diminue la tension et le facteur de forme figure (II-10), d'où une diminution de la

puissance (un matériau à fort gap absorbe moins de lumière, ce qui donne un faible courant de court-circuit et une forte tension en circuit ouvert) [8]. La solution proposée en 1955 par E.D Jackson [18], puis brevetée en Amérique par Wolfen en 1960 [19], donna naissance au concept des cellules à multi-jonctions. Les premières démonstrations expérimentales furent réalisées en 1978 [20]. Le concept de cette approche est basé sur l'empilement de plusieurs cellules solaires dans l'ordre décroissant de leur bande interdite, chaque cellule convertissant la partie du spectre qui correspond à son propre gap. Cette méthode permet d'éviter les pertes par thermalisation venant des photons de forte énergie (dégradation de la tension en circuit ouvert), ou par transmission venant des photons de faible énergie (dégradation du courant de court-circuit). La technologie des cellules solaires tandems est donc adressée à ces deux problèmes de pertes, et donne ainsi des cellules de hautes performances et d'une grande stabilité [21].

Le concept de cette méthode n'a pas été appliqué à cette époque compte tenu de la difficulté rencontrée dans la technique de la croissance des semi-conducteurs. Avec la nécessité d'utiliser les cellules tandem dans les applications terrestre (système à concentration) et les récentes techniques reconnues dans la croissance des couches de semi-conducteur par épitaxie comme MBE (Molecular Beam Epitaxy) ou MOVPE (Metal Organic Vapor Phase Epitaxy), le progrès dans la conception des cellules à multi-jonctions connaît aujourd'hui un grand essor.

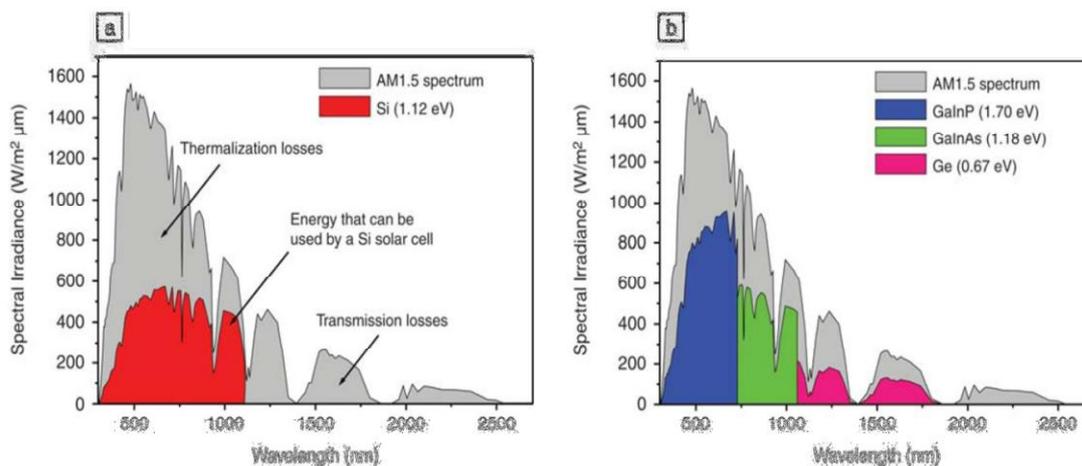


Figure (II-9) Spectre solaire AM1.5 avec les différentes pertes par thermalisation ou par transmission localisées dans une cellule solaire. a) mono jonction Si, b) Multijonctions GaInP/GaInAs/Ge [22].

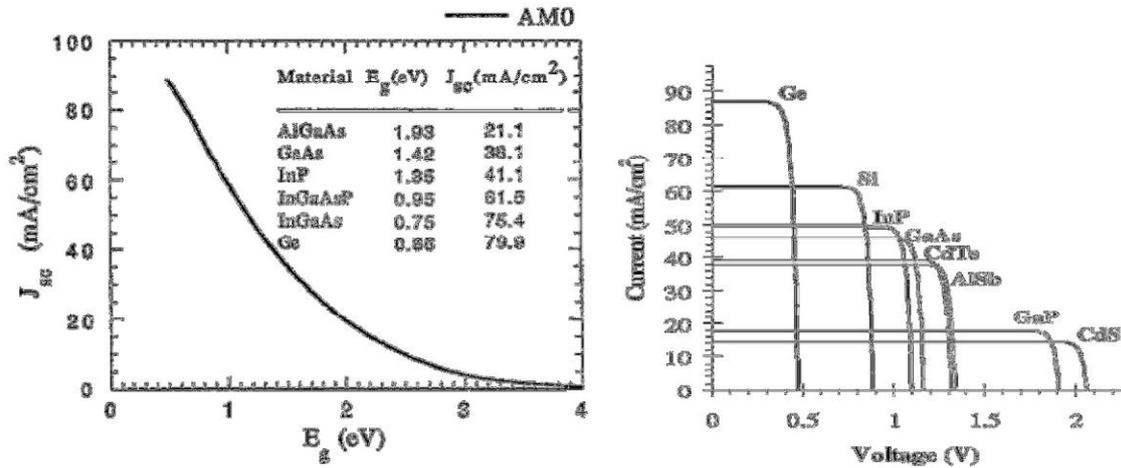


Figure (II-10) Influence du gap du matériau sur le courant et la tension délivrés par une cellule solaire mono jonction. a) Courant de court-circuit, b) Caractéristique I(V).

Les cellules solaires à multi-jonctions peuvent augmenter le rendement de la cellule en introduisant un autre semi-conducteur capable de réduire une partie des pertes par thermalisation ou par transmission. Dans cette approche trois configurations existent : les cellules solaires monolithiques, les cellules solaires mécaniquement empilées (Mechanically stacked) et le système multi-spectral. Dans notre travail on s'intéresse à la cellule solaire monolithique.

II- 3- 1. Système Multi-spectrale

Cette approche est considérée comme l'approche la plus simple dans sa conception, elle est basée sur la décomposition du spectre solaire par des prismes ou miroirs dichroïques, envoyant chacun une partie du spectre solaire sur la cellule correspondant à la bande interdite figure (II-11). Le miroir permet ainsi une meilleure adaptation du spectre solaire au système de cellules utilisées, la connections des cellules étant indépendante. Le contrôle de la fréquence de la lumière se fait à l'aide de filtres sélectifs. L'alignement, l'efficacité du miroir, le câblage individuel de chaque cellule rend cette approche indésirable, notamment lorsque la puissance électrique délivrée augmente [23].

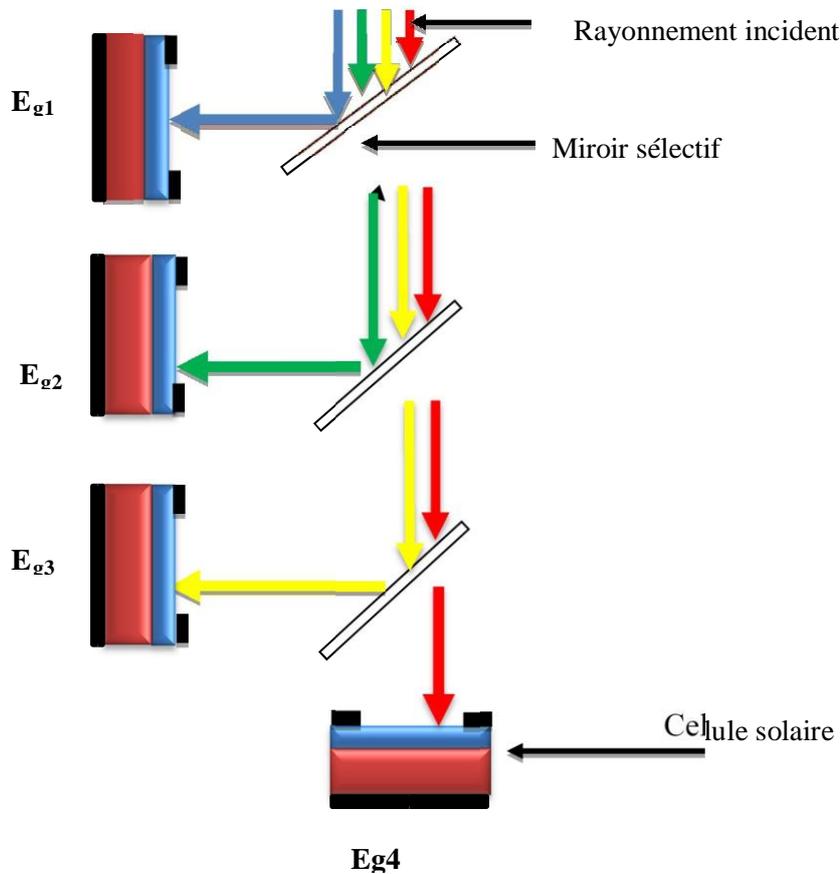


Figure (II-11) Association de plusieurs cellules solaires pour une conversion multi-spectrale (Dichroicmirror or Filter Reflector).

II- 3- 2. Système à empilement mécanique (mechanically stacked MSC)

Les cellules sont placées sur le même trajet optique mais sont indépendantes les unes des autres. Pour séparer les cellules, on utilise une matière adhésive qui assure une bonne isolation électrique ainsi qu'un bon couplage optique et thermique entre les couches [12]. Chaque cellule devient électriquement isolée des autres figure (II-12).

Ce type de cellule n'exige aucune condition sur les matériaux semi-conducteurs la constituant (paramètre de maille). Mais la connexion et l'isolation électrique entre les couches ajoutent une étape supplémentaire à sa technique de fabrication (interconnexions électriques, le couplage optique et l'emboitage de la cellule) et augmente les pertes d'ombre, ce qui diminue son rendement d'où l'utilité de la cellule monolithique.

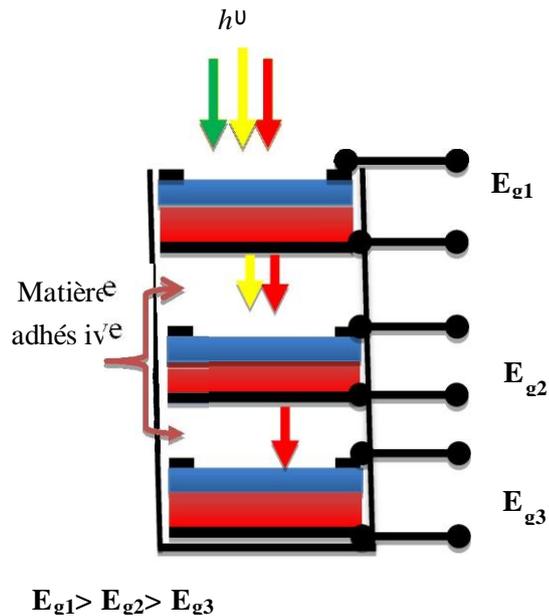


Figure (II-12) Empilement mécanique des cellules solaires, schéma de principe.

II- 3- 3. Cellule monolithique (Tandem, Cascade ou Multicolore MC, Two-terminal Series connected)

Le concept de la cellule solaire monolithique est basé sur l'empilement de plusieurs cellules en série et sur le même trajet optique avec un ordre décroissant des différents gaps figure (II-13-a), chaque cellule jouant le rôle d'un filtre pour la cellule suivante. Ce système peut être représenté par des diodes en série où l'émetteur de la première diode est connecté à la base de la seconde figure (II-13-b). On utilise dans ce type de configuration la même polarité des cellules. Les limitations rencontrées avec cette approche sont : les paramètres de maille très proches entre les couches de la cellule (croissance par épitaxie), la croissance de toutes les couches sur un seul substrat et la réalisation d'une jonction tunnel de haute qualité (pour assurer une bonne connexion électrique entre les couches). La cellule tandem doit être parcourue par le même courant (Current- matching) car les performances de toute la cellule tandem sont limitées par la cellule qui débite le moins de courant. En plus de la condition imposée sur l'égalité du courant, le choix du gap de chaque cellule doit être précis pour avoir un maximum de rendement [24].

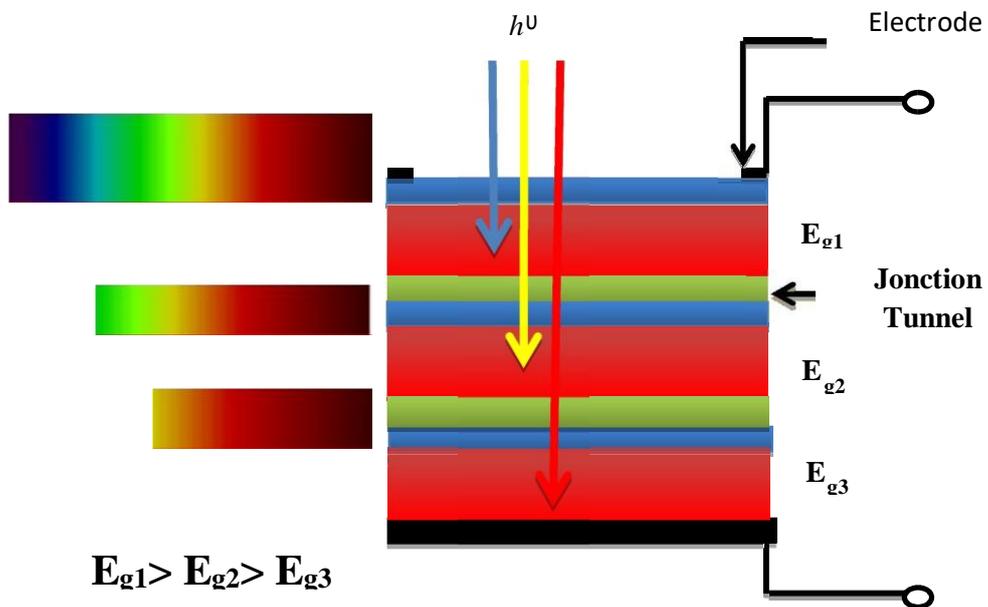


Figure (II-13) a) Schéma synoptique d'une cellule solaire monolithique.

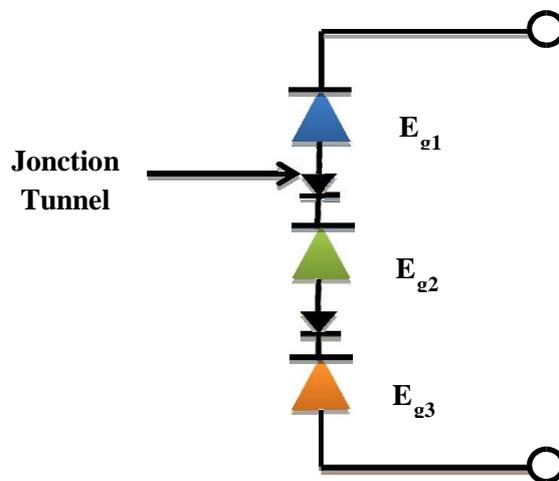


Figure (II-13) b) Circuit électrique équivalent d'une cellule solaire tandem avec interconnexion des diodes Tunnel

II-4. Les défis de fabrication d'une cellule solaire tandem

La conception des cellules solaires monolithiques doit obéir à plusieurs conditions : le choix des matériaux et des substrats ainsi que la compatibilité entre les propriétés physiques et électriques du matériau et du substrat qui sont des conditions majeures.

a. Choix des matériaux et des substrats, valeur optimale du gap pour les cellules tandems en applications terrestres :

Le gap du semi-conducteur joue un rôle très important dans le développement des cellules solaires. Pour les cellules solaires mono jonction, la valeur optimale la plus adaptée au spectre solaire AM1.5G est égale à 1.4eV (1.6 eV AM0) [13, 25]. Le matériau qui présente la valeur la plus proche de cet optimum est le GaAs (1.42eV) [26, 27]. Pour les cellules tandems monolithiques composées de deux jonctions, la littérature donne une valeur entre 1.75 eV et 1.8 eV pour la cellule supérieure et 1.1 eV pour la cellule inférieure figure (II-14) [26, 28]. Un rendement théorique de 36% est obtenu avec une cellule tandem de gap 1.7 eV et 1.1 eV sous le spectre solaire terrestre AM1.5 (32.4% AM0) [29, 30]. Un rendement de 41.1% est obtenu sous le spectre AM0 en utilisant des matériaux avec des gaps 1.95eV, 1.45eV, et 1eV. Aujourd'hui, les meilleurs semi-conducteurs qui assurent des bons rendements pour la cellule tandem sont les alliages des matériaux III, V et le Germanium. Un rendement de 30.3% sous le spectre AM1.5 a été obtenu avec une cellule monolithique à deux jonctions [31].

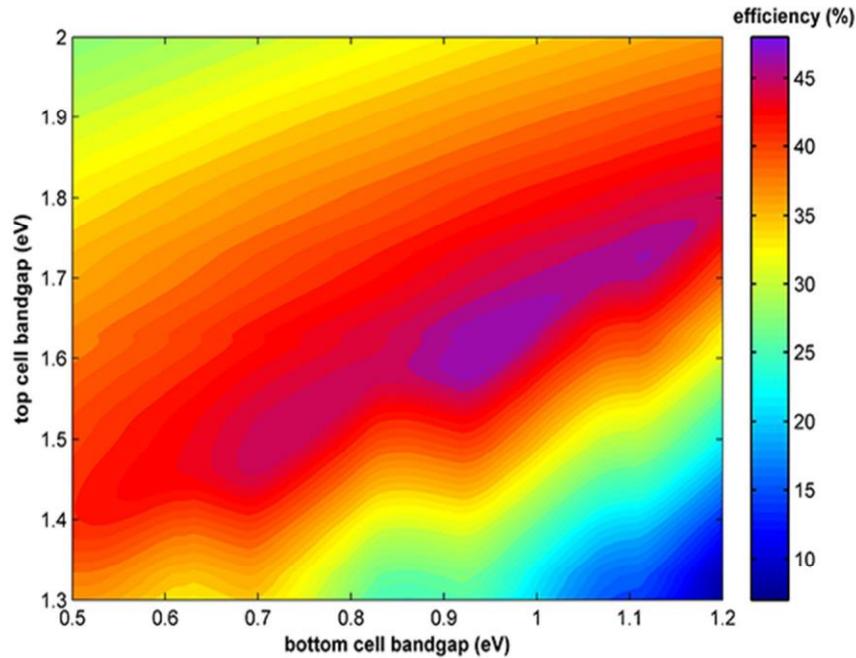


Figure (II-14) Contour du rendement d'efficacité de la cellule solaire tandem monolithique par rapport au gap de la cellule supérieure et inférieure. Le rendement maximum de 47% est obtenu avec un tandem 1.63eV et 0.96eV (cellule supérieure-inférieure) sous le spectre solaire AM1.5G.

b. Constante de réseau

Dans les semi-conducteurs à structure cristallographique zinc-blende, l'espace entre deux molécules du matériau représente le paramètre de maille ou constante de réseau du matériau (a) (Lattice constant) [32].

Avec les alliages ternaires, comme par exemple dans le $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{P}$, ce paramètre est calculé à partir du paramètre de maille des matériaux binaires. On utilise la loi Vegard [33] pour déterminer le paramètre de maille dans un alliage ternaire.

$$a(\text{In}_{(1-x)}\text{Ga}_{(x)}\text{P}) = xa(\text{GaP}) + (1-x)a(\text{InP}) \quad (\text{II-17})$$

Le désaccord de maille Δa (Lattice mismatched or metamorphic) entre la couche substrat et le matériau est donné par :

$$\Delta a = \frac{a(\text{epit}) - a(\text{sub})}{a(\text{epit})} \quad (\text{II-18})$$

La dislocation dans les paramètres de maille entre le matériau et le substrat est reconnue comme la source principale de dégradation dans la cellule solaire durant son fonctionnement. Un décalage dans les constantes de réseau crée des dislocations dans le réseau cristallin. Les grandes densités de ces dislocations peuvent générer la diffusion des impuretés indésirables et la création des centres de recombinaison pour les porteurs minoritaires. Pour assurer une bonne croissance épitaxiale, un désaccord de maille de 0,1% doit être respecté. Cette revendication limite les possibilités de choix des matériaux désignés pour les applications en cellules solaires tandem. Pour cette raison une stratégie de sélection des matériaux a été proposée par Hutchby et Al [12]. Cette méthode permet de faire la bonne sélection des matériaux en respectant les exigences (le désaccord de maille) figure (II-15). Elle présente les meilleures combinaisons possibles parmi les semi-conducteurs.

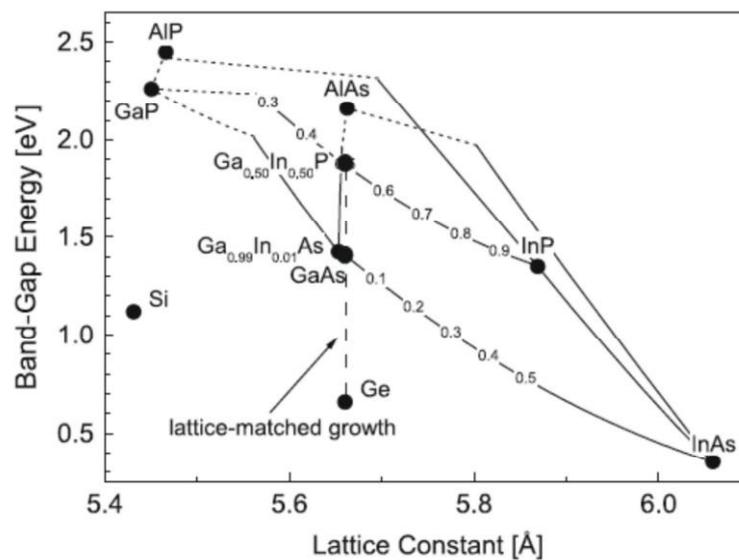


Figure (II-15) L'énergie du gap du semi-conducteur en fonction de la constante de réseau permettant l'épitaxie des couches [34].

c. Coefficient de dilatation thermique

La dilatation thermique est un phénomène généré par une variation de température. Les atomes qui constituent la matière s'écartent ou se rapproche en fonction de la

température. Ce paramètre mesure l'augmentation relative du volume d'un système lorsque l'on fait varier la température figure (II-16).

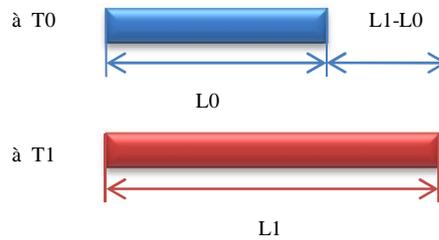


Figure (II-16) Phénomène de dilatation thermique.

La valeur de la dilatation thermique ΔL est donnée par la relation suivante :

$$L1 - L0 = \alpha L0 (T1 - T0) \quad (\text{II-19})$$

$$\Delta L = \alpha L0 \Delta T$$

$$\alpha = \frac{\Delta L}{L0 \Delta T}$$

Avec : ΔL (mm) = Dilatation due à une variation de température

α (1/K ou 1/°C) = Coefficient de dilatation thermique linéaire

L (mm) = Longueur caractéristique

ΔT (K ou °C) = La différence de température [température initiale - température finale].

Le Tableau (II-1) donne les différentes valeurs du coefficient de dilatation thermique de quelques semi-conducteurs binaires III-V.

La figure (II-17) donne la variation linéaire du coefficient de dilatation thermique du matériau $In_{(1-x)}Ga_{(x)}P$, en fonction de la variation de la concentration du gallium dans l'alliage. Pour les cellules solaires tandem les coefficients de dilatation thermique des couches doivent être proche.

Matériau	a (Å)	$\alpha(10^{-6} \text{ K}^{-1})$
AlP	5.4511	4.50
GaP	5.4512	5.91
InP	5.8686	4.75
GaAs	5.6533	6.86

Tableau (II-1) Paramètre de maille et coefficient de dilatation thermique des matériaux binaire III-V à 300K [35].

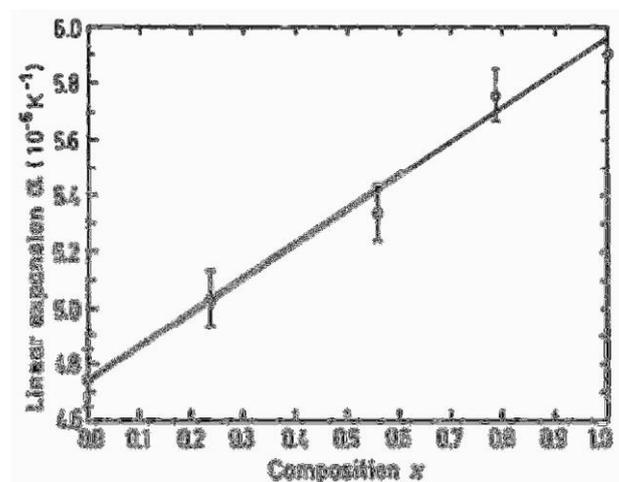


Figure (II-17) Variation du coefficient de dilatation linéaire en fonction des paramètres x dans l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$, à 300 °K [36].

d. Critère imposé sur la jonction Tunnel

L'interconnexion entre les jonctions de la cellule monolithique est assurée par une jonction tunnel qui permet la réalisation d'un nombre important de couches d'épitaxie. La possibilité de création de la jonction tunnel est apparue en 1958, quand le scientifique Japonais Leo Esaki [37] découvrit la possibilité d'augmenter la concentration des impuretés dans les jonctions de $1 \cdot 10^7$ à $1000 \cdot 10^7$ atomes dans le semi-conducteur. Cette augmentation dans la concentration des impuretés permet d'avoir une résistance négative dans la caractéristique

de la diode, au niveau des bandes d'énergies. La zone de déplétion se rétrécit et le niveau de Fermi va se trouver alors dans les bandes elles-mêmes, à cause du dopage élevé du matériau. Cela permet aux électrons de percer un tunnel à travers la barrière, sans changement dans leur énergie figure (II-18).

Pour assurer un très bon couplage optique et électrique entre les cellules de la structure tandem (supérieure, inférieure) [38, 39], la jonction tunnel doit satisfaire aux conditions suivantes :

1. Les matériaux des jonctions tunnels doivent respecter la condition du désaccord de maille.
2. La cellule inférieure doit supporter la température élevée lors de la croissance de la cellule supérieure (Top cell).
3. La Jonction doit assurer un contact ohmique entre la cellule supérieure et la cellule inférieure, avec une faible résistance.
4. Elle doit être transparente aux photons d'énergie inférieure au gap du matériau traversé.

Pour obtenir ces conditions il faut avoir :

- Une jonction tunnel fortement dopée p+/n+ et de faible épaisseur, pour minimiser l'absorption,

Mais ceci n'est pas facile à réaliser car le courant tunnel décroît exponentiellement avec l'augmentation du gap à dopage élevé. En plus, quand la cellule fonctionne à une température élevée, il y a diffusion du dopant dans la jonction ce qui dégrade le courant de crête (peak-current) de la jonction tunnel [40]. Une mauvaise qualité de la jonction tunnel implique une faible valeur du facteur de forme.

La valeur critique du courant qui circule dans la jonction tunnel s'appelle courant de crête de la jonction J_P , ce dernier doit être supérieur au courant du tandem [15].

$$J_P \propto \frac{-E_g^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{N^*}} \quad (\text{II-20})$$

Où E_g est l'énergie de gap du matériau utilisé, N^* est la concentration effective du dopage donnée par :

$$N^* = \frac{N_A \times N_D}{N_A + N_D} \quad (\text{II-21})$$

Le Tableau (II-2) donne une comparaison entre différentes jonctions tunnel réalisées avec différentes technologies.

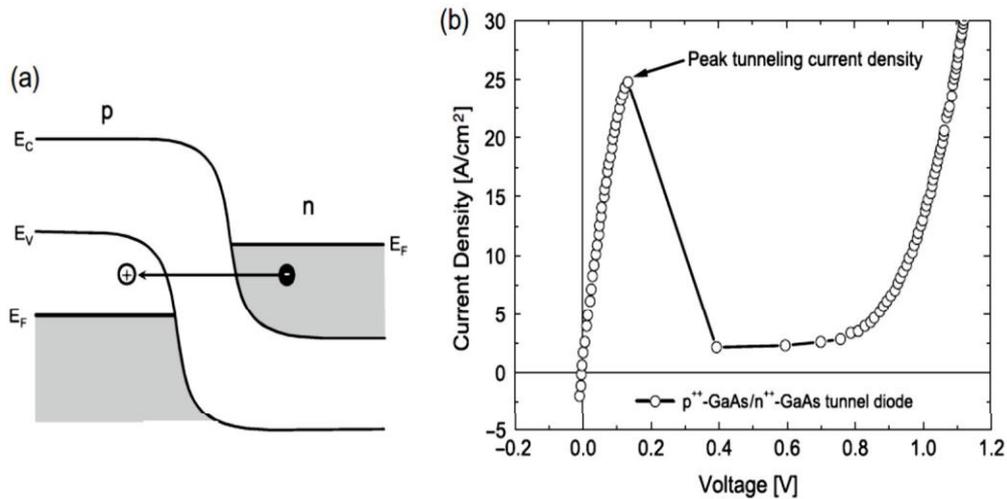


Figure (II-18) Caractéristique de la jonction tunnel, a) schéma du diagramme de bande, b) caractéristique I-V expérimentale de la diode tunnel $P^{++}\text{GaAs-GaAs } N^{++}$ avec une densité du courant de crête de 25A/cm^2 [12].

Matériau	La densité du courant de crête J_P (A/cm ²)	La résistivité R (10 ⁻³ Ω cm ²)	Méthode de croissance	Référence
P+/N+ GaAs	45	2	MOVPE	[41]
P+/N+ GaAs	34	3	MBE	[42]
P+/N+ GaAs	23	1.72	LPE(Epitaxie en Phase Liquide)	[40]
P+/N+ GaAs	14.9	4.7	Thermal diff	[43]

Tableau (II-2) Jonction tunnel réalisée avec différentes technologies.

II-5. Limite théorique dans la conception des cellules solaires à multi-jonctions

Théoriquement, on peut utiliser un nombre illimité de cellules dans la conception des cellules solaires à multi-jonctions. Mais dans la réalité, le processus de conception et de fabrication de ce composant se complique exponentiellement avec le nombre des cellules à ajouter. Cependant, des réalisations pratiques arrivent jusqu'à trois ou quatre cellules figure (II-19).

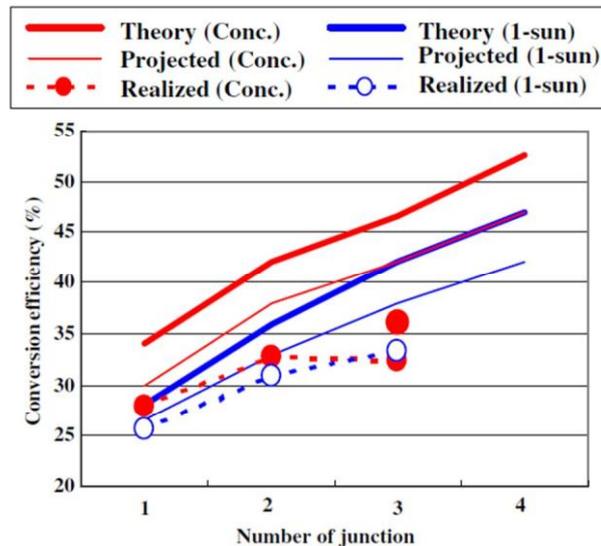


Figure (II-19) Rendements de conversion théorique et réaliste, pour des cellules solaires à jonction unique et à multi-jonctions, en comparaison avec des valeurs expérimentales de rendement réalisées sous AM1.5 (en bleu) et sous optimum de concentration (en rouge) [44].

E_{g1}	E_{g2}	E_{g3}	E_{g4}	E_{g5}	E_{g6}	E_{g7}	E_{g8}	Rendement [%]
1.34								33.68
0.94	1.60							45.71
0.94	1.37	1.90						51.58
0.71	1.11	1.49	2.00					55.31
0.70	1.01	1.33	1.67	2.14				57.61
0.69	0.96	1.20	1.47	1.79	2.24			59.41
0.69	0.93	1.14	1.37	1.6	1.9	2.33		60.78
0.51	0.75	0.98	1.18	1.4	1.63	1.92	2.35	61.42

Tableau (II-3) Résultats de simulation de Bremner et al, sur des cellules solaires à multi-jonctions de 1 à 8 sous-cellules, sous un spectre solaire AM1.5 et sous un optimum de concentration [45].

II-6. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté des notions importantes sur le spectre solaire, la cellule solaire et ses caractéristiques sous obscurité et sous ensoleillement dans les cas idéal et réel. Ensuite, nous avons présenté les cellules solaires à multi-jonctions en matériaux III-V, avec ces différentes approches, en portant notre choix sur la cellule solaire monolithique tandem. Nous avons étudié les différents défis et conditions rencontrés dans sa conception.

Le chapitre suivant sera réservé à l'étude du modèle mathématique de la cellule solaire.

II-7. Références bibliographiques

- [1] F. Dimorth. Next generation GaInP/GaInAs/Ge multi-junction space solar cells 17th European photovoltaic conference, (2001).
- [2] Anne Labouret, Michel Viloz. Energie solaire photovoltaïque. Dunod.Paris (2003).
- [3] S. M. Sze. Physics of Semiconductors Devices. 2nd Edition, John Wiley & Sons, (2001).
- [4] Benoit Brousse. Réalisation et caractérisation des cellules photovoltaïques organiques obtenus par dépôt physique. Thèse d'état en électronique des hautes fréquences et optoélectronique (2004).
- [5] Z.Abada. Etude des cellules photovoltaïques à base de GaInP et GaAs à haut rendement. Mémoire de magister en électronique. Université de Constantine (2000).
- [6] Henry Mathieu. Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques, Masson, (1987).
- [7] Harold J. Hovel, "Semiconductors and semimetals", Vol. 11, solar cells, Academic Press New York San Francisco London, 1975.
- [8] P. Würfel, "Physics of solar cells, from principles to new concepts", Wiley-vch Verlag GmbH & Co.KGaA, 2005, ISBN: 3-527-40428-7.
- [9] S. Hegedus and W. N. Shafarman, "Thin-Film Solar cells: device analysis and measurements", Progress in Photovoltaics: Research and Application Vol. 12, pp. 155-176, 2004.
- [10] PV Education. Quantum efficiency. (Online)(visité le 06-05-2014), <http://pvcadrom.pveducation.org/celloper/quantum.htm>.
- [11] A. R. Jha, "Solar cell Technology and applications ", Taylor & Francis Group, p.26, 2010, ISBN 978-1-4200-8177-0,
- [12] A. Mc. Evoy, T. Markvart and L. Castaner, "Practical Handbook of Photovoltaics Fundamentals and Applications, Second Edition", Elsevier Ltd, 2012, ISBN: 978-0-123859334-1.
- [13] M. Green, "Solar Cells: operating Principles, Technology, and System application", Chap.1 Prentice- Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1-12, 1982.
- [14] B. Streetman and S. Banerjee, "Solid State Electronic Devices", Vol. 2, Prentice-Hall, New Jersey, 1995.

- [15] J. M. Olson, D. J. Friedman and S. Kurtz, “High Efficiency III-V Multijunction Solar Cells”, Handbook of Photovoltaic Science and Engineering. John Wiley & Sons, 2003.
- [16] G. W. Masden and C. E. Backus, “ Increased photovoltaic conversion efficiency through use of spectrum splinting and multiple cells ”, Proc. 13 IEEE Photovoltaic specialist conf, pp. 853-858, 1978.
- [17] A. Ricaud, “ Photopiles Solaires : De la physique de la conversion Photovoltaïque aux filières, Matériaux et Procédés ”, Presses polytechniques et universitaires romandes, 1 ère édition 1997.
- [18] A. L. Fahrenbruch and R. H. Bube, “ Fundamentals of solar cells photovoltaic Energy Conversion ”, New York: Academic Press, p. 522, 1983.
- [19] E. D. Jackson, U. S. Patent 2 949 498, 1960.
- [20] R. L. Moon, L.W. James, T. O. Yeh H. A. Vander Plas, G. A. Antypas, and Y. Chai, “ Multigap solar cell requirements and the performance of AlGaAs and Si cells in concentrated sunlight ”, In Proc. of the 13th IEEE Photovoltaic Specialists Conference, pp. 859–867, Washington, DC, 1978.
- [21] J. Yang, R. Ross, R. Mohr and J. Fournier, “ High efficiency solar cells using amorphous silicon and amorphous silicon-germanium based alloys ”, Proc. 18th IEEE Photovoltaics Specialists' Conf., Las Vegas, NV, October 21-25, 1985, IEEE, New York, 1986.
- [22] F. Dimroth and S. Kurtz, “High-Efficiency Multijunction Solar Cells”, MRS bulletin, Vol. 32, March 2007, www.mrs.org/bulletin.
- [23] A. Luque and S. Hegedus, “ Handbook of Photovoltaic Science and Engineering ”, John Wiley & Sons, Hoboken, NJ, USA, 2003.
- [24] P.T. Landsber and V. Badescu, “Solar energy conversion: list of efficiencies and some theoretical considerations. I Theoretical considerations, II Results”, Progress in Quantum Electronics, Vol. 22(4), pp. 231-255. 1998.
- [25] G. Writing, “ Global Energy Assessment, Toward a sustainable future ”, First Edition, Cambridge University Press, August 2012, ISBN: 9780521182935.
- [26] W. Shockley and HJ. Queisser, “ Detailed balance limit of efficiency of p-n junction solar cells”, Journal of Applied Physics, Vol. 32, p. 510. 1961.
- [27] M. Green, “ Solar Cells, Operating Principles, Technology and System Applications”, University of New South Wales, 1998.

- [28] Brozel MR, Stillman GE, “ Properties fo Gallium Arsenides ”, 3rd edition, Institution of Electrical Engineers, 1996.
- [29] F. Dimroth, C. Baur, Bett AW, M. Meusel, G. Strobl, “ 3-6 junction photovoltaic cells for space and terrestrial concentrator applications ”, Conference Record of the Thirty First IEEE Photovoltaic Specialist Conference IEEE 525, 2005.
- [30] S.R. Kurtz, P. Faine and J.M. Olson, “ Modeling of two-junction, series-connected tandem solar cells using top-cell thickness as an adjustable parameter ”, Journal of Applied Physics, Vol. 68, p. 1890, 1990.
- [31] M. Green, Emery K, King DL, Igari S, Warta W. Solar cell efficiency tables (version 27). Progress in Photovoltaics: Research and Applications, Vol.14, p. 45, 2006.
- [32] S. Adachi, “ Properties of Group-IV, III–V and II–VI Semiconductors ”, John Wiley & Sons Ltd, Wiley series in materials for electronic and optoelectronic applications, 2005.
- [33] Angus R, “ The Materials Science of Semiconductors ”, Springer Science & Business Media, LLC, 2008, ISBN: 978-0-387-25653-5.
- [34] I. Vurgaftman, J. R. Meyer, L. R. Ram–Mohan, “ Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys ”, Applied Physics Review, Journal of Applied Physics, Vol. 89, N°11, pp. 5815–5875, 2001.
- [35] Peter S. Zory Jr., Paul F. Liao, Paul K, “Quantum Well Lasers”, Academic Press. 1993.
- [36] Y. A. Goldberg, “Handbook Series on Semiconductor Parameters”, Vol. 2, World Scientific, London (1999).
- [37] L. Esaki, “New phenomenon in narrow Germanium p-n junction”, Phys. Rev, Vol. 109, pp.603-604, 1958.
- [38] H. Sugiura, C. Amano, A.Yamamoto, M.Yamaguchi, “ Double heterostructure GaAs tunnel junction for a AlGaAs/GaAs tandem solar cell ”, Japanese Journal of Applied Physics; Vol.27,pp. 269-272, 1988.
- [39] W. Li, J. Lammasniemi, AB. Kazantsev, R. Jaakkola, T. Makela, M. Pessa, “ GaInP/AlInP tunnel junction for GaInP/GaAs tandem solar cells ”, Electronics Letters, Vol. 34, pp. 406.1998.
- [40] R. E. Hayes et al, “ A stability criterion for tunnel diode interconnect junction in cascade solar cells ”, Solar Cells, Vol. 15,pp. 213-238, 1985.
- [41] P. Basmaji et al, “ GaAs tunnel junction grown by metalorganic vapor-phase epitaxy for multigap cascade Solar cells ”, J. Appl. Phys., Vol. 62, pp. 2103-2106, 1987.

- [42] D. L. Miller, S. W. Zehr, and J. S. Harris, Jr, “ GaAs-AlGaAs tunnel junction for multigap cascade solar cells ”, *J. Appl. Phys.*, Vol. 53, pp. 744-748, 1982.
- [43] S. K. Ghandhi, R. T. Huang, and J. M. Borrego, “Fabrication of GaAs Tunnel junction by a rapid thermal diffusion process”, *App. Phys. Lett.*, Vol 48, 415-416, 1986.
- [44] M. Yamaguchi, T. Takamoto, K. Araki, N. Ekins-Daukes, “Multi-junction III–V solar cells: current status and future potential”, *Solar Energy* Vol.79, 78–85. 2005.
- [45] Bremner, S.P., Levy, M.Y. and Honsberg, C.B, “Analysis of Tandem Solar Cell Efficiencies Under AM1.5G Spectrum Using a Rapid Flux Calculation Method”, *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, Vol.16, 225, 2008.

Chapitre III

Revue des modèles physiques utilisés dans la simulation numérique

III-1. Introduction

Le choix des modèles physiques est important pour améliorer la précision des résultats de simulation numérique. Pour cela, le logiciel SILVACO met à notre disposition une grande variété de modèles physiques. La première difficulté de l'utilisateur va donc être de choisir certains modèles par rapport à d'autres qui pourtant décrivent les mêmes phénomènes physiques. L'autre, difficulté sera de choisir les modèles en adéquation avec les mécanismes physiques mise en jeu pour les conditions d'utilisation du dispositif.

Ce chapitre met en évidence l'importance du choix des modèles physiques afin d'introduire le lecteur à la logique du processus de simulation. Dans une première partie nous présentons les équations fondamentales dans les semi-conducteurs. Dans une seconde partie, nous focalisons sur quelques points particulièrement intéressants tels que la recombinaison qui correspond aux mécanismes conduisant à la perte de paires électron-trou, avec l'énergie excédentaire émise sous forme de phonons ou de photons. Ensuite, nous exposons les modèles de mobilité des porteurs de charges. Les électrons et les trous ont des valeurs de mobilité différentes qui dépendent principalement de nombreux paramètres tels que la température, le dopage, ou encore les collisions des porteurs entre eux ou avec les impuretés. Au final, nous abordons les modèles de rétrécissement de la bande interdite. Quand le niveau de dopage augmente, quelques changements marquent la structure de bande telle que la diminution de la largeur de la bande interdite et l'apparition des queues dans les limites des bandes de conduction et de valence. Ces changements sont complexes si le dopage dépend de la position structurée des bandes, par conséquent la structure de bande devient dépendante de la position.

III-2. Equations fondamentales dans les semi-conducteurs

Des années de recherche dans la physique des dispositifs à base de semi-conducteurs ont conduit à la réalisation d'un modèle mathématique [1]. Ce modèle est capable d'opérer dans quasiment n'importe quel dispositif à base de semi-conducteurs. Il consiste en un ensemble fondamental d'équations qui rassemblent le potentiel électrostatique et les densités de porteurs de charge dans un domaine de simulation bien précis. Ces équations, qui sont résolues via des logiciels spécifiques de simulation des dispositifs à base de semi-conducteurs, sont dérivées des équations de Maxwell. Elles sont principalement : L'équation de Poisson, les équations de continuité et les équations de transport. L'équation de Poisson lie les variations dans le potentiel électrostatique aux densités locales de charge. Les équations de continuité ou de

transport décrivent le mode par lequel les densités d'électrons et des trous se comportent en fonction des processus de transport, de génération et de recombinaison.

Pour que les équations que nous allons présenter dans la suite de ce chapitre soient résolues, une discrétisation a du être réalisée afin de les appliquer a une grille d'éléments finis utilisées pour représenter le domaine de simulation.

III-2-1. Equation de Poisson

L'équation de Poisson s'exprime par :

$$\text{div}(\varepsilon \nabla \Psi) = -\rho \quad (\text{III-1})$$

Où ψ représente le potentiel électrostatique, ε la permittivité électrique ($\varepsilon = \varepsilon_0 \cdot \varepsilon_r$, ε_0 est la permittivité du vide et ε_r est la permittivité relative du matériau), ρ est la densité volumique nette de charges libres.

Le champ électrique est donne par la relation :

$$\vec{E} = -\overrightarrow{\text{grad}}(\psi) \quad (\text{III-2})$$

III-2-2. Equations de continuité

Les équations de continuité décrivent la vitesse de variation en fonction du temps des concentrations des porteurs. Les causes de la variation des concentrations des trous ou des électrons sont :

- Les générations dues aux agents externes (qui sont souvent la création de paires électron-trou ;
- les générations-recombinaisons internes ;
- les phénomènes de transport (par la présence des courants de conduction ou diffusion).

L'équation de continuité s'exprime par :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \text{div} \vec{J}_n + G_n - R_n \quad \text{Pour les électrons} \quad (\text{III-3})$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{1}{q} \text{div} \vec{J}_p + G_p - R_p \quad \text{Pour les trous} \quad (\text{III-4})$$

G_n et G_p sont les taux de génération pour les électrons et les trous par des agents externes, R_n et R_p sont respectivement les taux de recombinaisons (internes) pour les électrons et les trous, j_n et J_p sont les densités des courants des électrons et des trous.

III-2-3. Equations de transport

Dans le cas des hypothèses de base des équations de la physique des semi-conducteurs (le champ magnétique extérieur est nul, la température est uniforme dans toute la structure) les causes de l'apparition des courants électriques sont le champ électrique et le gradient des concentrations des porteurs de charge. Les courants déterminés par le champ électrique s'appellent courant du champ ou courant de drift. Et les courants déterminés par le gradient de concentration des porteurs s'appellent courant de diffusion.

Dans le cas hors équilibre thermodynamique, nous définissons deux quasi-niveaux de Fermi, un pour les électrons et un pour les trous, Φ_n et Φ_p , qui expriment la modification de la probabilité d'occupation des états.

Ainsi les densités des courants des équations de continuité peuvent être approximées à l'aide de la théorie de transport de Boltzmann par le modèle de drift-diffusion [2] (modèle isothermique de transport). Dans ce modèle, les densités de courants sont exprimées en fonction des quasi-niveaux de Fermi par les expressions :

$$\vec{J}_n = -q\mu_n n \nabla \varphi_n \quad (\text{III-5})$$

$$\vec{J}_p = -q\mu_p p \nabla \varphi_p \quad (\text{III-6})$$

Avec q est la charge électrique, μ_n et μ_p sont les mobilités des électrons et des trous.

Les expressions pour les concentrations des électrons et des trous sont:

$$n = n_{ie} \exp \left[\frac{q(\psi - \varphi_n)}{kT_L} \right] \quad (\text{III-7})$$

$$p = n_{ie} \exp \left[\frac{q(\psi - \varphi_p)}{kT_L} \right] \quad (\text{III-8})$$

Avec n_{ie} la densité effective intrinsèque.

En introduisant ces équations dans les expressions de densité de courant, on obtient:

$$\vec{J}_n = qD_n \nabla n - qn\mu_n \nabla \psi - \mu_n n (kT_L \nabla (Lnn_{ie})) \quad (\text{III-9})$$

$$\vec{J}_p = qD_p \nabla p - qp\mu_p \nabla \psi - \mu_p p (kT_L \nabla (Lpp_{ie})) \quad (\text{III-10})$$

Avec D_n et D_p sont les coefficients d'Einstein qui ont pour expression :

$$D_n = \frac{k_B T}{q} \mu_n \quad (\text{III-11})$$

$$D_p = \frac{k_B T}{q} \mu_p \quad (\text{III-12})$$

III-2-3-1. Diffusion

Les courants de diffusion sont générés par l'existence d'une concentration non uniforme des électrons ou des trous dans le semi-conducteur. Il est nettement plus probable qu'une charge d'une zone de concentration élevée se déplace vers une zone de basse concentration que l'inverse. Ce phénomène de diffusion est décrit quantitativement par la première loi de Fick qui montre la proportionnalité entre le flux de particules \vec{F} et le gradient de leur concentration $\vec{\nabla}C$ selon la relation :

$$\vec{F} = -D \cdot \vec{\nabla}C \quad (\text{III-13})$$

Le facteur de proportionnalité D s'appelle coefficient de diffusion. En appliquant la relation (III-13) pour les électrons ($C=n$, $D=D_n$) et les trous ($C=p$, $D=D_p$) nous trouvons les densités des courants de diffusion :

$$J_{n,diff} = -q\vec{F}_n = qD_n \nabla n \quad (\text{III-14})$$

$$J_{p,diff} = q\vec{F}_p = qD_p \nabla p \quad (\text{III-15})$$

qui représente en pratique le premier terme des équations (III-9) et (III-10).

Notons que le troisième terme des équations (III-9) et (III-10) est aussi un courant de diffusion. Mais il est dû au gradient des densités effectives d'états n_{ie} .

III-2-3-2. Drift

En présence d'un champ électrique le porteur de charge est accéléré entre deux collisions aléatoires. La direction est donnée par le champ électrique et généré un déplacement moyen avec une vitesse donnée par :

$$\vec{v}_n = -\mu_n \vec{E} \quad \text{Pour les électrons} \quad (\text{III-16})$$

$$\vec{v}_p = \mu_p \vec{E} \quad \text{Pour les trous} \quad (\text{III-17})$$

Dans les mêmes conditions de champ, les vitesses des électrons sont plus grandes que celle des trous. Donc nous avons beaucoup plus de chance de collecter des électrons que des trous. Le courant de drift est donné par :

$$\vec{J}_{n,drift} = -qn\vec{v}_n \quad (\text{III-18})$$

$$\vec{J}_{p,drift} = qn\vec{v}_p \quad (\text{III-19})$$

Ainsi le courant de drift est représenté dans le second terme des équations (III - 9) et (III- 10).

III-3. Génération optique

La génération introduite dans les équations de continuité (III-3) et (III-4) est due aux facteurs externes. Dans notre cas, le facteur externe est la lumière, donc nous avons une génération optique. Sous l'effet de la lumière, des porteurs de charge peuvent être générés dans le semi-conducteur par des transitions d'une bande à l'autre (cas des semi-conducteurs intrinsèques) ou par des transitions qui impliquent des états dans le gap (cas des semi-conducteurs extrinsèques).

Le principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque sous lumière est d'appliquer à l'instant initial, une source incidente constante et uniforme de lumière de puissance P qui

fournit un nombre de photons $n_0 = \frac{P}{h\nu}$. Au temps t et à l'interface avec la surface du semi-conducteur, une partie de la lumière incidente est transmise une autre réfléchi et une autre absorbée à la surface.

Si chaque photon absorbe donne naissance à η_0 paires électrons-trou, on peut admettre que le taux de génération optique est donné par la relation :

$$G = \eta_0 \frac{P\lambda}{hc} a e^{-ay} \quad (\text{III-20})$$

y est une distance relative pour le rayon en question, h est la constante de Planck's, λ est la longueur d'onde, c est la vitesse de la lumière.

III-4. Mécanismes de recombinaison

La génération dans les semi-conducteurs est un processus où des paires électron-trou sont créées. Cependant, la recombinaison est à l'opposé de la génération. Elle correspond aux mécanismes conduisant à la perte de paires électron-trou, avec l'énergie excédentaire émise sous forme de phonons ou de photons. Expérimentalement, elle correspond à une durée de vie des porteurs minoritaires τ capable d'être mesurée. Celle-ci correspond au temps moyen au bout duquel une paire électron-trou générée se recombine. La valeur de ce paramètre peut être déterminée, pour le silicium de type p ou n, à partir du taux de recombinaison U [4]:

$$\tau = \frac{\Delta n}{U} \quad (\text{III-21})$$

Où Δn , (Δp) est la densité d'électrons (de trous) en excès.

L'interprétation de la durée de vie n'est pas simple car il existe différents mécanismes de recombinaison intervenant simultanément en surface et en volume d'un échantillon. On définit donc une durée de vie effective, qui tient compte de l'ensemble de ces mécanismes. En générale, c'est cette grandeur qui est mesurée. Nous allons aborder maintenant les trois mécanismes de recombinaisons fondamentaux que sont la recombinaison par piège SRH, la recombinaison Auger et la recombinaison radiative.

III-4-1. Recombinaison SRH (Schokley-Read-Hall)

Le processus de recombinaison Schokley-Read-Hall est schématisé sur la figure III-1. Il fut pour la première fois explicite par Schokley, Read [3] et Hall [5]. Ce processus fait appel à des niveaux d'énergie voisins du milieu du gap (niveaux appelés pièges, dus à certains défauts cristallins ou à la présence de certaines impuretés dans le cristal) qui facilitent la recombinaison des porteurs par un mécanisme en deux étapes. Un électron de la bande de conduction va d'abord se relaxer sur un niveau d'énergie intermédiaire lié à un défaut. Ensuite, une deuxième relaxation va lui permettre de se recombiner avec un trou de la bande de valence. L'efficacité de ce processus dépend de la densité des niveaux profonds et par suite, de la qualité du matériau utilisé et de sa technologie d'élaboration. La recombinaison Schokley-Read-Hall est modélisée par :

$$R_{SRH} = \frac{pn - n_{ie}^2}{\tau_{p0} \left[n + n_{ie} \exp\left(\frac{E_t - E_i}{kT_L}\right) \right] + \tau_{n0} \left[p + n_{ie} \exp\left(\frac{-(E_t - E_i)}{kT_L}\right) \right]} \quad (\text{III-22})$$

Où E_t est la position énergétique des états de piège, E_i est le niveau de Fermi dans le semi-conducteur intrinsèque, τ_{n0} , τ_{p0} sont respectivement la durée de vie pour les électrons et les trous, n_{ie} est la concentration intrinsèque, k est la constante de Boltzmann et T_L la température en Kelvin.

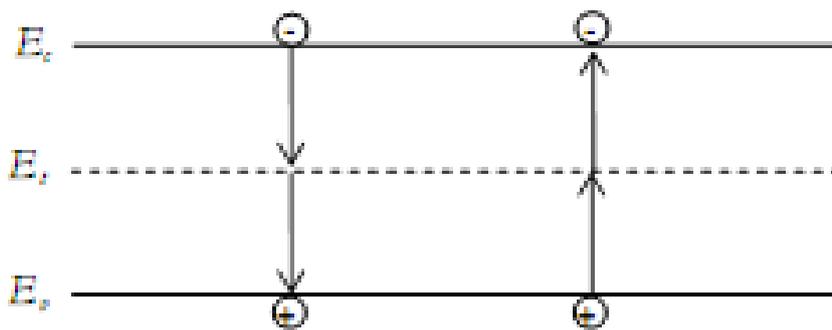


Figure (III-1) : Mécanisme de recombinaison Schokley-Read-Hall (SRH).

Ce modèle est activé par le paramètre SRH de la commande MODELS, les durées de vie τ_{n0} et τ_{p0} peuvent être définies par l'utilisateur par la commande MATERIAL, leurs valeurs par

défaut utilisé dans le logiciel Silvaco sont représentés dans le tableau (III-1). Les matériaux autres que le Si ont des valeurs différentes.

Paramètre (unité)	$ETRAP = E_t - E_i$ (eV)	$TAUN0 \leftrightarrow \tau_{n0}$ (s)	$TAUP0 \leftrightarrow \tau_{p0}$ (s)
Défaut	0.0	1.0×10^{-7}	1.0×10^{-7}

Tableau (III-1) Paramètres par défaut du modèle Schokley-Read-Hall dans Silvaco.

La dépendance de la durée de vie du modèle SRH avec la température est donnée par les deux relations de Klaassen [6]:

$$\tau_{n0}^{-1} = (\tau_{ksrhn}^{-1} + C_{ksrhn}n) \left(\frac{300}{T_L}\right)^{G_{ksrhn}} \quad (\text{III-23})$$

$$\tau_{p0}^{-1} = (\tau_{ksrhp}^{-1} + C_{ksrhp}n) \left(\frac{300}{T_L}\right)^{G_{ksrhp}} \quad (\text{III-24})$$

Où n est la concentration d'impureté totale, les autres paramètres des relations (III-23) et (III-24) sont définis par défaut dans le tableau (III-2).

τ_{ksrhn}^{-1} (s)	τ_{ksrhp}^{-1} (s)	C_{ksrhn} cm ³ /s	C_{ksrhp} cm ³ /s	G_{ksrhn}	G_{ksrhp}
$2.5 \cdot 10^{-3}$	$2.5 \cdot 10^{-3}$	$3 \cdot 10^{-13}$	$11.76 \cdot 10^{-13}$	1.77	0.57

Tableau (III-2) Paramètres par défaut des équations (III-23) et (III-24) dans SILVACO.

Aussi la dépendance de la durée de vie avec le dopage est donnée par les relations de Scharfetter [7] :

$$\tau_n(N) = \tau_{n,min} + \frac{\tau_{n,max} - \tau_{n,min}}{1 + \left(\frac{N}{N_{n,ref}}\right)^{\gamma}} \quad (\text{III-25})$$

$$\tau_p(N) = \tau_{p,min} + \frac{\tau_{p,max} - \tau_{p,min}}{1 + \left(\frac{N}{N_{p,ref}}\right)^\gamma} \quad (\text{III-26})$$

Où $\tau_{n,max}$, $\tau_{n,min}$, $\tau_{p,max}$, $\tau_{p,min}$ sont les valeurs maximales et minimales de la durée de vie des électrons et des trous respectivement, $N_{n,ref}$, $N_{p,ref}$ est le niveau de référence du dopage pour lequel $\tau(N_{n,ref}) = (\tau_{n,max} + \tau_{n,min})/2$ et $(N_{p,ref}) = (\tau_{p,max} + \tau_{p,min})/2$, γ est l'exposant.

Le tableau (III- 3) représente les paramètres par défaut :

$\tau_{n,min}$ (s)	$\tau_{p,min}$ (s)	$\tau_{n,max}$ (s)	$\tau_{p,max}$ (s)	$N_{n,ref}$ cm ⁻³	$N_{p,ref}$ cm ⁻³	γ (s)
0.0	0.0	1.0.10 ⁻⁵	3.10 ⁻⁶	1.10 ¹⁶	1.10 ¹⁶	1.0

Tableau (III-3) Paramètres par défaut des équations (III-25) et (III-26).

III-4-2. Recombinaison Auger

Le processus de recombinaison Auger est représenté sur la figure (III-2). L'excès d'énergie issu de la recombinaison d'un électron de la bande de conduction et d'un trou de la bande de valence peut être transféré à une troisième particule libre, électrons ou trou. Ces charges sont considérées comme des particules quasi libres, n'interagissant pas entre elles. La recombinaison

Auger est modélisée en utilisant l'expression suivante [8]:

$$R_{Auger} = C_{Aug,n}(pn^2 - nn_{ie}^2) + C_{Aug,p}(np^2 - pn_{ie}^2) \quad (\text{III-27})$$

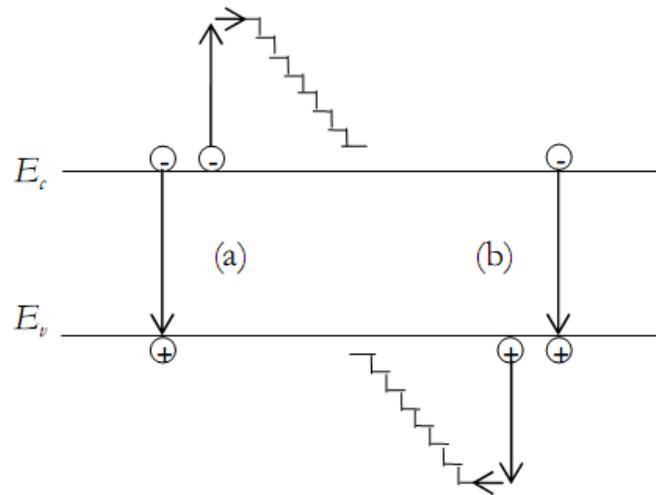


Figure (III-2) Mécanisme de recombinaison Auger. L'excès d'énergie issu de la recombinaison peut être transféré à un électron (a) ou à un trou (b).

Où $C_{Aug,n}$, $C_{Aug,p}$ sont les coefficients Auger pour les électrons et les trous. Les valeurs par défaut de ces coefficients sont données dans le tableau (III-4) :

$C_{Aug,n}$ (cm ⁶ /s)	$C_{Aug,p}$ (cm ⁶ /s)
$8.3 \cdot 10^{-32}$	$1.8 \cdot 10^{-31}$

Tableau (III-4) Paramètres par défaut du modèle de recombinaison Auger dans SILVACO.

Aussi la dépendance du modèle Auger en fonction de la température et du niveau de dopage [9] est donnée par la relation suivante :

$$R_{Auger} = C_{Aug,n}(pn^2 - nn_{ie}^2) + C_{Aug,p}(np^2 - pn_{ie}^2) \tag{III-28}$$

Avec

$$C_n = \left[A_{Aug,n} + B_{Aug,n} \frac{T}{300} + C_{Aug,n} \left(\frac{T}{300} \right)^2 \right] \left[1 + H_{Aug,n} \exp\left(\frac{-n}{N_{0,n}} \right) \right] \tag{III-29}$$

$$C_p = \left[A_{Aug,p} + B_{Aug,p} \frac{T}{300} + C_{Aug,p} \left(\frac{T}{300} \right)^2 \right] \left[1 + H_{Aug,p} \exp\left(\frac{-p}{N_{0,p}} \right) \right] \quad (\text{III-30})$$

Les paramètres des relations (III-29) et (III-30) sont définis par défaut dans les tableaux (III-5) et (III-6):

$A_{Aug,n}$ cm ⁶ /s	$B_{Aug,n}$ cm ⁶ /s	$C_{Aug,n}$ cm ⁶ /s	$H_{Aug,n}$	$N_{0,n}$ cm ⁻³
$6.7 \cdot 10^{-32}$	$2.45 \cdot 10^{-31}$	$-2.2 \cdot 10^{-32}$	3.4667	$1.0 \cdot 10^{18}$

Tableau (III-5) Paramètres par défaut des équations (III-29) et (III-30) dans SILVACO.

$A_{Aug,p}$ cm ⁶ /s	$B_{Aug,p}$ cm ⁶ /s	$C_{Aug,p}$ cm ⁶ /s	$H_{Aug,p}$	$N_{0,p}$ cm ⁻³
$7.2 \cdot 10^{-32}$	$4.5 \cdot 10^{-33}$	$2.63 \cdot 10^{-32}$	8.25688	$1.1 \cdot 10^{18}$

Tableau (III-6) Paramètres par défaut des équations (III-29) et (III-30) dans SILVACO.

Ce mode de recombinaison va donc prédominer pour les forts niveaux d'injection (cas des cellules solaire a concentration) ou pour les dopages importants dépassant 10^{17}cm^{-3} [10] (cas des émetteurs fortement dopés). En effet, comme illustre la figure (III-3), le mécanisme de recombinaison Auger est proportionnel à la carré du dopage et il intervient surtout dans les régions fortement dopées de la cellule photovoltaïque comme celle située en surface de l'émetteur (n+) ou a la zone de champ de surface arrière (p+).

Aux faibles niveaux de dopage (inferieur a 10^{16}cm^{-3}), la durée de vie est limitée par la recombinaison SRH et elle varie linéairement avec l'inverse du niveau de dopage.

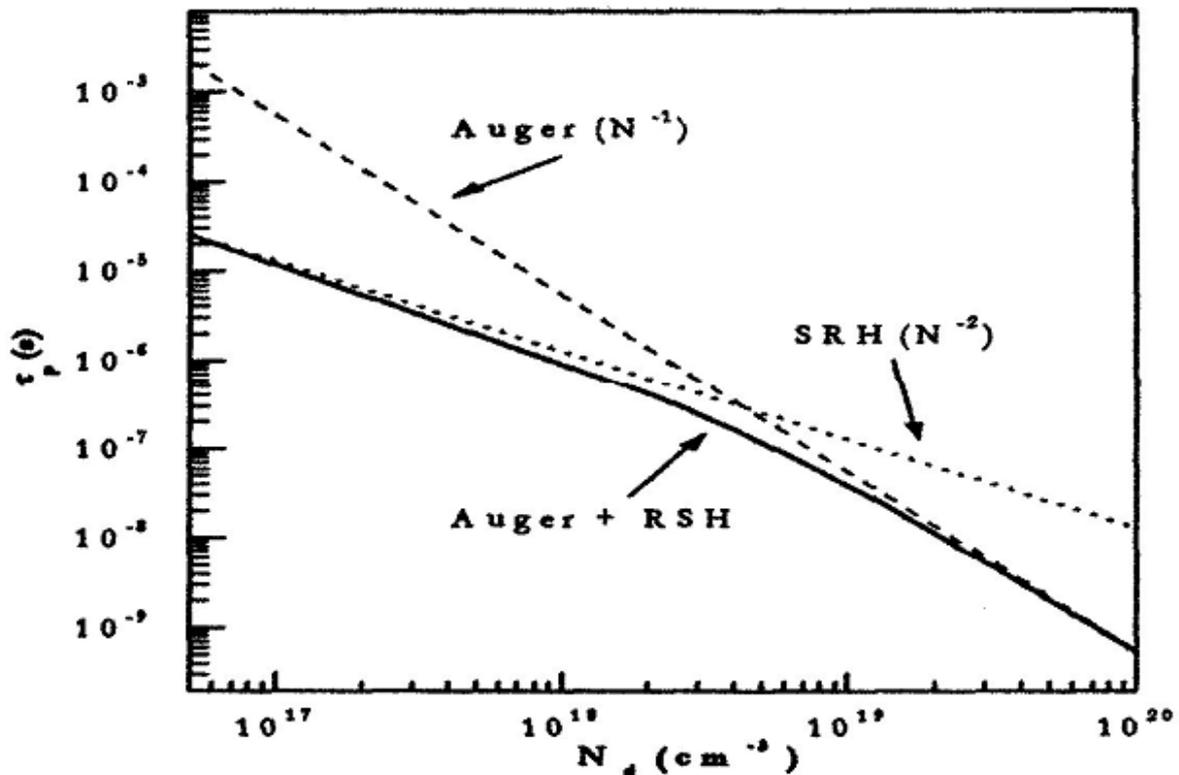


Figure (III-3) Influence du dopage sur les durées de vie Auger et SRH dans le volume du silicium [11]

III-4-3. Recombinaison Radiative

La recombinaison radiative correspond à la recombinaison d'un électron de la bande de conduction avec un trou de la bande de valence, avec émission d'un photon d'énergie proche de celle du gap du matériau (processus inverse de la photo génération). Le mécanisme de recombinaison radiative est un processus dominant dans les semi-conducteurs à gap direct comme le GaAs. Pour silicium à gap indirect, ce mécanisme est relativement rare du fait que cette transition ne peut avoir lieu qu'avec l'assistance d'un photon. Ainsi, dans le cadre de notre étude, ce type de recombinaison est négligeable devant les autres mécanismes.

III-4-4. Recombinaison en surface

L'ensemble des mécanismes précédents constitue des recombinaisons ayant lieu en volume du matériau. Il faut également considérer les recombinaisons en surface dont le mécanisme est représenté sur la figure (III-4). Le formalisme du mécanisme de recombinaison SRH peut être reformulé dans ce cas, avec des recombinaisons par unité de surface plutôt que par unité de volume. Le taux de recombinaison en surface est donné par l'expression suivante :

$$R_{surf} = \frac{pn - n_i^2}{\tau_p^{effi} \left[n + n_i \exp\left(\frac{E_t - E_i}{kT_L}\right) \right] + \tau_n^{effi} \left[p + n_{ie} \exp\left(\frac{-(E_t - E_i)}{kT_L}\right) \right]} \quad (\text{III-31})$$

Où :

$$\frac{1}{\tau_n^{effi}} = \frac{1}{\tau_n^i} + \frac{d_i}{A_i} S_n \quad (\text{III-32})$$

$$\frac{1}{\tau_p^{effi}} = \frac{1}{\tau_p^i} + \frac{d_i}{A_i} S_p \quad (\text{III-33})$$

τ_p^{effi} est la durée de vie effective, les paramètres d_i et A_i sont la longueur et l'épaisseur de l'interface. S_n et S_p sont les vitesses de recombinaison pour les électrons et les trous respectivement par défaut, $s_n = s_p = 0 \text{ cm/s}$.

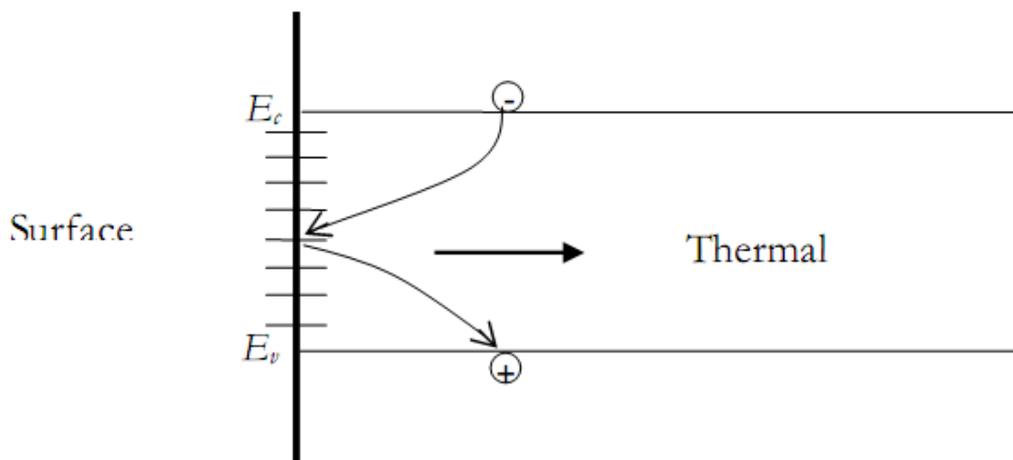


Figure (III-4) Mécanisme de recombinaison en surface.

Pour des surfaces fortement dopées, le mécanisme de recombinaison Auger domine la vitesse de recombinaison en surface. Un modèle développé par Cuevas et al [12] permet de déterminer la vitesse de recombinaison effective figure (III-5)

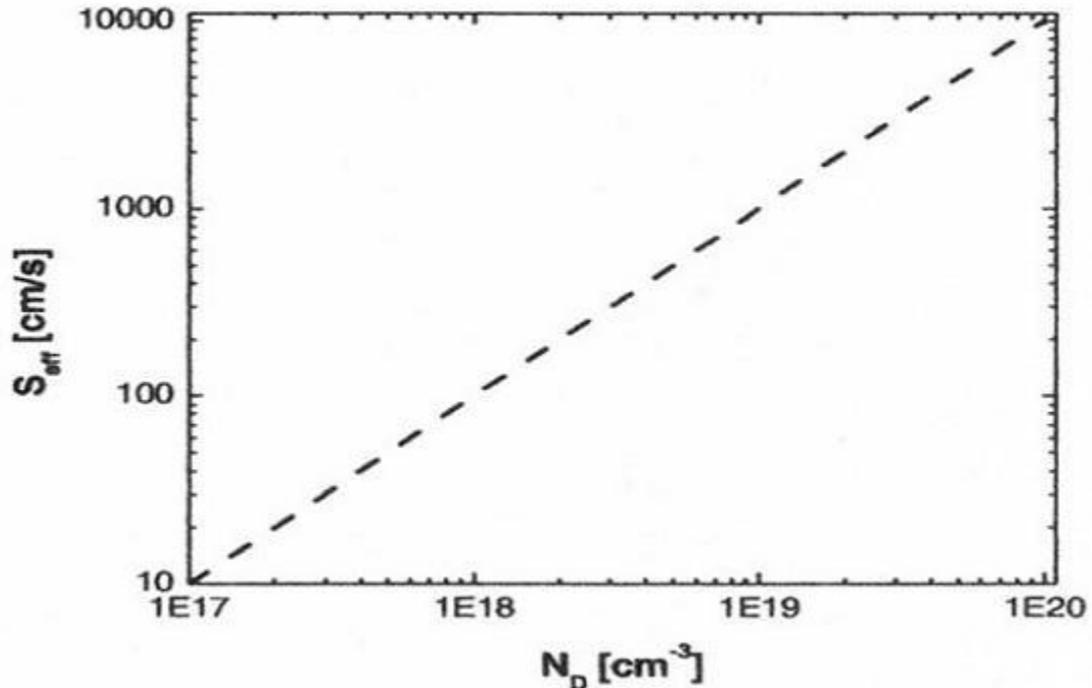


Figure (III-5) Vitesse de recombinaison effective de surface en fonction du niveau de dopage [12].

A partir de cette figure, nous constatons que plus le dopage est important et plus la vitesse de recombinaison en surface est grande. Ainsi, il est difficile de prétendre à une passivation de surface.

III-5. Les modèles de Mobilité

La mobilité des porteurs de charge dépend de nombreux paramètres tels que la température, le dopage, ou encore les collisions des porteurs entre eux ou avec les impuretés.

Dans ce paragraphe, nous présentons les modèles physiques de mobilité.

III-5-1. Modèle de la mobilité « Masetti »

Dans un semi-conducteur dope, la nature de ce dernier ainsi que la valeur de son dopage influe sur la mobilité. Cela est dû à la dispersion des porteurs par collision avec les impuretés fixes qui a pour conséquence la dégradation de la mobilité. Le calcul de la mobilité μ_n ou μ_p prend en compte cette dégradation dans le modèle de la mobilité. Pour le Silicium, il convient d'utiliser le modèle de Masetti [13].

L'expression de la mobilité des électrons est donnée par :

$$\mu_n = \mu_{min1,n} \exp\left(-\frac{P_{c,n}}{N}\right) + \frac{\mu_{max,n} - \mu_{min2,n}}{1 + \left(\frac{N}{C_{r,n}}\right)^{a,n}} - \frac{\mu_{1,n}}{1 + \left(\frac{C_{s,n}}{N}\right)^{B,n}} \quad (\text{III-34})$$

L'expression de la mobilité des trous est donnée par :

$$\mu_p = \mu_{min1,p} \exp\left(-\frac{P_{c,p}}{N}\right) + \frac{\mu_{max,p} - \mu_{min2,p}}{1 + \left(\frac{N}{C_{r,p}}\right)^{a,p}} - \frac{\mu_{1,p}}{1 + \left(\frac{C_{s,p}}{N}\right)^{B,p}} \quad (\text{III-35})$$

Ou N est la concentration totale des impuretés ionisées ; $\mu_{max,n}, \mu_{max,p}$ sont les mobilités qui tiennent compte des interactions électrons-photons ; $\mu_{min1,n}, \mu_{min2,n}, \mu_{min1,p}, \mu_{min2,p}$ sont les mobilités de référence ; $P_{c,n}, C_{r,n}, C_{s,n}, P_{c,p}, C_{r,p}, C_{s,p}$ sont les niveaux de référence du dopage ; $a.n, B.n, a.p, B.p$ sont des coefficients de l'exposant.

Les tableaux (III-7) et (III-8) indiquent les paramètres utilisés par défaut dans SILVACO pour le modèle de la mobilité des électrons (en introduisant le phosphore dans le silicium type N) et des trous (en introduisant le Bore dans le silicium type P).

$\mu_{min1,n}$ cm ² /Vs	$\mu_{min2,n}$ cm ² /Vs	$\mu_{max,n}$ cm ² /Vs	$\mu_{1,n}$ cm ² /Vs	$P_{c,n}$ cm ⁻³	$C_{r,n}$ cm ⁻³	$C_{s,n}$ cm ⁻³	$a.n$	$B.n$
68.5	68.5	1414	56.1	0.0	9.2.10 ¹⁶	3.41.10 ²⁰	0.711	1.98

Tableau (III-7) Paramètres utilisés par défauts dans SILVACO pour le modèle de mobilité (Masetti) des électrons en introduisant le phosphore dans le Silicium.

$\mu_{min1,p}$ cm ² /Vs	$\mu_{min2,p}$ cm ² /Vs	$\mu_{max,p}$ cm ² /Vs	$\mu_{1,p}$ cm ² /Vs	$P_{c,p}$ cm ⁻³	$C_{r,p}$ cm ⁻³	$C_{s,p}$ cm ⁻³	$a.p$	$B.p$
44.9	0.0	470.5	29.0	9.23.10 ¹⁶	2.23.10 ¹⁷	6.1.10 ²⁰	0.719	2.0

Tableau (III-8) Paramètres utilisés par défauts dans SILVACO pour le modèle de mobilité (Masetti) des trous en introduisant le bore dans le Silicium.

III-5-2. Modèle de la mobilité « Caughey et Thomas »

Sous fort champ électrique (par exemple dans la zone de charge d'espace de la jonction pn) la vitesse de dérive des porteurs n'augmente pas de façon linéaire en fonction du champ électrique. Ce phénomène de saturation de la vitesse des porteurs peut être décrit comme la dégradation de la mobilité. L'expression de Caughey et Thomas [14] implémentée dans SILVACO met en évidence la dépendance de la mobilité en fonction d'un fort champ électrique.

L'expression de la mobilité des électrons est donnée par :

$$\mu_n(E) = \mu_{n0} \left[\frac{1}{1 + \left(\frac{\mu_{n0} E}{v_{sat,n}} \right)^{\beta_n}} \right]^{\frac{1}{\beta_n}} \quad (\text{III-36})$$

L'expression de la mobilité des trous est donnée par :

$$\mu_p(E) = \mu_{p0} \left[\frac{1}{1 + \left(\frac{\mu_{p0} E}{v_{sat,p}} \right)^{\beta_p}} \right]^{\frac{1}{\beta_p}} \quad (\text{III-37})$$

Où E est le champ électrique parallèle ; μ_{n0} et μ_{p0} sont les mobilités des électrons et des trous dans un faible champ électrique respectivement ; $v_{sat,n}$, $v_{sat,p}$ sont les vitesses de saturation des électrons et des trous ; β_n , β_p sont les coefficients de l'exposant.

Les vitesses de saturation sont calculées par défaut à partir des modèles qui dépendent de la température [15]. Elles sont données par :

$$v_{sat,n} = \frac{a_{fld,n}}{1 + \theta_{fld,n} \exp\left(\frac{T_L}{T_{fld,n}}\right)} \quad (\text{III-38})$$

$$v_{sat,p} = \frac{a_{fld,p}}{1 + \theta_{fld,p} \exp\left(\frac{T_L}{T_{fld,p}}\right)} \quad (\text{III-39})$$

Les valeurs des paramètres par défaut sont données dans le tableau suivant :

$\beta.n$	$\beta.p$	$\alpha_{fld.n}$	$\alpha_{fld.p}$	$\theta_{fld.n}$	$\theta_{fld.p}$	$T_{fld.n}$	$T_{fld.p}$
2.0	1.0	$2.4 \cdot 10^7$	$2.4 \cdot 10^7$	0.8	0.8	600	600

Tableau (III-9) Paramètres utilisés par défaut dans SILVACO pour le modèle de mobilité qui dépend du champ électrique.

III-5-3. Modèle de la mobilité « Canali »

Le modèle de Canali a été implémenté en fixant les valeurs de $\beta.n$ et $\beta.p$ dans le modèle de Caughey-Thomes[16]. Les expressions sont données par :

$$\beta.n = \beta_{0.n} \left(\frac{T_L}{300} \right) \beta_{exp.n} \quad (III-40)$$

$$\beta.p = \beta_{0.p} \left(\frac{T_L}{300} \right) \beta_{exp.p} \quad (III-41)$$

Le modèle de Canali peut être employé pour le silicium jusqu' à 430 K.

Le tableau (III-10) indique les paramètres utilisés par défaut dans SILVACO pour le modèle de Canali.

$\beta_{0.n}$	$\beta_{0.p}$	$\beta_{exp.n}$	$\beta_{exp.p}$
1.109	1.213	0.66	0.17

Tableau (III-10) Paramètres utilisés par défaut dans SILVACO pour le modèle de Canali.

II-6. Rétrécissement de la bande interdite (Bandgap-Narrowing)

Le mécanisme physique associé à la distorsion des limites des bandes d'énergies résulte principalement d'une interaction atomes donneurs – porteurs libres. Ces interactions provoquent ainsi un élargissement du niveau initialement discret des impuretés, ce qui conduit à la réunion de cette bande d'énergie des impuretés ionisées en excès avec la bande la plus proche (la bande de conduction ou de valence selon le type de dopage).

Dans les semi-conducteurs fortement dopés (supérieur à 10^{17}cm^{-3}), le mécanisme physique associé à la distorsion des limites des bandes d'énergies se présente selon trois cas différents [17, 18]:

1. Les limites des bandes de valence et de conduction développent des queues et pénètrent dans la bande interdite.
2. Si la concentration de l'impureté donneuse est élevée, les niveaux énergétiques de ces impuretés s'élargissent en une bande d'impuretés qui chevauche avec la bande de conduction.
3. Une concentration d'atomes donneurs très élevée provoque une variation spatiale de la largeur de la bande interdite, résultat d'une déformation du réseau cristallin.

En conséquence, toutes ces modifications entraînent une réduction apparente de la largeur de bande interdite. Ce phénomène est plus connu sous le nom de « Bandgap-Narrowing ».

Dans Silvaco, cet effet est implémenté par les deux modèles de Bennett-Wilson et Del-Alamo.

La formule de Bennett-Wilson [19] est donnée par :

$$\Delta E_g(N) = \begin{cases} -E_{bgn} \left[\log \left(\frac{N}{N_{bgn}} \right) \right]^2 & \text{si } N \geq N_{bgn} \\ 0 & \text{si } N < N_{bgn} \end{cases} \quad (\text{III-42})$$

et la formule de Del-Alamo [20-21] est donnée par :

$$\Delta E_g(N) = \begin{cases} -E_{bgn} \left[\log \left(\frac{N}{N_{bgn}} \right) \right] & \text{si } N \geq N_{bgn} \\ 0 & \text{si } N < N_{bgn} \end{cases} \quad (\text{III-43})$$

Où ΔE_g est la diminution de la bande interdite, E_{bgn} est un paramètre du matériau qui caractérise la variation du gap, N_{bgn} est le niveau de référence du dopage. Donc la diminution de la bande interdite a lieu si le dopage est supérieur à N_{bgn} .

III-7. Conclusion

Dans ce chapitre nous avons présenté la physique des semi-conducteurs qui se trouve à la base de la conception et de la modélisation de notre cellule. A la base de la modélisation physique se trouvent cinq équations aux dérivées partielles qui sont l'équation de Poisson, deux équations de continuités et deux équations de transport.

L'intégration de la lumière dans le système des équations est réalisée via une génération optique dans les deux équations de transport, celle des électrons et des trous. Pour améliorer la précision des résultats de la simulation numérique et approcher au maximum la réalité physique de certains phénomènes, nous avons exposé les différents modèles physiques utilisés dans cette étude.

L'incorporation du rétrécissement de la largeur de la bande interdite et du changement du taux de transition inter bande dans les équations de transport des porteurs minoritaires dans les régions fortement dopées, permet de prévoir avec exactitude les performances des cellules solaires.

L'étude des tandems solaires InGaN/Si et InGaP/Si, ainsi que l'optimisation de leurs performances seront développées dans le quatrième chapitre.

III-8. Références bibliographiques

- [1] PINTO M.R., Conor S. Rafferty, and Robert W. Dutton, “PISCES2 - Poisson and Continuity Equation Solver”, Stanford Electronics Laboratory Technical Report, Stanford University, September 1984.
- [2] SELBERHERR, S. Analysis and Simulation of Semiconductor Devices. Wien, New York: Springer- Verlag, 1984.
- [3] CRISTIANE HONSBURG, STUARTBOWDEN, « Photovoltaics Devices, systems and Applications » (PVCROM). Sydney: univ. of New South Wales, 1999.
- [4] SHOCKLEY.W, READ.W.T, “Statistics of the recombinations of holes and electrons”. Physical Review, 1952, vol. 87, no5, p. 835-842.
- [5] HALL. R.N., “Electron Hole Recombination in Germanium”, Physical Review, 1952, vol. 87, no2, p.387.
- [6] KLAASSEN, D.B.M., “A Unified Mobility Model for Device Simulation - II. Temperature Dependence of Carrier Mobility and Lifetime”, Solid-State Elect., 1992, Vol. 35, No7 p. 961-967.
- [7] J.G.FOSSUM, D.S.LEE. “A physical model for the dependence of carrier lifetime on doping density in nondegenerate Silicon” Solid State Electronics, 1982, Vol.25, No8, p.741-747.
- [8] DZIEWIOR J. AND W. SCHMID, “Auger Coefficient for Highly Doped and Highly Excited Silicon”, Appl. Phys. Lett., 1977, Vol. 31, p. 346-348.
- [9] HULDT, L., N. G. NILSSON AND K.G.SVANTESSON, “The temperature dependence of band-to-band Auger recombination in Silicon”, Applied Physics Letters, 1979, Vol. 35 p.776-777.
- [10] KERR.M.J, CUEVAS.A, “General parameterisation of Auger recombination in crystalline silicon”, 2002, Vol.91, p.2473-2480.
- [11] ACEDEVO.A, “Limits of the maximum efficiency of silicon solar cells-Effects due to Auger Generation and to deep levels” Revista Mexicana de Fisica, 1996, Vol.42-3

- [12] CUEVAS.A, GIROULT-MATLAKOWSKI, BASORE.G, BASORE.A, DUBOIS.P.A, KING.R.R, Proceedings of the first world conference WCPEC, Hawaii, 1994, p.1446-1449
- [13] MASETTI G., M.SEVERI, AND S.SOLMI, “Modeling of Carrier Mobility Against Carrier Concentration in Arsenic, Phosphorous and Boron doped Silicon”, IEEE Trans. Elec. Dev. ED-30, (1983): 764-769.
- [14] CAUGHEY, D.M., AND R.E. THOMAS. “Carrier Mobilities in Silicon Empirically Related to Doping and Field.” Proc. IEEE 55, (1967): 2192-2193.
- [15] SCHWARZ, S.A., AND S.E. RUSSE, “Semi-Empirical Equations for Electron Velocity in Silicon: Part II — MOS Inversion Layer”, IEEE Trans. Electron Devices Vol. 30, No. 12 (1983): 1634- 1639.
- [16] CANALI, C., G.MAGNI, R. MINDER AND G. OTTAVIANI, “Electron and Hole drift velocity measurements in Silicon and their empirical relation to electric field and temperature”, IEEE Trans. Electron Devices ED-22 (1975): 1045-1047.
- [17] F.A.LINDHOLM, S.S.LI, AND C.TSAH, “ Fundamental limitations imposed by high doping on the performance of PN junction silicon solar cells”, 11th IEEE Photovoltage specialists conference (1975), pp. 3-12
- [18] J. DEL ALAMO, R.M. SWANSON AND S. SWIRHUN, “Measuring and modelling minority carrier transport in heavily doped silicon” Solid-state electronics, Vol.28 N°12, (1985), PP. 47-54
- [19] BENNETT, H.S., AND C.L. WILSON, “Statistical comparisons of data on band-gap narrowing in heavily doped Silicon: Electrical and Optical measurements”, J. Appl. Phys. Vol 55, No. 10, (1984): 3582- 3587.
- [20] J. DEL ALAMO, AND R.M. SWANSON, “Simultaneous measuring of hole lifetime, hole mobility and bandgap narrowing in heavily doped n-type silicon”, IEDM Technical Digest, (December 1985): 290- 293.
- [21] SWIRHUN, S., Y.H. KAWARK AND R.M. SWANSON, “Simultaneous measuring of hole lifetime, hole mobility and bandgap narrowing in heavily doped p-type silicon”, IEDM Technical Digest, (December 1986): 24-27.

Chapitre IV

Résultats et interprétations

IV-1. Introduction

L'optimisation des performances d'une cellule solaire consiste à la recherche des paramètres technologiques optimaux (dopage et épaisseur) de ces différentes couches.

Ces derniers assurent les meilleures caractéristiques de sortie de la cellule, à savoir, le rendement de conversion η , le courant de court-circuit I_{CC} , la tension de circuit ouvert V_{CO} , et le facteur de forme FF.

Dans ce chapitre, nous avons étudié, par le biais de la simulation, deux tandems monolithiques : $(In_{0.46}Ga_{0.54}N/Si)$ et $(Ga_{0.5}In_{0.5}P/Si)$, en vue d'essayer d'optimiser leurs performances. Pour cela nous avons considéré en premier lieu, chaque cellule, séparément, en retrouvant ses paramètres optimaux. Ensuite, nous avons assemblé les deux cellules, par une jonction tunnel, et essayé d'étudier les caractéristiques de sortie de chaque tandem.

Lors de la simulation, nous avons utilisé comme outil de calcul, le simulateur Atlas de Silvaco. Il est à noter que les différentes structures étudiées dans ce chapitre, sont exposées aux mêmes conditions d'illumination à savoir, un spectre AM1.5 avec une constante d'intensité 0.1 w.cm^{-2} .

IV-2. Tandem monolithique $In_{0.46}Ga_{0.54}N/Si$

Dans ce chapitre, nous présentons les simulations de cellules photovoltaïques à base d' $In_{0.46}Ga_{0.54}N/Si$ effectuées à l'aide du logiciel Atlas de Silvaco. Nous avons étudié les performances de cellules avec différentes structures, ainsi que l'influence des paramètres. Nous allons commencer par décrire la modélisation de la cellule photovoltaïque et du matériau InGaN, avant la présentation des résultats.

IV-2-1. Description de la structure

La structure modélisée est donc une cellule à doubles jonctions $(In_{0.46}Ga_{0.54}N/Si)$, composée d'une cellule supérieure $(In_{0.46}Ga_{0.54}N)$, une cellule inférieure (Si) et une jonction tunnel. Afin d'obtenir un rendement élevé, nous avons utilisé une concentration d'indium de 46 % dans l' $In_xGa_{(1-x)}N$, donnant un gap de 1,8 eV, voir Figure (IV-1).

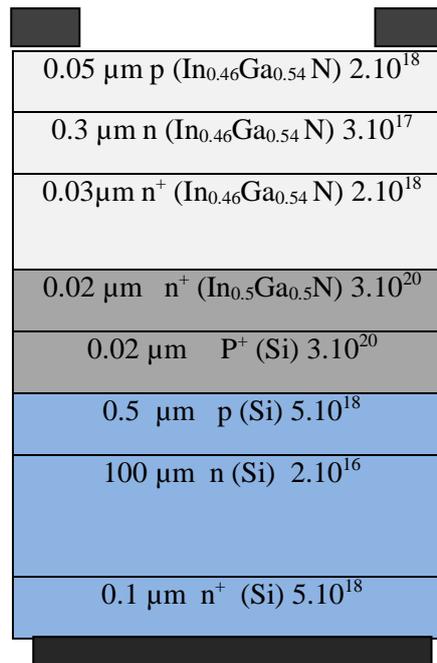


Figure (IV-1) Schéma de la cellule monolithique tandem (In_{0.46}Ga_{0.54}N/Si).

IV-2-2. Paramètres de simulation

Les paramètres d'InGaN, le matériau utilisé dans la cellule supérieure sont définis à partir des équations suivantes :

$$\text{Bande interdite [1]:} \quad E_g(x) = 0.7x + 3.4(1 - x) - 1.43x(1 - x) \quad (\text{I-1})$$

$$\text{Affinité électronique [2]:} \quad \chi = 4.1 + 0.7(3.4 - E_g) \quad (\text{I-2})$$

$$\text{Permittivité [3, 4]:} \quad \varepsilon_r = 10.5 + 8.9(1 - x) \quad (\text{I-3})$$

$$\text{Densité d'états dans la bande de conduction [5]:} \quad N_c(10^{18}) = 0.9x + 2.3(1 - x) \quad (\text{I-4})$$

$$\text{Densité d'états dans la bande de valence [5]:} \quad N_v(10^{19}) = 5.3x + 1.8(1 - x) \quad (\text{I-5})$$

Les mobilités des porteurs dépendent des concentrations de dopages. En utilisant le modèle de Caughey-Thomas, la mobilité est définie par l'expression [6]:

$$\mu_i(N) = \mu_{\min,i} + \frac{\mu_{\max,i} - \mu_{\min,i}}{1 + \left(\frac{N}{N_{g,i}}\right)^{\gamma_i}} \quad (\text{I-6})$$

i représentant soit les électrons (e), soit les trous (h)

N la concentration de dopage [cm^{-3}]

N_g le dopage critique dépendant du matériau [cm^{-3}]

γ une constante

Les valeurs de ces différents paramètres sont rassemblées dans le Tableau (VI-1) pour le GaN et l'InN. Une interpolation linéaire est ensuite utilisée pour obtenir les paramètres du matériau $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$.

Paramètre	GaN	InN
$\mu_{\min,e}$ [$\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$]	55	30
$\mu_{\max,e}$ [$\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$]	1000	1100
γ_e [s.d.]	1	1
$N_{g,e}$ [cm^{-3}]	2×10^{17}	8×10^{18}
$\mu_{\min,h}$ [$\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$]	3	3
$\mu_{\max,h}$ [$\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$]	170	340
γ_h [s.d.]	2	2
$N_{g,h}$ [cm^{-3}]	3×10^{17}	3×10^{17}

Tableau (IV-1) Paramètres utilisés dans le calcul de la mobilité des porteurs en fonction de la concentration de dopage [7].

L'un des paramètres les plus critiques pour la modélisation avancée des cellules solaires est la définition correcte de l'indice de réfraction n et du coefficient d'extinction k pour un matériau. La plupart des matériaux ternaires et quaternaires avancés ont des paramètres optiques publiés limités. De bonnes approximations des valeurs n et k peuvent être obtenues par interpolation

entre des composés plus simples. La figure (IV-2) montre un exemple d'interpolation entre GaN et InN pour arriver à des paramètres optiques pour $\text{In}_{0.46}\text{Ga}_{0.54}\text{N}$.

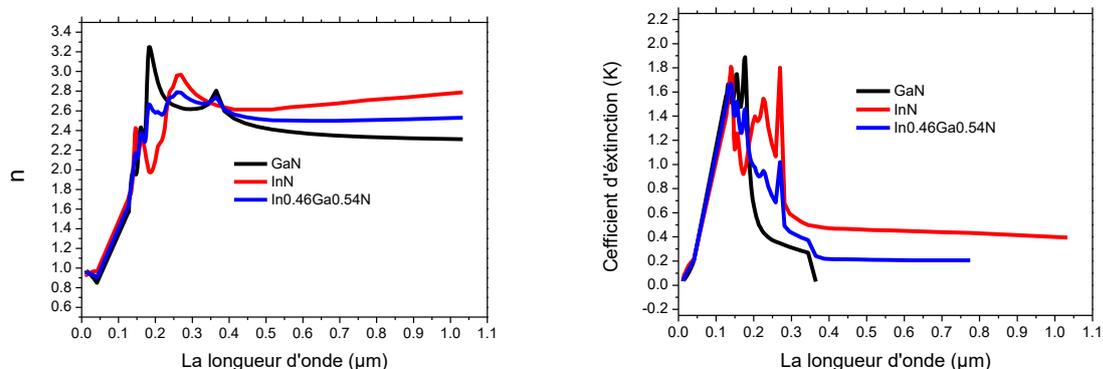


Figure (IV-2) Interpolations de n et k pour $\text{In}_{0.46}\text{Ga}_{0.54}\text{N}$ [8].

Pour le Silicium les paramètres sont disponibles, Son coefficient d'absorption est défini à partir de l'équation suivante [9,10] :

$$\alpha_{\text{Si}} = -0.425(E-E_g)^3 + 0.757(E-E_g)^2 - 0.0224(E-E_g) + 10^{-4}, \quad 1,12\text{eV} \leq E < 1.5 \text{ eV} \quad (\text{I-7})$$

$$= 0.0287 \exp [2.72(E-E_g)], \quad E \geq 1.5 \text{ eV} \quad (\text{I-8})$$

IV-3. Simulation de la cellule inférieure (Si)

La structure à étudier est une cellule de type p-n à base de Silicium, dont le schéma de principe est représenté sur la figure (IV-3). Elle est constituée principalement d'une couche émettrice fortement dopée de type p, d'une base de type n et d'une couche BSF fortement dopée de type n.

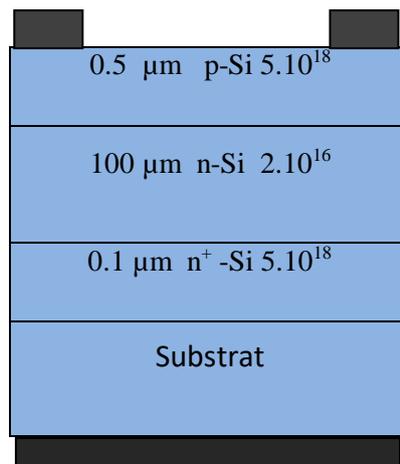


Figure (IV-3) Schéma de la cellule inférieure Si.

Au début, le maillage est créé, nous avons utilisé un maillage dont la taille des triangles est variable. Le maillage est plus dense au niveau des interfaces afin d'obtenir une bonne résolution et une bonne convergence, et il est plus large au milieu des couches afin de raccourcir le temps de calcul. La Figure (VI-4) présente le maillage utilisé pour les simulations à travers la structure Si.

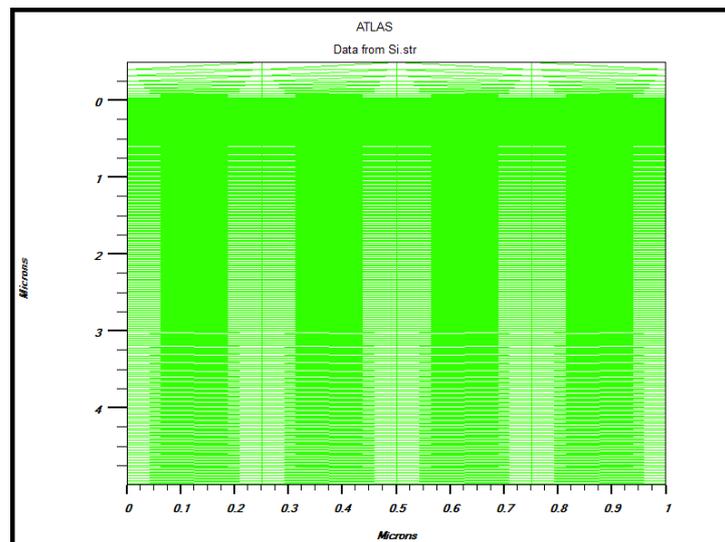


Figure (IV-4) Maillage de la cellule inférieure Si.

Après avoir identifié les paramètres du matériau et le dopage de chaque couche, enfin, plusieurs types de résultats sont programmés pour être calculés. Parmi eux : le potentiel et le champ électrostatique de la zone de déplétion à la jonction, qui peuvent être observés sur la figure (IV-5).

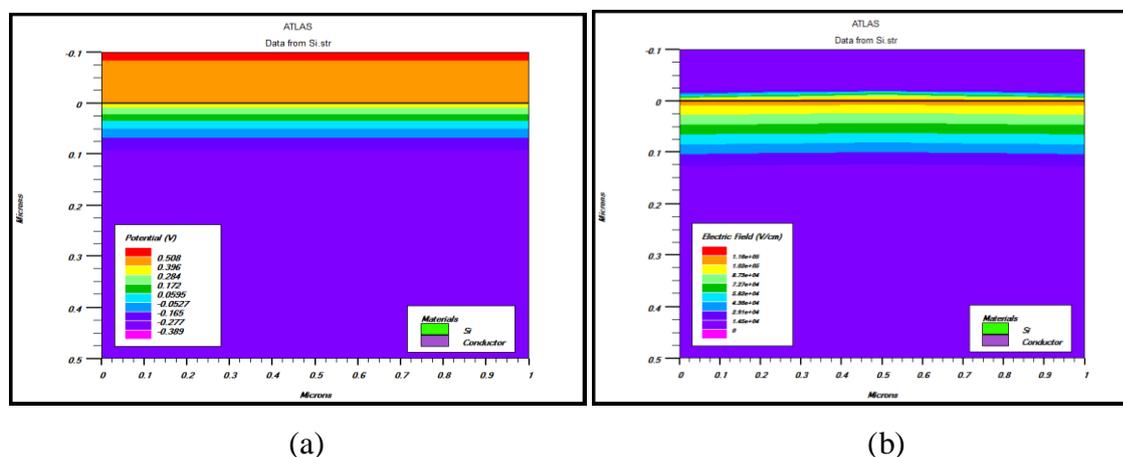


Figure (IV-5) (a) Potentiel, (b) Champ électrostatique à travers la cellule Si.

La sensibilité des cellules solaires à la lumière traduite par la réponse spectrale, chaque longueur d'onde génère un photo-courant correspond au nombre des photons incidents ayant la même énergie sur la surface. La réponse spectrale est le rapport entre la densité de courant collecté et la densité des photons incidente, pour chaque longueur d'onde du rayonnement lumineux [11, 12, 13].

La réponse spectrale est un facteur très important dans les cellules solaires, son comportement en fonction des divers paramètres détermine l'influence de ces derniers sur les performances des cellules. L'objectif est d'élargir la gamme des longueurs d'onde dans laquelle la cellule multi-jonction est active et produit ainsi du courant.

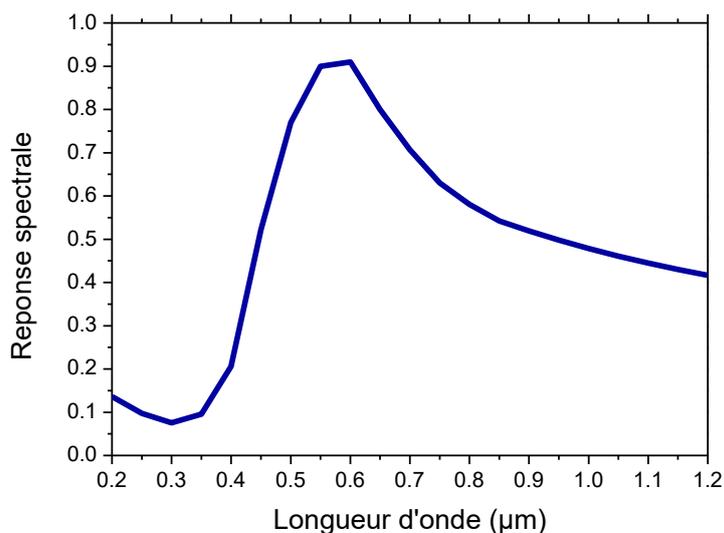


Figure (IV-7) La réponse spectrale de la cellule inférieure Si.

A ce stade de développement, la cellule a un $V_{OC} = 0,56$ V et un $I_{SC} = 37,7$ mA / cm² qui sont très proches des valeurs attendues. De plus, la caractéristique J-V peut être tracée sur la figure (IV-8) pour faciliter la détermination du point de fonctionnement de la cellule.

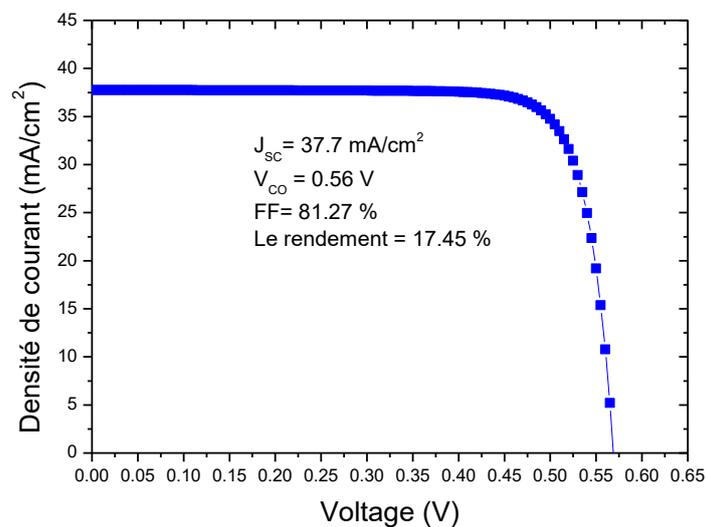


Figure (IV-8) Caractéristique J(V) de la cellule inférieure Si.

IV-4. Simulation de la cellule supérieure (In_{0.46}Ga_{0.54}N)

La structure à étudier est une cellule de type p-n à base d'In_{0.46}Ga_{0.54}N, dont le schéma de principe est représenté sur la figure (IV-9). Elle est constituée principalement d'une couche émettrice fortement dopée de type p, d'une base de type n et d'une couche BSF (Back Surface Field) dopée n⁺, qui a pour rôle, la création d'un champ électrique en face arrière, qui permet d'abaisser la valeur effective de la vitesse de recombinaison et par conséquent d'améliorer les caractéristiques électriques de la cellule.

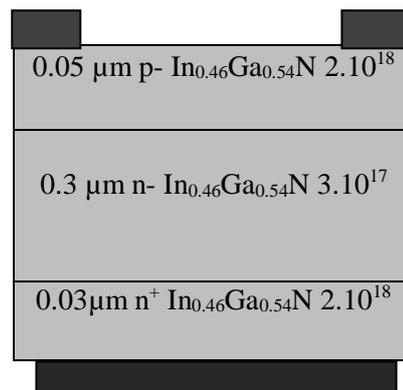


Figure (IV-9) Schéma de la cellule supérieure In_{0.46}Ga_{0.54}N.

Après la simulation de la cellule supérieure de la même façon que la cellule inférieure, nous obtenons ces résultats sur la figure (IV-10) et (IV-11).

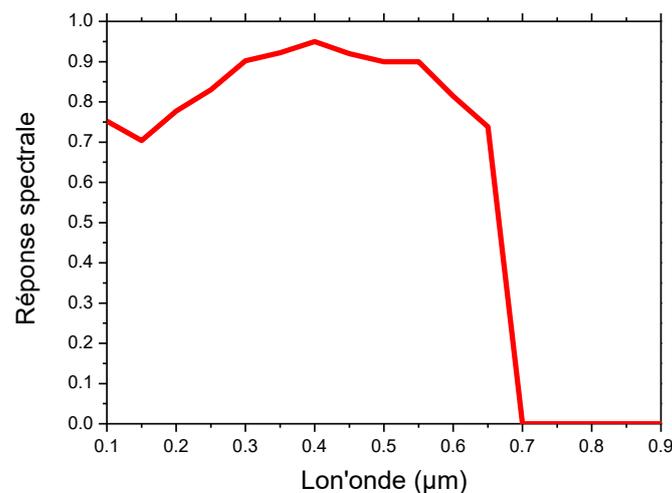


Figure (IV-10) Réponse spectrale de la cellule In_{0.46}Ga_{0.54}N.

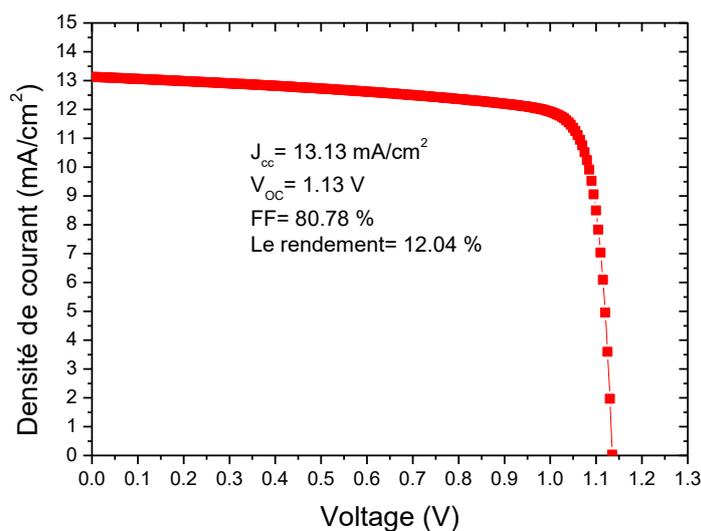


Figure (IV-11) Caractéristique $J(V)$ de la cellule $\text{In}_{0.46}\text{Ga}_{0.54}\text{N}$.

IV-5. La jonction tunnel

L'interconnexion entre les jonctions des cellules monolithiques est assurée par une jonction tunnel qui permet la réalisation d'un nombre important de couches d'épitaxie.

Comme nous l'avons vu dans le deuxième chapitre, une jonction tunnel figure (IV.12) est en réalité une jonction très mince et fortement dopés.

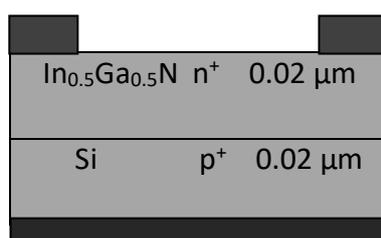


Figure (IV-12) La jonction tunnel (InGaN/Si).

La figure (IV-13) illustre le diagramme des bandes d'énergie de la jonction tunnel avec leurs courbes $J-V$ associées.

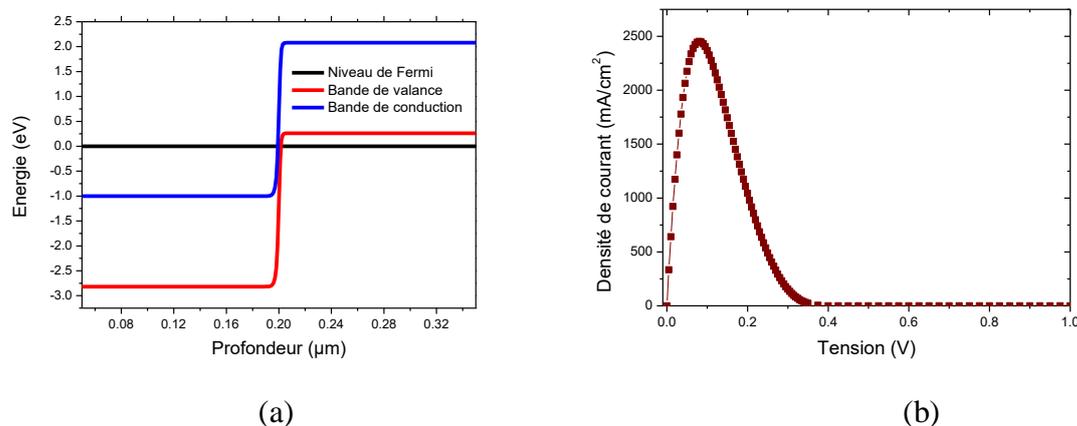


Figure (IV-13) Caractéristique de la jonction tunnel, (a) schéma du diagramme de bande (b) caractéristique $J(V)$ de la diode tunnel ($n^+ \text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}/p^+ \text{Si}$) avec une densité du courant de crête de 2500 mA/cm^2 .

A cause du dopage élevé du matériau, la zone de déplétion se rétrécit et le niveau de Fermi va se trouver alors dans les bandes elle mêmes. Cela permet aux électrons de percer un tunnel à travers la barrière, sans changement dans leur énergie.

De la figure (IV-13-b), la conception a une densité du courant de crête supérieure à la densité de courant du tandem sous un rayonnement solaire AM1.5, et répond donc au premier critère de fonctionnement des cellules solaires MJ. Un critère supplémentaire est la résistance minimale. A partir de ce tracé, la jonction tunnel ($n^+ \text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}/p^+ \text{Si}$) montre une faible résistance ($<10^{-4} \Omega\text{cm}^2$).

IV-6. Simulation de la cellule empilée mécaniquement (Mechanically stacked tandem cell)

Dans une première tentative de création d'une cellule tandem, la structure empilée mécaniquement figure (IV-14) a été utilisée pour plus de simplicité. C'est le placement de l'InGaN sur la cellule Si. Les deux cellules ne sont pas en contact. Au lieu de cela, ils sont séparés par une couche mince de vide. Chaque cellule a son propre idéal et transparent contacts.

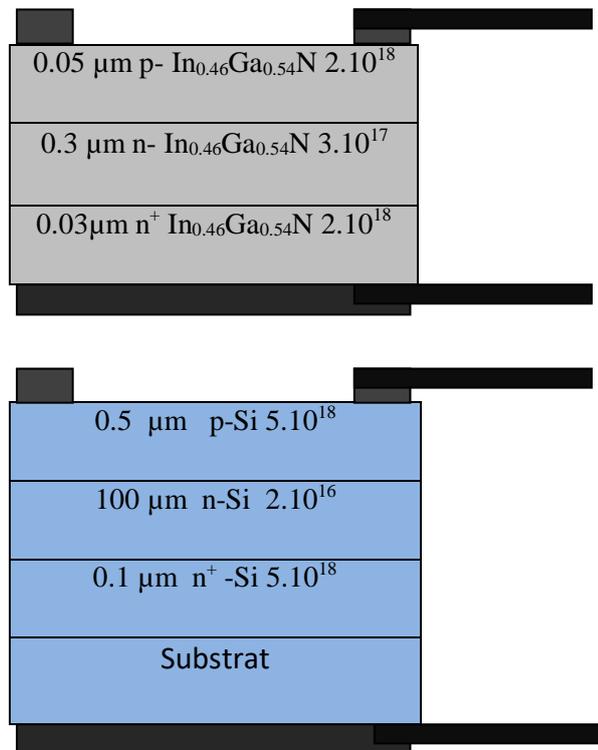


Figure (IV-14) Schéma de la cellule (In_{0.46}Ga_{0.54}N/Si) empilée mécaniquement.

IV-6-1. Caractéristique J(V) des cellules (InGaN), (Si) et tandem (InGaN/Si)

La figure (IV-15) montre les caractéristiques J(V) des cellules simples et celle du tandem empilée mécaniquement.

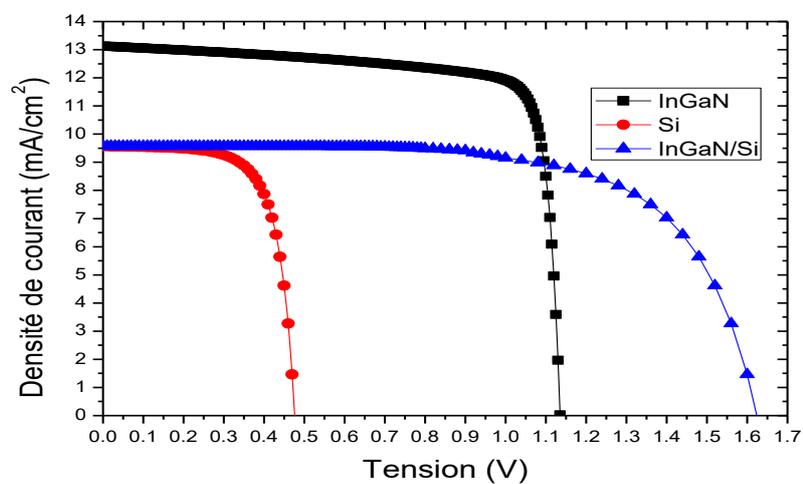


Figure (IV-15) Caractéristique J(V) des cellules InGaN, Si et tandem InGaN/Si.

Les caractéristiques des cellules extraites sont listées dans le tableau (IV-2).

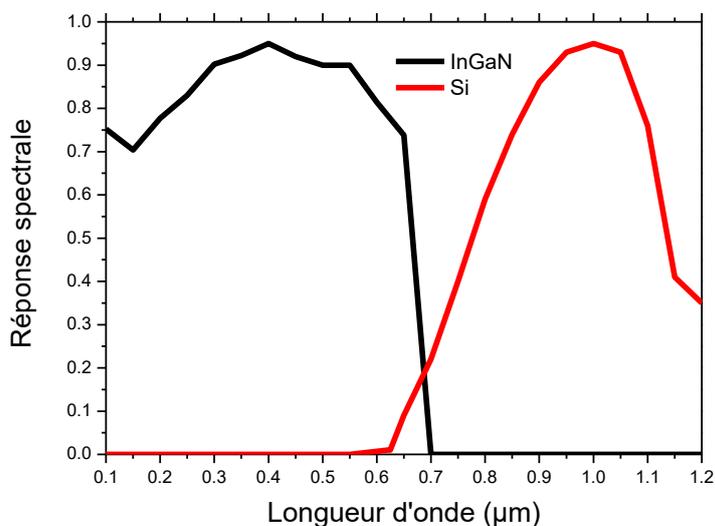
Cellule	J_{CC} (mA/cm ²)	V_{CO} (V)	FF (%)	η (%)
InGaN	13.13	1.13	80.78	12.03
Si	9.57	0.48	70.12	2.31
InGaN/Si	9.57	1.61	93.11	14.34

Tableau (IV-2) Paramètres des courbes J(V) présentées sur la figure (IV-15).

Comme prévu, la cellule supérieure ($In_{0.46}Ga_{0.54}N$) est totalement non affectée. Au contraire, la cellule inférieure (Si) produit moins de courant, en raison du fait que les photons de plus haute énergie ont été absorbés par la cellule supérieure.

IV-6-1. La réponse spectrale de la cellule tandem empilée mécaniquement

Afin d'obtenir des informations sur la plage de longueur d'onde utile dans notre structure tandem empilée mécaniquement, une simulation de la réponse spectrale a été réalisée.

**Figure (IV-16)** Réponse spectrale des deux cellules.

La figure (IV-16) indique que la cellule supérieure (InGaN) a une efficacité de collecte plus élevée pour les porteurs générés par des longueurs d'onde plus courtes qui ont une énergie photonique plus élevée; cependant, la cellule inférieure (Si) a une efficacité de collecte plus élevée pour les porteurs générés par des longueurs d'onde plus longues. Ainsi, les efficacités de collecte des jonctions sont complémentaires et le tandem a une efficacité de collecte plus élevée que les jonctions simples.

Donc il est clair que la cellule tandem est mieux adaptée à effectuer la photo-conversion dans une gamme plus large de longueurs d'onde.

IV-7. Simulation de la cellule tandem monolithique $\text{In}_{0.46}\text{Ga}_{0.54}\text{N}/\text{Si}$

L'étape suivante consiste à connecter les deux cellules : ($\text{In}_{0.46}\text{Ga}_{0.54}\text{N}$) et Si, en utilisant la diode tunnel développée plus tôt. Figure (IV-17).

0.05 μm p ($\text{In}_{0.46}\text{Ga}_{0.54}\text{N}$)	2.10^{18}
0.3 μm n ($\text{In}_{0.46}\text{Ga}_{0.54}\text{N}$)	3.10^{17}
0.03 μm n ⁺ ($\text{In}_{0.46}\text{Ga}_{0.54}\text{N}$)	2.10^{18}
0.02 μm n ⁺ ($\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$)	3.10^{20}
0.02 μm P ⁺ (Si)	3.10^{20}
0.5 μm p (Si)	5.10^{18}
100 μm n (Si)	2.10^{16}
0.1 μm n ⁺ (Si)	5.10^{18}

Figure (IV-17) Schéma de la cellule monolithique tandem ($\text{In}_{0.46}\text{Ga}_{0.54}\text{N}/\text{Si}$).

Le logiciel Atlas de Silvaco est basé sur un calcul d'éléments finis nécessitant la définition d'un maillage de la structure. Puisque les zones critiques sont les interfaces entre les différents matériaux, et que les épaisseurs des couches sont importantes, nous avons utilisé un maillage dont la taille des triangles est variable. Le maillage est plus dense au niveau des interfaces afin d'obtenir une bonne résolution et une bonne convergence, et il est plus large au milieu des couches afin de raccourcir le temps de calcul. La figure (IV-18) présente le maillage utilisé pour les simulations à travers la structure tandem ($\text{In}_{0.46}\text{Ga}_{0.54}\text{N}/\text{Si}$).

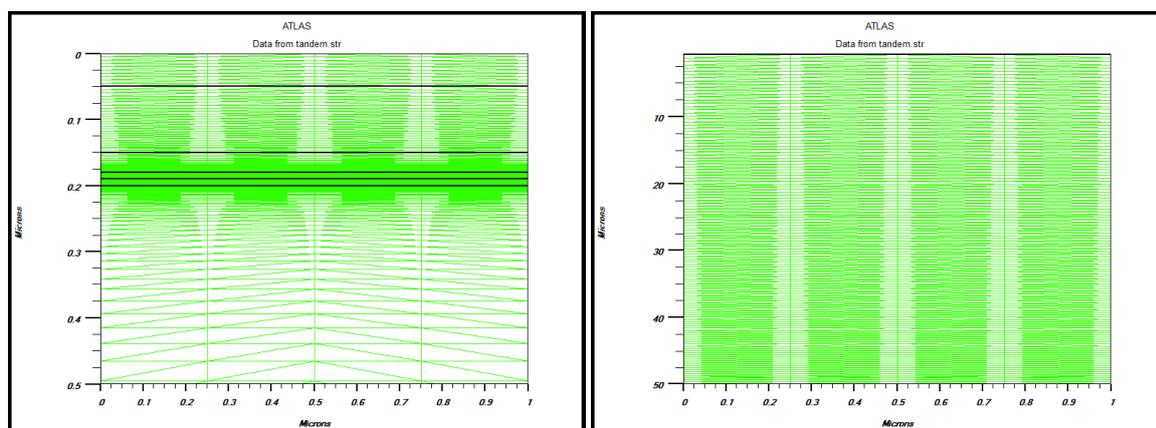


Figure (IV-18) Maillage de la structure tandem.

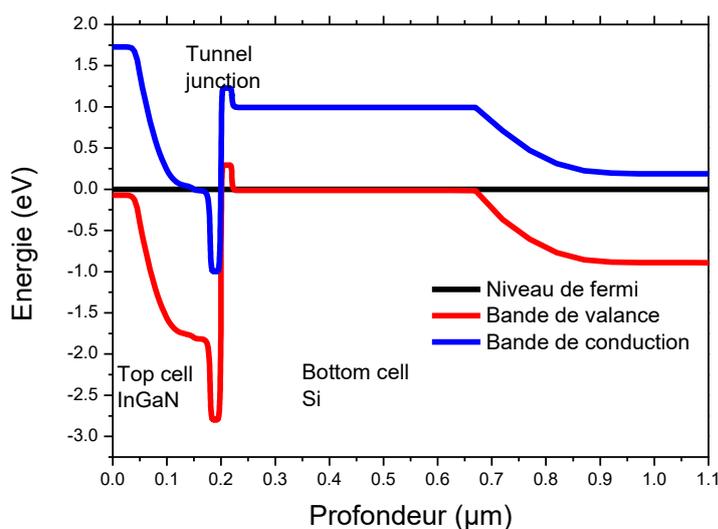


Figure (IV-19) Diagramme de bande d'énergie de la structure à l'équilibre.

Les niveaux d'électrons et de trous de Fermi sont égaux et constants dans l'ensemble du dispositif, en accord avec la prédiction théorique qu'aucun courant ne circule et qu'aucune polarisation n'est appliquée.

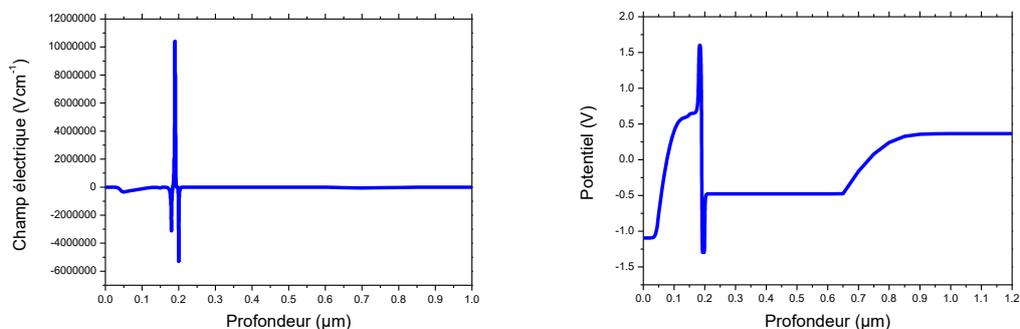


Figure (IV-20) Potentiel-Champ électrique à travers la structure.

Après la définition de la structure, des matériaux et des modèles, on calcule la caractéristique $J(V)$ sous éclairage avec le spectre AM1.5, voir la Figure (IV-21).

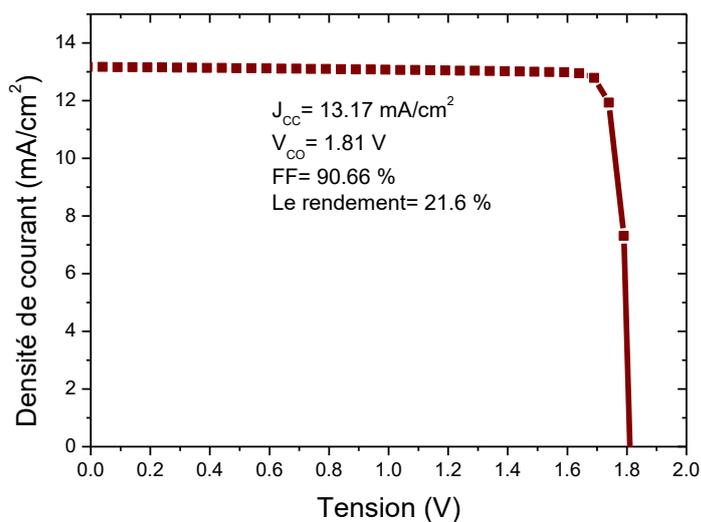


Figure (IV-21) Caractéristique courant-tension de la cellule tandem ($\text{In}_{0.46}\text{Ga}_{0.54}\text{N}/\text{Si}$).

IV-7-1. Optimisation des paramètres

Après la définition d'un modèle de cellule photovoltaïque de base, nous avons fait varier les différents paramètres afin d'optimiser la structure. Les paramètres étudiés sont l'épaisseur et le dopage de la base et l'émetteur de la cellule supérieure, l'épaisseur et le dopage de la base de la cellule inférieure, ainsi que l'épaisseur de la jonction tunnel.

Nous avons commencé par tous les paramètres de la cellule supérieure avant de faire varier les autres paramètres.

IV-7-1-1. Influence des paramètres de la cellule supérieure

A. L'épaisseur de la base

A partir du modèle de base, nous avons étudié, dans un premier temps, l'épaisseur de la base de la cellule supérieure. Nous l'avons fait varier entre 0.1 et 0.45 μm . Les caractéristiques courant-tension obtenues sont présentées sur la figure (IV-22).

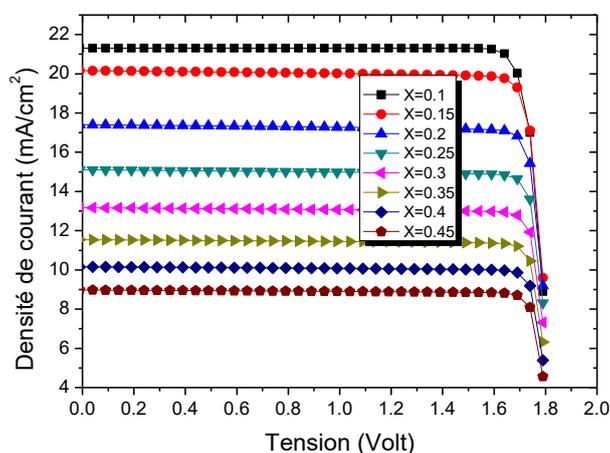


Figure (IV-22) Caractéristiques courant-tension de structures dont l'épaisseur de la base de la cellule supérieure varie entre 0.1 et 0.45 μm .

Avec l'augmentation de l'épaisseur de la base, la densité de courant de court-circuit, J_{cc} , diminue. Ceci peut s'expliquer par le fait que l'augmentation de l'épaisseur de la base à des valeurs supérieures à la longueur de diffusion des porteurs minoritaires fait diminuer le

courant I_{cc} . Nous avons remarqués, aussi, que la tension de circuit ouvert V_{co} reste constante pour des valeurs inférieure à $0.3 \mu\text{m}$, puis elle diminue.

Dans la figure (IV-23), le rendement photovoltaïque prend la même allure que le courant I_{cc} , il décroît rapidement dans le sens positif de l'épaisseur de la base. De cette figure nous constatons que le rendement prend sa valeur optimale pour une épaisseur de $X_b = 0.1 \mu\text{m}$.

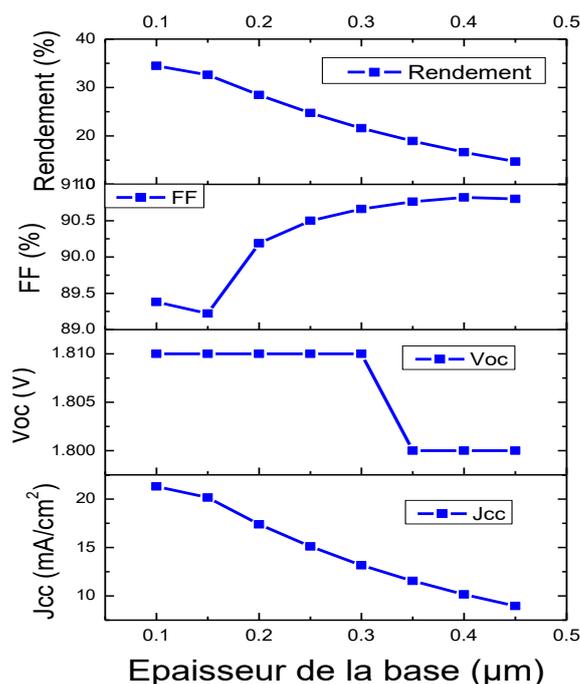


Figure (IV-23) Effet de l'épaisseur de la base de la cellule supérieure sur les performances du tandem.

B. Le dopage de la base

Les paramètres géométriques de la base de la cellule supérieure jouent un rôle très important dans l'optimisation des performances de la cellule tandem. Le dopage de cette région est choisi de façon à minimiser le courant d'obscurité d'une part, et de réduire les pertes résistives dans cette région d'autre part. Dans cette optique nous avons fixé les paramètres technologiques d'autres régions (émetteur, BSF) en gardant l'épaisseur dans cette zone $0.1 \mu\text{m}$ (valeur optimisée de l'étude précédente). Nous avons alors étudié l'influence du dopage de la base de la cellule supérieure sur les caractéristiques du tandem ($\text{In}_{0.46}\text{Ga}_{0.54}\text{N}/\text{Si}$).

Nous avons fait varier le dopage de la base entre 10^{15} cm^{-3} et 10^{19} cm^{-3} .

Notons que le choix des paramètres optimaux de chaque région de la cellule a été effectué de telle façon à réaliser le meilleur compromis entre le rendement de conversion η et le facteur de forme FF.

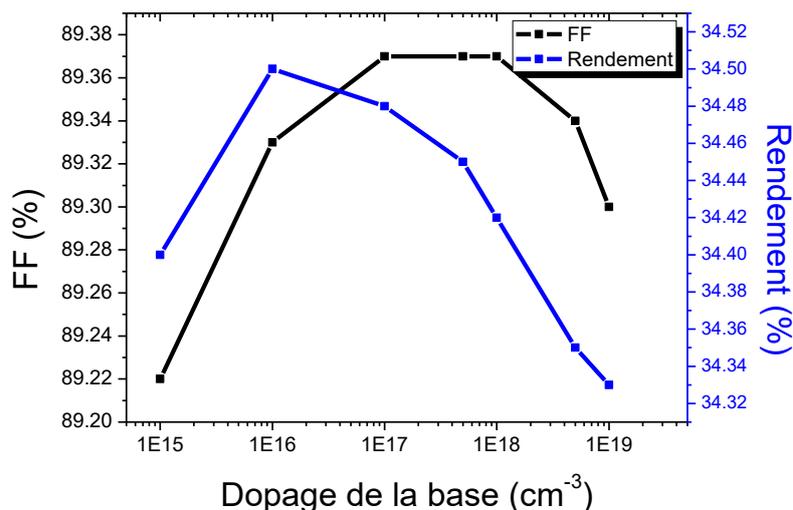


Figure (IV-24) Effet du dopage de la base de la cellule supérieure sur les performances du tandem.

Après cette procédure nous avons obtenu les résultats suivants :

Le rendement photovoltaïque η est inversement proportionnel aux valeurs croissantes du dopage : figure (IV-24), ceci peut s'expliquer par le fait que l'augmentation du dopage fait diminuer la durée de vie des porteurs minoritaires.

Nous constatons que les paramètres de la base donnant le meilleur rendement ($\eta=34.5\%$) sont donnés par : $N_{d1} = 1.10^{16} \text{ cm}^{-3}$ et $X_b = 0.1 \mu\text{m}$. D'autre part, il nous est possible de constater, d'après la figure (IV-24), que le meilleur facteur de forme ($FF=89.37\%$) est obtenu pour une base ayant pour dopage $N_{d2} = 1.10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Ce facteur de forme est supérieur à celui correspondant au paramètre (N_{d1}) ($FF=89.33\%$). En plus, le rendement qui lui correspond, ($\eta=34.49\%$), est très proche du meilleur.

C. Le dopage de l'émetteur

Après avoir optimisé les paramètres de la base offrant le rendement de conversion photovoltaïque optimal, on essaye d'optimiser le dopage de l'émetteur de la cellule supérieure. Nous avons fait varier le dopage de l'émetteur dans la gamme, suivante [1.10^{15} - 5.10^{18}].

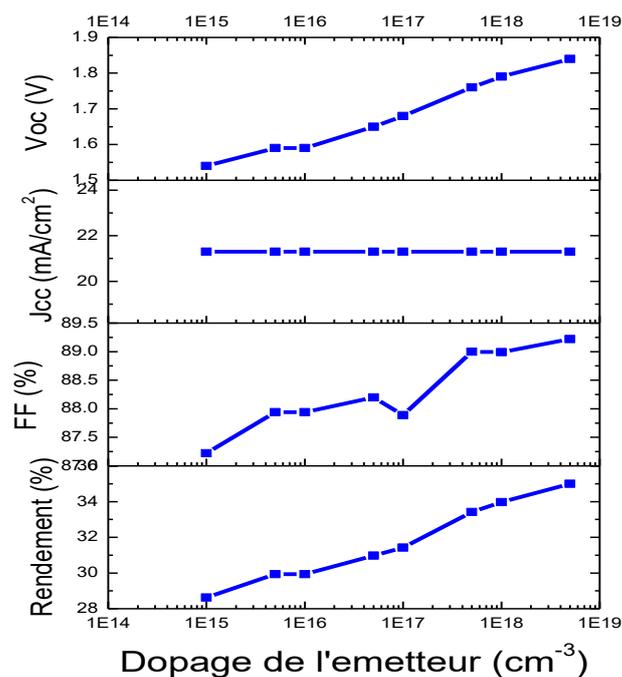


Figure (IV-25) Effet du dopage de l'émetteur de la cellule supérieure sur les performances du tandem.

La figure (IV-25) présente l'effet du dopage de l'émetteur de la cellule supérieure sur la cellule tandem ($\text{In}_{0.46}\text{Ga}_{0.54}\text{N}/\text{Si}$), on remarque que :

La tension de circuit ouvert augmente avec l'augmentation du dopage de l'émetteur de la cellule supérieure, ceci peut s'expliquer par la réduction du courant d'obscurité.

La densité de courant de court-circuit reste insensible aux variations du dopage.

Le facteur de forme augmente aléatoirement avec l'augmentation du dopage, alors que le rendement prend la même allure que la tension de circuit ouvert. De cette figure nous

constatons que le rendement prend sa valeur optimale ($\eta = 35.03$) pour un dopage de $5.10^{18} \text{ cm}^{-3}$

IV.7.1.2 Influence des paramètres de la cellule inférieure

A. L'épaisseur de l'émetteur

Dans cette partie on utilise les paramètres technologiques de la cellule tandem optimisée en faisant varier l'épaisseur de l'émetteur de la cellule inférieure entre $0.5\mu\text{m}$ et $10\mu\text{m}$. Les résultats obtenus pour la cellule tandem sont représentés sur la figure (IV-26).

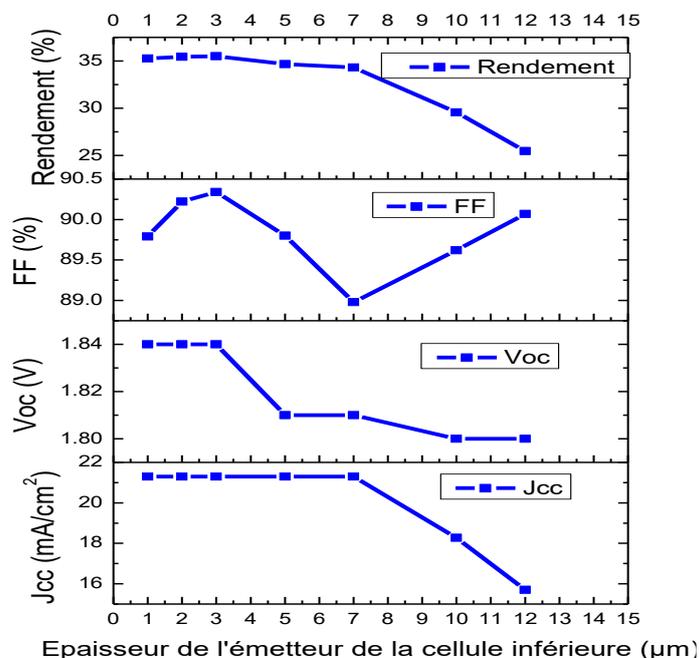


Figure (IV-26) Effet de l'épaisseur de l'émetteur de la cellule inférieure sur les performances du tandem.

La densité de courant de court-circuit est quasiment constante pour une épaisseur variant entre $1\mu\text{m}$ et $7\mu\text{m}$ puis elle diminue rapidement pour $X_e > 7\mu\text{m}$. Nous expliquons cette dégradation par l'absorption retard (loin de la surface de collecte), plus en s'éloigne de la

surface, en augmentant la profondeur de jonction, plus le courant se dégrade, beaucoup de porteurs n'ayant pas la longueur de diffusion nécessaire pour atteindre la surface avant.

La tension de circuit-ouvert reste constante puis elle diminue pour $X_e > 3\mu\text{m}$.

Nous pouvons remarquer que le rendement augmente légèrement avec l'épaisseur, il prend sa valeur optimale ($\eta = 35.5$) pour une épaisseur de $3\mu\text{m}$ puis il diminue. Ce paramètre correspond au meilleur facteur de forme de la cellule **FF = 90.34 %**.

B. Le dopage de l'émetteur

Nous avons alors étudié l'influence du dopage de l'émetteur de la cellule inférieure sur les caractéristiques du tandem ($\text{In}_{0.46}\text{Ga}_{0.54}\text{N/Si}$).

Nous avons fait varier le dopage de l'émetteur entre 10^{16} cm^{-3} et 5.10^{18} cm^{-3} .

Les résultats obtenus pour la cellule tandem sont représentés sur la figure (IV-27).

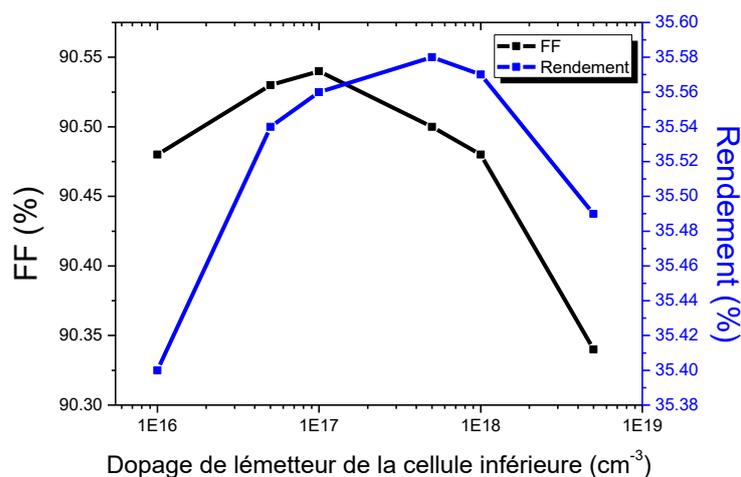


Figure (IV-27) Effet du dopage de l'émetteur de la cellule inférieure sur les performances du tandem.

On remarque que le rendement de la cellule tandem augmente avec l'augmentation du dopage de l'émetteur de la cellule inférieure puis il diminue pour $N_e > 5.10^{17}\text{ cm}^{-3}$. Ceci peut s'expliquer par le fait que l'augmentation de dopage fait diminuer la durée de vie des porteurs minoritaires.

Nous constatons que les paramètres de l'émetteur donnant le meilleur rendement ($\eta = 35.57\%$) sont donnés par : $N_e = 5.10^{17} \text{ cm}^{-3}$ et $X_e = 3 \text{ }\mu\text{m}$.

C. Le dopage de la base

Après avoir optimisé les paramètres de l'émetteur offrant le rendement de conversion photovoltaïque optimal, on essaye d'optimiser le dopage de la base de la cellule inférieure. Nous avons fait varier le dopage de la base entre $1.10^{16} \text{ cm}^{-3}$ et $5.10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

Les résultats obtenus pour la cellule tandem sont représentés sur la figure (IV-28).

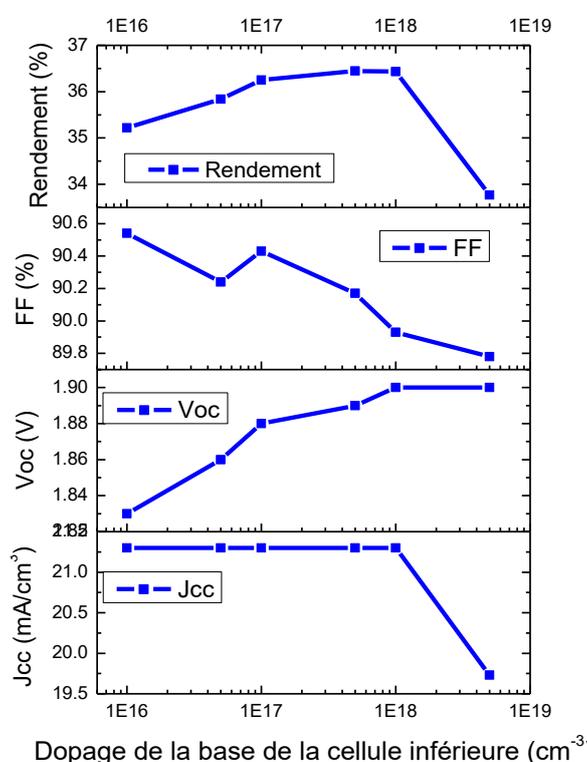


Figure (IV-28) Effet du dopage de la base de la cellule inférieure sur les performances du tandem.

La densité de courant de court-circuit reste insensible aux variations du dopage puis elle diminue rapidement pour $N_b > 1.10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Ceci est dû à la diminution de la longueur de diffusion et la mobilité des porteurs minoritaires aux forts dopages.

La tension de circuit ouvert augmente avec l'augmentation du dopage de la base de la cellule supérieure, ceci peut s'expliquer par la réduction du courant d'obscurité.

Le facteur de forme diminue avec l'augmentation du dopage, alors que le rendement augmente de $\eta = 35.22\%$ pour $N = 1.10^{16} \text{ cm}^{-3}$ à $\eta = 36.45\%$ pour $N = 5.10^{17} \text{ cm}^{-3}$.

D. L'épaisseur de la base

Dans cette étape nous avons varié l'épaisseur de la base de la cellule inférieure. Le rendement de la cellule tandem est représenté sur la figure (IV-29).

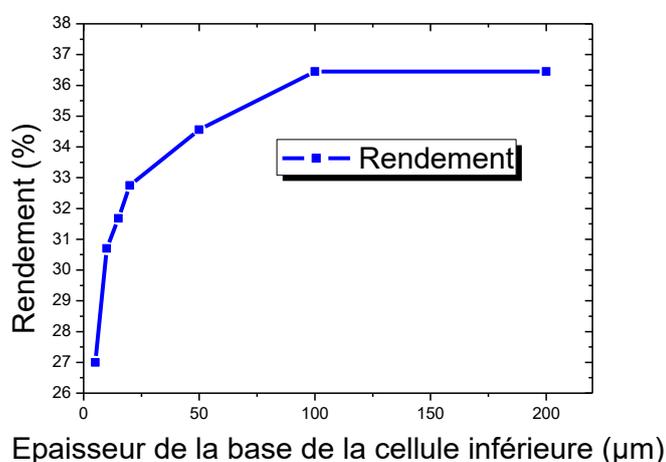


Figure (IV-29) Effet de l'épaisseur de la base de la cellule inférieure sur les performances du tandem.

Le rendement du tandem augmente avec l'augmentation de l'épaisseur de la cellule inférieure jusqu'à une épaisseur de 100 µm. Le rendement au-delà de **100 µm** devient presque constant. Ceci peut s'expliquer par le fait que cette épaisseur est suffisante pour exploiter une large gamme du spectre solaire.

IV-7-1-3. Influence de la jonction tunnel

a. Le matériau de la jonction tunnel

Enfin, dans cette dernière partie, nous comparons deux tandems ($\text{In}_{0.46}\text{Ga}_{0.54}\text{N}/\text{Si}$) avec des jonctions tunnel dont la jonction tunnel est composée de ($\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}/\text{Si}$) pour l'un des tandems et de (GaAs/GaAs) pour l'autre.

Les caractéristiques J-V simulées pour chaque conception de cellule solaire MJ sont montrée sur la figure (IV-30). Les tensions de circuit ouvert sont équivalentes pour les deux conceptions (1,89 V). Les densités de courant de court-circuit sont significativement différentes, la cellule solaire MJ avec une jonction tunnel (GaAs / GaAs) a une densité de courant de court-circuit de (20,77 mA / cm²), tandis que l'autre a une densité de courant de court-circuit de (21,3 mA / cm²). Cela a conduit à une augmentation de l'efficacité de la cellule solaire, de 35,53 % à 36,45 %.

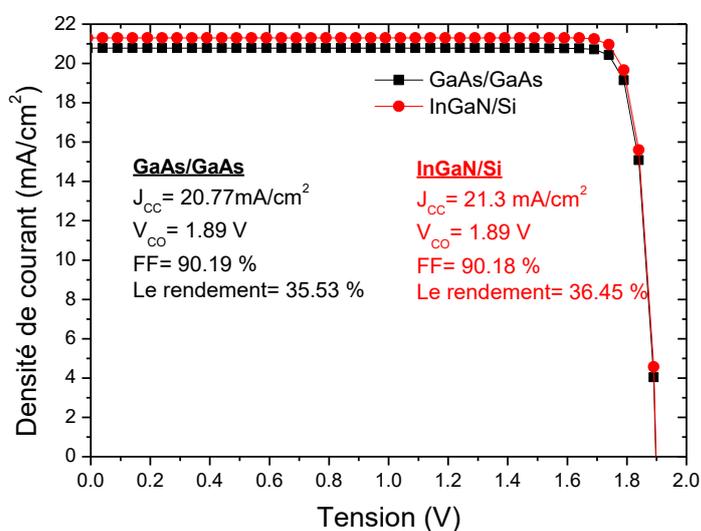


Figure (IV-30) Caractéristique J(V) de la cellule tandem (InGaN/Si) pour les deux jonctions tunnels.

b. L'épaisseur de la jonction tunnel

L'un des aspects les plus critiques de la conception est l'épaisseur de la jonction du tunnel. La figure (IV-31) montre le changement d'efficacité en fonction de l'épaisseur de la couche de jonction tunnel. L'efficacité de la conversion augmente au début puis diminue avec l'augmentation de la couche d'épaisseur du tunnel. Le rendement le plus élevé est atteint pour 0,02 microns.

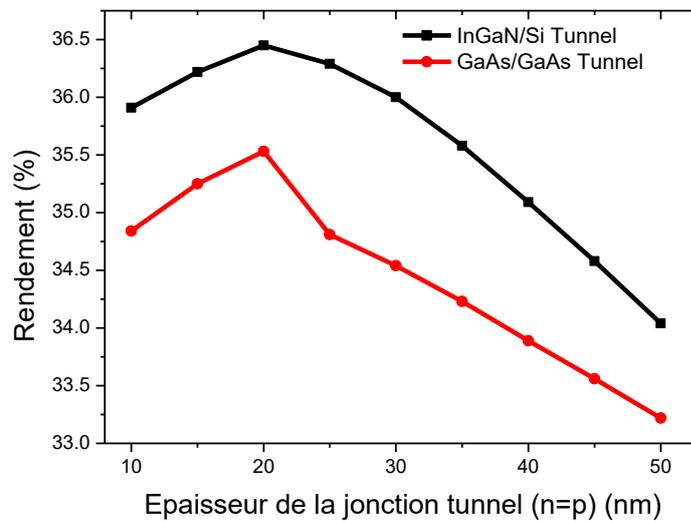


Figure (IV-31) Effet de l'épaisseur de la couche de jonction tunnel ($n = p$) sur l'efficacité de conversion du tandem.

IV- 8. Tandem monolithique ($\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{P}/\text{Si}$)

IV-8-1. Description de la structure

La structure tandem que nous avons simulée est inspirée du travail de Stephanie Essig et Scott W. sur une cellule solaire tandem à quatre bornes (GaInP / Si) empilée mécaniquement [14]. Un schéma simplifié de la cellule solaire est représenté sur la figure (IV-32). Elle est composée d'une cellule supérieure ($\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{P}$) avec une énergie de bande interdite de 1,8 eV et une cellule inférieure (Si), les deux cellules connectées en série à l'aide d'une jonction tunnel.

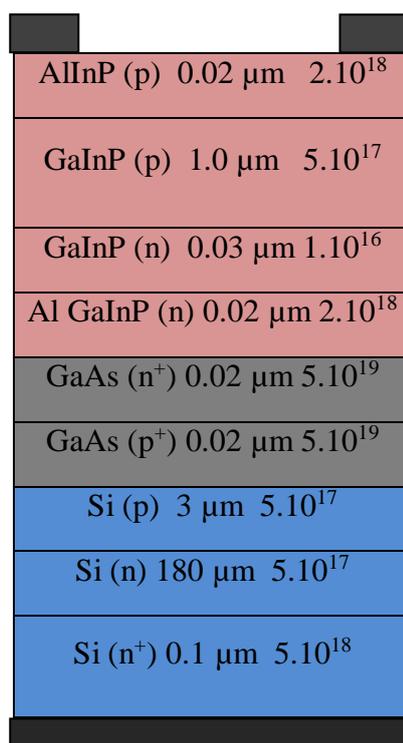


Figure (IV-32) Schéma de la cellule monolithique tandem ($\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{P}/\text{Si}$).

IV-8-2. Paramètres de simulation

Les paramètres de GaInP, le matériau utilisé dans la cellule supérieure sont définis à partir des équations suivantes :

Bande interdite [15]: $E_g(x) = -0.272x^2 + 1.19x - 1.34$ (IV-1)

Affinité électronique [16]: $\chi(x) = 4.38 - 0.58x$ (IV-2)

Permittivité [16]: $\epsilon_s(x) = 12.5 - 1.4x$ (IV-3)

Densité d'états dans la bande de conduction [16,17]: $N_c = 2 \left(\frac{\pi q k T m_e^*}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}}$ (IV-4)

Densité d'états dans la bande de valence [16,17]: $N_v = 2 \left(\frac{\pi q k T m_h^*}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}}$ (IV-5)

La mobilité des électrons en fonction du dopage est définie par l'expression [18, 19] :

$$\mu_n = \frac{4000}{\left[1 + \left(\frac{N}{1E15} \right)^{0.2} \right]} \quad (IV-6)$$

La mobilité des trous est donnée par [19] :

$$\mu_p = 40 \text{ (cm}^2\text{/Vs)} \quad (IV-7)$$

L'indice de réfraction n et du coefficient d'extinction k du matériau GaInP est représenté sur la figure (IV-33).

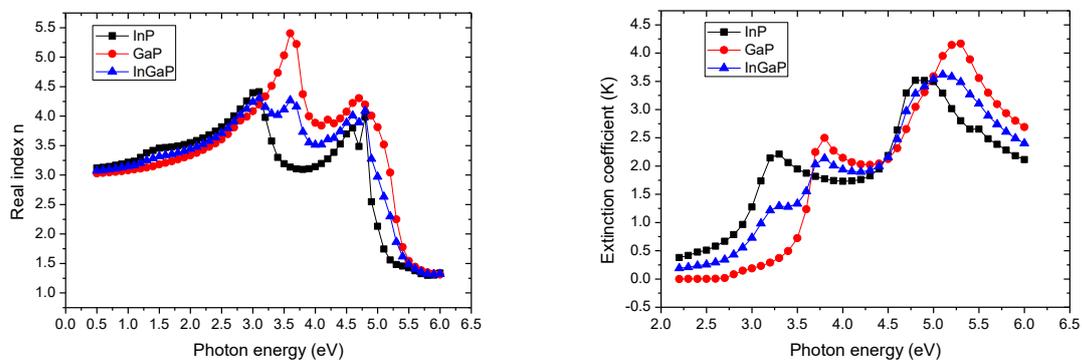


Figure (IV-33) Interpolations de n et k pour In_{0.5}Ga_{0.5}P [20].

IV-8-3. Simulation des cellules individuelles

La cellule multi-jonction, sélectionnée, est constituée de deux cellules GaInP et Si empilées. Ces deux cellules sont d'abord développées et testées individuellement. De cette façon, leur efficacité peut être optimisée et leurs caractéristiques de performance peuvent être ajustées à la plage requise.

La figure (IV-34) montre les caractéristiques J(V) de chaque cellule.

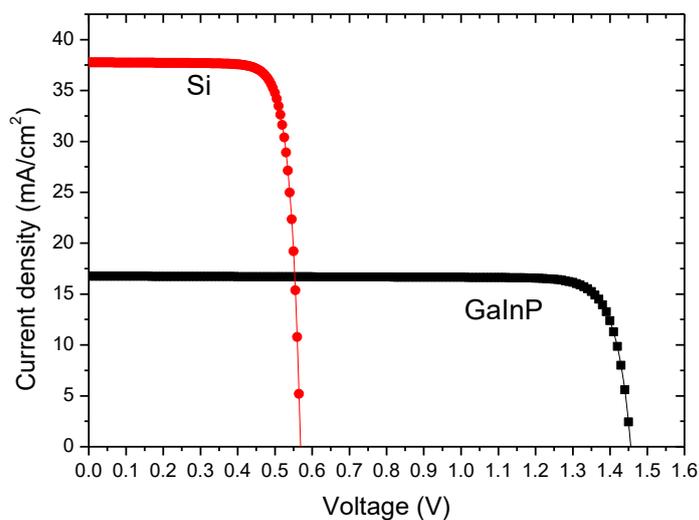


Figure (IV-34) Caractéristique J(V) des cellules individuelles.

Les caractéristiques des cellules extraites sont listées dans le tableau (IV-3).

Cell	J_{SC} (mA/cm ²)	V_{OC} (V)	FF (%)	η (%)
Cellule supérieure: GaInP	16.75	1.45	86.11	20.99
Cellule inférieure: Si	37.7	0.56	81.27	17.45

Tableau (IV-3) Paramètres des courbes J(V) présentées sur la figure (IV-34).

En raison de sa bande interdite large, la cellule supérieure GaInP génère un V_{OC} important de 1,45 V et un J_{CC} de 16,75 mA / cm², qui sont presque égaux à ceux mesurés en référence [21].

Alors que les cellules solaires de Si ont rapporté des valeurs de $V_{OC} = 0,56$ V, $J_{SC} = 37,7$ mA / cm^2 .

IV-8-4. Simulation de la jonction tunnel

Une jonction tunnel est également implémentée. C'est une couche très importante dans l'empilement vertical de plus d'une cellule, afin de construire une configuration à plusieurs jonctions. La figure (IV-35) montre sa caractéristique J-V.

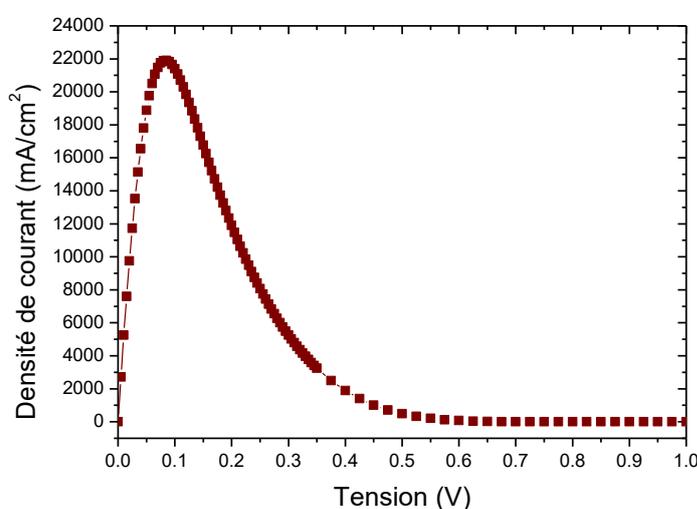


Figure (IV-35) Caractéristique J(V) de la diode tunnel (n^+GaAs/p^+GaAs) avec une densité du courant de crête de 22 A/ cm^2 .

Comme nous l'avons dit plus haut, les caractéristiques uniques d'une jonction tunnel sont utilisées pour contrer le champ parasite qui serait formé si une cellule p sur n était directement développée au-dessus d'une autre cellule p sur n. Pour cette raison, nous avons ajouté une jonction tunnel fortement dopée GaAs (n^+) / GaAs (p^+) entre la jonction GaInP et la jonction Si pour la cellule solaire tandem (GaInP / Si). Cela a été trouvé pour améliorer l'efficacité du tandem.

De la figure (IV-35), la conception a une densité du courant de crête supérieure à la densité de courant du tandem sous un rayonnement solaire AM1.5, et répond donc au premier critère de fonctionnement des cellules solaires MJ. Un critère supplémentaire est la résistance minimale. A partir de ce tracé, la jonction tunnel (n^+GaAs/p^+GaAs) montre une faible résistance ($<10^{-4} \Omega cm^2$).

IV-8-5. Simulation de la cellule empilée mécaniquement

Les cellules solaires GaInP et Si sont ensuite placées dans une configuration empilée mécaniquement.

La figure (IV-36) montre les caractéristiques J-V des jonctions simples et celle du tandem.

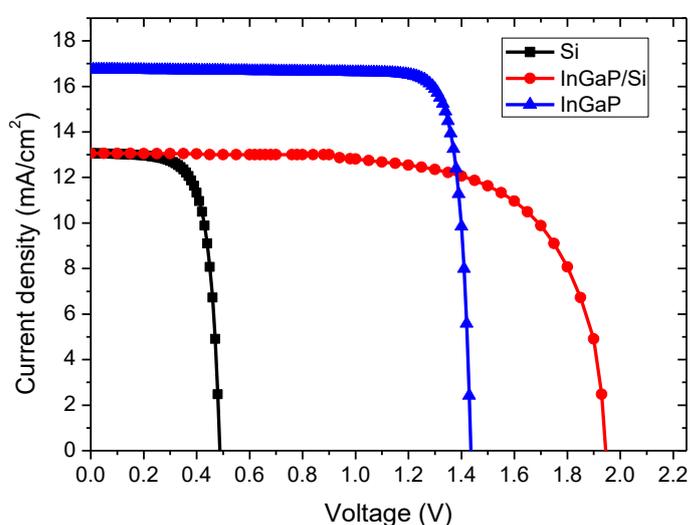


Figure (IV-36) Caractéristique J(V) des cellules InGaP, Si et tandem InGaP/Si.

Les caractéristiques des cellules extraites sont listées dans le tableau (IV-4).

Cellule	J_{SC} (mA/cm ²)	V_{OC} (V)	FF (%)	η (%)
Cellule GaInP	16.75	1.45	86.11	20.99
Cellule Si	13.06	0.48	71.24	3.28
Tandem GaInP/Si	13.06	1.93	96.9	24.27

Tableau (IV-4) Paramètres des courbes J(V) présentées sur la figure (IV-36).

Comme prévu, la cellule supérieure ($\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{P}$) est totalement non affectée. Au contraire, la cellule inférieure (Si) produit moins de courant, en raison du fait que les photons de plus haute énergie ont été absorbés par la cellule supérieure.

Une simulation de la réponse spectrale des deux cellules empilées mécaniquement a été réalisée.

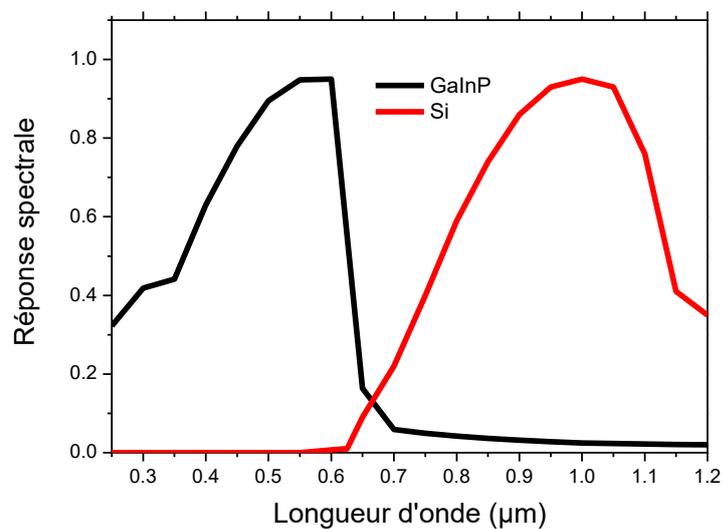


Figure (IV-37) Réponse spectrale des deux cellules empilées mécaniquement.

La figure (IV-37) indique que la cellule supérieure (InGaP) a une efficacité de collecte plus élevée pour les porteurs générés par des longueurs d'onde plus courtes qui ont une énergie photonique plus élevée; cependant, la cellule inférieure (Si) a une efficacité de collecte plus élevée pour les porteurs générés par des longueurs d'onde plus longues. Ainsi, les efficacités de collecte des jonctions sont complémentaires et le tandem a une efficacité de collecte plus élevée que les jonctions simples.

IV-9. Simulation de la cellule tandem monolithique (In_{0.5}Ga_{0.5}P/Si)

Le placement de la jonction tunnel entre GaInP et la cellule Si est suffisant pour changer la structure précédente en un tandem monolithique.

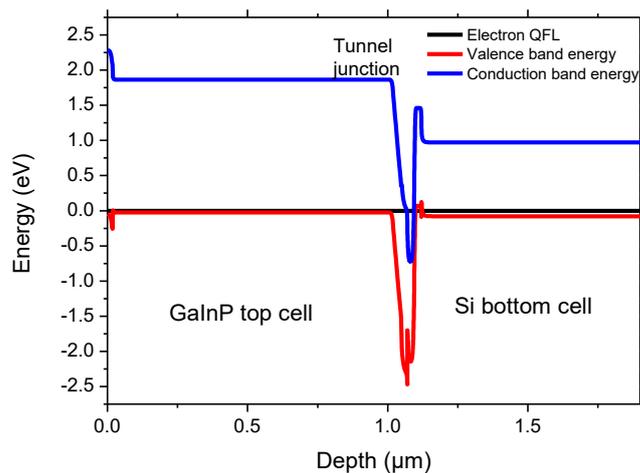


Figure (IV-38) Diagramme de bande d'énergie de la structure à l'équilibre.

Les niveaux d'électrons et de trous de Fermi sont égaux et constants dans l'ensemble du dispositif, en accord avec la prédiction théorique qu'aucun courant ne circule et qu'aucune polarisation n'est appliquée.

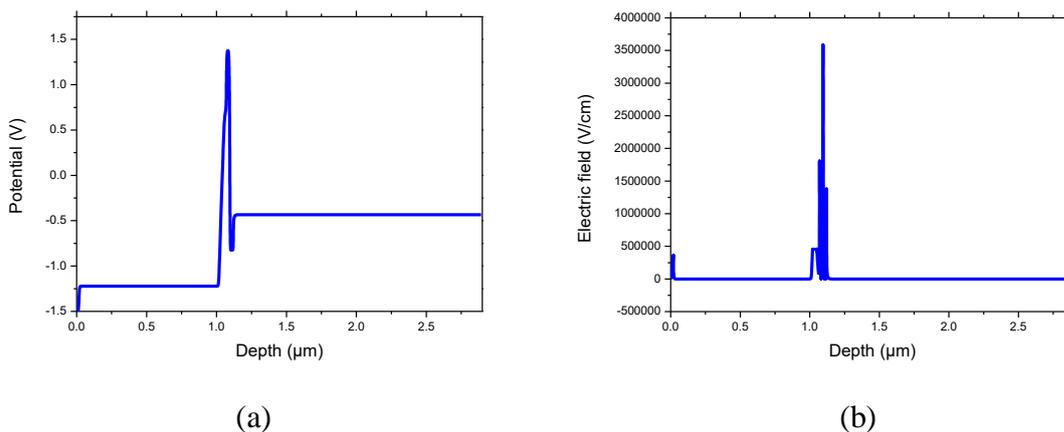


Figure (IV-39) Potentiel-Champ électrique à travers la structure.

Pour analyser la distribution potentielle à l'équilibre thermodynamique, nous avons divisé la courbe de potentiel en trois régions, comme le montre la figure (IV-39-a). La région 1 comprend la cellule solaire InGaP; le potentiel est presque constant là-bas. La région 2 comprend la jonction du tunnel; comme prévu, il augmente en largeur. Enfin, la région 3, qui présente une faible chute de potentiel, est la région neutre à l'intérieur de la cellule solaire Si.

La variation du champ électrique calculée à l'équilibre thermodynamique est représentée sur la figure (IV-39-b). Il y a une forte valeur du champ électrique près de la jonction du tunnel, qui chute rapidement à mesure que nous entrons dans la cellule solaire InGaP. Le reste de l'InGaP n'a pratiquement aucun champ électrique, indiquant une région neutre. Du côté Si, le champ chute rapidement, comme prévu. Le maximum du champ électrique indique la position de la jonction tunnel.

Les caractéristiques J-V simulées pour la conception de cellules solaires (GaInP /Si) en tandem sont montrées sur la figure (IV-40).

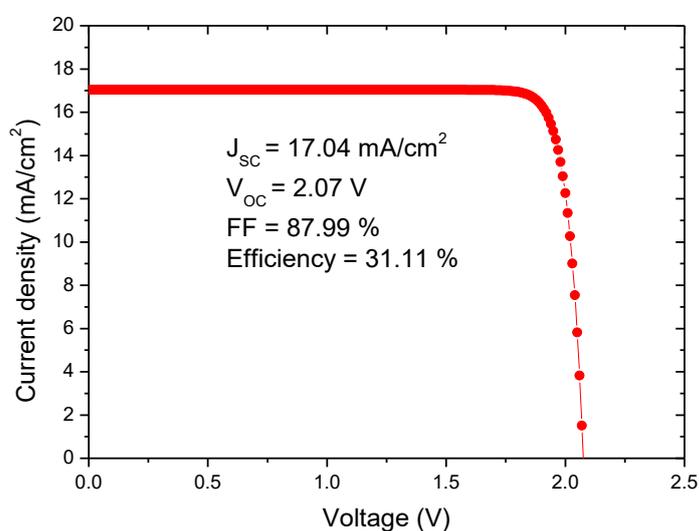


Figure (IV-40) Caractéristique courant-tension de la cellule tandem (In_{0.5}Ga_{0.5}P/Si).

Nos calculs prédisent, pour GaInP à simple jonction, une efficacité de 20,99%. Ce résultat est très similaire à celui obtenu par J. F. Geisz. [21]. ils ont démontré des cellules solaires GaInP de 1,8 eV avec une efficacité de conversion solaire de 20,8%.

Cependant, pour les cellules solaires (GaInP / Si) tandem, nous avons obtenu un rendement de conversion de 31,11%, au lieu de 27,1% dans la référence [14] pour une cellule solaire tandem (GaInP / Si) empilée mécaniquement.

IV- 10. Etude de l'effet de la température sur la cellule solaire

La température est un paramètre majeur dans la détermination des performances des cellules solaires. Une grande partie de l'énergie incidente (85%), à la surface de la cellule, est dissipée sous forme de chaleur [23]. En général, la chaleur est évacuée par convection naturelle de l'air ambiant à la surface des modules. Les propriétés de la cellule solaire sont très sensibles à la variation de la température. Nous voulons ici, examiner l'effet de la température sur les performances des cellules photovoltaïques à multi-jonctions (tandem) : (InGaN/Si) et (GaInP/Si).

IV- 10- 1. Effet de la température sur les propriétés des matériaux

Le gap du matériau semi-conducteur est l'un des paramètres dominants dans la détermination des caractéristiques de la cellule solaire. Il est très sensible à la variation de la température et son expression est donnée par l'équation de Varshni [24].

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{T + \beta} \quad (\text{IV-8})$$

Avec $E_g(0)$ le gap d'énergie du matériau à 0 K [eV]

α une constante empirique [eV.K⁻¹]

β une constante associée à la température de Debye [K]

Matériau	$E_{g,0}$ (eV)	$\alpha \cdot 10^{-4}$ (eV/K ²)	β (K)
Si	1.17	4.73	636
GaAs	1.52	5.405	204
Ga _{0.5} In _{0.5} P	1.96	5.4	204
GaN	3.5	0.77	600
InN	0.75	0.41	454

Tableau (IV-5) Paramètres de Varshni et gap d'énergie à 0 K des matériaux utilisés [25].

IV- 10- 2. Effet de la température sur la cellule solaire tandem optimisée (InGaN/Si)

Nous étudions, dans cette partie, l'effet de la température sur la cellule tandem (InGaN/Si). Nous utilisons les mêmes paramètres technologiques de la cellule solaire optimisée de la section précédente.

On fait varier la température de la cellule entre 300 K et 370 K, les résultats sont présentés sur les figures (IV- 41) et (IV-42).

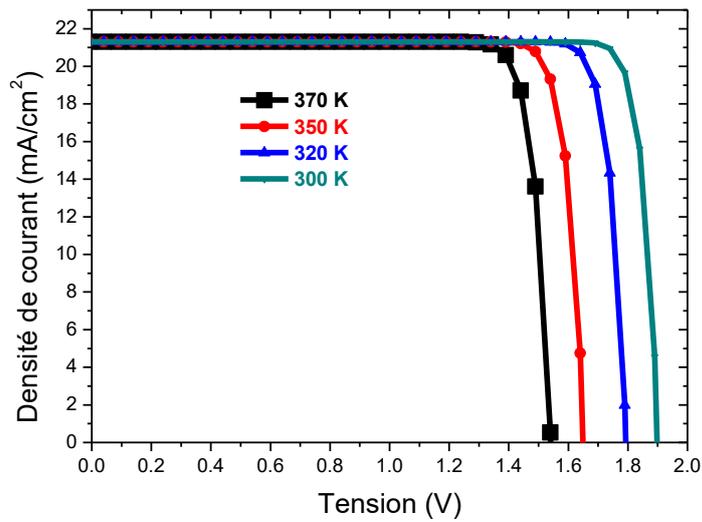


Figure (IV- 41) Effet de la température sur la caractéristique J(V) de la cellule tandem (InGaN/Si).

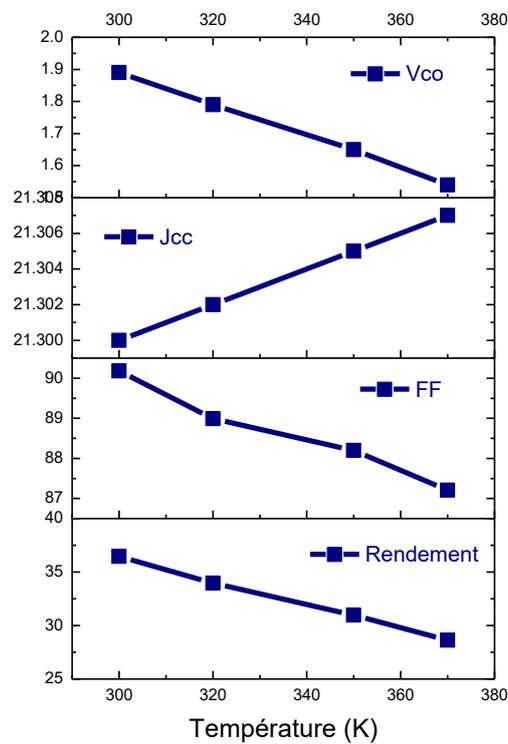


Figure (IV- 41) Effet de la température sur les paramètres de la cellule tandem (InGaN/Si).

Sur les courbes caractéristiques $J(V)$ de la cellule et la courbe (IV- 41), on remarque une légère augmentation dans le photo-courant. Cela est dû, d'une part, à la diminution de la bande interdite E_g du semi-conducteur et, d'une autre part à l'augmentation de conductivité du matériau à cause de la variation de la mobilité des paires électron-trou.

En revanche, le courant d'obscurité I_d augmente très rapidement avec l'augmentation de la température, ce qui se traduit par une diminution de la tension en circuit ouvert, du facteur de forme et du rendement de conversion de la cellule.

On note que la diminution de la tension en circuit ouvert est considérée comme importante en comparaison avec la diminution du courant de court-circuit. Elle se dégrade linéairement avec l'augmentation de la température, cela est prouvé par le modèle de Green [26].

$$\frac{\delta V_{CO}}{\delta T} = -\frac{\frac{E_{g0}}{q} - V_{CO} + \frac{KT}{q} \left(\gamma \frac{f \delta \zeta}{\zeta \delta f} \right)}{T} \quad (IV-9)$$

$$\zeta = np \exp\left(\frac{-E_g}{KT}\right) / n_{ie}^2 \quad (IV-10)$$

Où f : est une fonction générale utilisée dans le document de Green.

IV- 10- 3. Effet de la température sur la cellule solaire tandem optimisée (GaInP/Si)

Après l'étude de l'effet de la température sur le premier tandem, nous passons au deuxième tandem : GaInP/Si.

On fait varier la température de la cellule entre 300 K et 370 K, les résultats sont présentés sur les figures (IV- 42) et (IV-43).

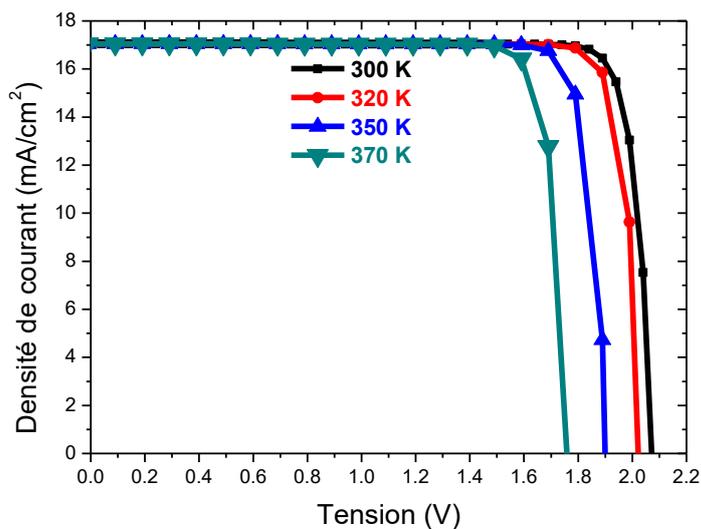


Figure (IV- 42) Effet de la température sur la caractéristique J(V) de la cellule tandem (GaInP/Si).

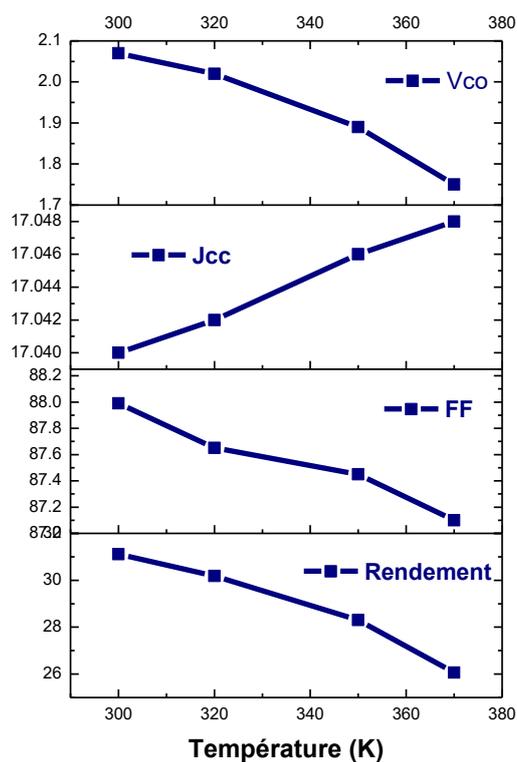


Figure (IV- 43) Effet de la température sur les paramètres de la cellule tandem (GaInP/Si).

D'après les deux courbes, on remarque une légère augmentation du photo-courant de la cellule tandem.

La tension en circuit ouvert se dégrade avec l'augmentation de la température, cette dégradation vient de l'augmentation du courant d'obscurité de la cellule.

Le facteur de forme FF est une fonction de la tension en circuit ouvert, il décroît avec l'augmentation de la température. La diminution du V_{co} contribue, dans la plupart des cas, à la diminution du rendement de conversion de la cellule.

IV- 11. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons optimisé les performances des deux cellules solaires tandems (GaInP/Si) et (InGaN/Si), en utilisant le simulateur Atlas de Silvaco.

Nous avons étudié l'influence des paramètres technologiques de la cellule tandem (InGaN/Si) (dopage et épaisseur des différentes couches des cellules supérieure et inférieure), ainsi que l'influence de la jonction tunnel. Cette étude a montré l'influence de ces paramètres sur le rendement de la cellule et nous a éclairés sur l'ordre de grandeur à choisir pour ces régions.

Nous avons obtenu un rendement de conversion de 36,45%

Dans la deuxième structure (GaInP/Si) on gardant les mêmes paramètres que la référence [14] on ajoutant une jonction tunnel (GaAs/GaAs) à la structure.

Nous avons obtenu un rendement de conversion de 31,11%, au lieu de 27,1% dans la référence [14] pour une cellule solaire tandem (GaInP / Si) empilée mécaniquement.

Nous avons également étudié l'influence de la température sur les deux cellules tandems.

IV- 12. Références bibliographiques

- [1] J. Wu, W. Walukiewicz, « Band gaps of InN and group III nitride alloys, Superlattice ». *Microst.* 34 (2003) 63–75.
- [2] Xiaobin Zhang¹, Xiaoliang Wang, Hongling Xiao, Cuibai Yang, Junxue Ran, Cuimei Wang, Qifeng Hou and Jinmin Li « Simulation of In_{0.56} Ga_{0.35} N single- junction solar cell » *J. Phys. D: Appl. Phys.* 40 (2007) 7335–7338
- [3] M.E. Levinshtein, S.L. Rumyantsev, M.S. Shur, in: « Properties of Advanced Semiconductor Materials: GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe », John Wiley & Sons, New York, 2001
- [4] T. Inushima, M. Higashiwaki, T. Matsui, « Optical properties of Si-doped InN grown on sapphire (0001) », *Phys. Rev. B* 68 (2003) 235204-1–7.
- [5] Levinshtein, M. E., Rumyantsev, S. L. and Shur, M. S., « Properties of Advanced Semiconductor Materials », Wiley, Chichester, UK, 1–90 (2001).
- [6] T.T. Mnatsakanov, M.E. Levinshtein, L.I. Pmortseva, S.N. Yurkov, G.S. Simin, M.A. Khan, « Carrier mobility model for GaN, Solid-State Electron ». 47 (2003) 111–115.
- [7] L. Hsu, R.E. Jones, S.X. Li, K.M. Yu, W. Walukiewicz, « Electron mobility in InN and III-N alloys », *J. Appl. Phys.* 102 (2007) 073705-1–6.
- [8] Sadao Adachi « The handbook on optical constants of semiconductors in tables and figures », world scientific, 2012
- [9] Yangdong Zheng, Akihiro Mihara, Akio Yamamoto, « Analysis of In_xGa_{1-x}N/Si p-n heterojunction solar cells and the effects of spontaneous and piezoelectric polarization charges » *I.App. Phys.* 103,153509(2013)
- [10] L. Hsu and W. Walukiewicz, *J. Appl. Phys.* 104, 024507 (2008).
- [11] Z.Abada. Etude des cellules photovoltaïques à base de GaInP et GaAs à haut rendement. Mémoire de magister en électronique. Université de Constantine (2000).
- [12] Mohamed Bouaouina. Contribution à l'étude et à l'optimisation des performances des cellules solaires à base de GaAs et de Si. Mémoire de magister en physique énergétique. Université de Constantine (2001).
- [13] Lamia Semra. Contribution à l'étude des tandems AlGaAs/Si Mémoire de magister d'électronique. Université de Constantine(1998).
- [14] Stephanie Essig, Scott Ward, Myles A. Steiner. Progress towards a 30% efficient GaInP/Si tandem solar cell. *Energy Procedia* 77 (2015) 464 – 469

- [15] A. Haas, J. Wilcox, J. Gray, and R. Schwartz. Design of A GaInP/GaAs tandem solar cell for maximum daily, monthly, and yearly energy output. *Journal of Photonics for Energy* Vol. 1, 2011.
- [16] Y. A. Goldberg, “Handbook Series on Semiconductor Parameters”, Vol. 2, World Scientific, London (1999).
- [17] S. M. Sze, “ Physics of Semiconductors Devices”, 2nd Edition, John Wiley & Sons, 2001.
- [18] J. M. Olson, D. J. Friedman and S. Kurtz, “ High Efficiency III-V Multi-junction Solar Cells ”, *Handbook of Photovoltaic Science and Engineering*. John Wiley & Sons, 2003.
- [19] Brozel MR, Stillman GE, “ Properties fo Gallium Arsenides ”, 3rd edition, Institution of Electrical Engineers, 1996.
- [20] Sadao Adachi « The handbook on optical constants of semiconductors in tables and figures », world scientific, 2012.
- [21] J. F. Geisz, M. A. Steiner, I. Garcia, S. R. Kurtz, D. J. Friedman, “Enhanced external radiative efficiency for 20.8% efficient single-junction GaInP solar cells”, *Applied Physics Letters* 103, pp. 041118-1-5 (2013).
- [23] Harold J. Hovel, “Semiconductors and semimetals”, Vol. 11, solar cells, Academic Press New York San Francisco London, 1975.
- [24] C.D. Thurmond, “The standard thermodynamic functions for the formation of electrons and holes in Ge, Si, GaAs and GaP ”, *J. Electrochem. Soc.* Vol. 122(8), pp. 1133-1141, 1975.
- [25] A. Mc. Evoy, T. Markvart and L. Castaner, “Practical Handbook of Photovoltaics Fundamentals and Applications, Second Edition ”, Elsevier Ltd, 2012, ISBN: 978-0-123859334-1.

Conclusion Générale

Conclusion générale

Le coût élevé de la production industrielle photovoltaïque reste un problème majeur. Afin de réduire le coût de production, il est essentiel de trouver un équilibre entre une technologie efficace et un prix raisonnable, tout en contrôlant l'impact environnemental du procédé de fabrication. Parmi les différentes cellules solaires destinées à améliorer l'efficacité, sont les cellules à multi-jonction III-V. Ces cellules ont des hauts rendements, mais leur coût trop élevé les rend incompatibles avec des applications terrestres. L'intégration monolithique de III-V sur Si permettrait de réduire sensiblement le coût de fabrication des cellules III-V en diminuant le coût du substrat, et constituerait un pas vers la démocratisation des applications solaires à fort rendement.

Dans ce travail, nous avons étudié, deux tandems monolithiques : ($\text{In}_{0.46}\text{Ga}_{0.54}\text{N}/\text{Si}$) et ($\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{P}/\text{Si}$), en vue d'essayer d'optimiser leurs performances. Pour cela nous avons considéré en premier lieu, chaque cellule, séparément, en retrouvant ses paramètres optimaux. Ensuite, nous avons assemblé les deux cellules, par une jonction tunnel, et essayé d'étudier les caractéristiques de sortie de chaque tandem. Pour cela, nous avons utilisé le simulateur bidimensionnel Atlas de Silvaco.

Le tandem ($\text{In}_{0.46}\text{Ga}_{0.54}\text{N}/\text{Si}$) :

Après la définition d'un modèle de cellule photovoltaïque de base, nous avons fait varier les différents paramètres afin d'optimiser la structure. Les paramètres étudiés sont l'épaisseur et le dopage de la base et l'émetteur de la cellule supérieure, l'épaisseur et le dopage de la base de la cellule inférieure, ainsi que l'épaisseur de la jonction tunnel.

Donc, nous avons pu déterminer les paramètres critiques de la première structure et optimiser ses différents paramètres technologiques. Ainsi nous avons obtenu les meilleures performances suivantes :

$$J_{cc} = 21.3 \text{ mA/cm}^2, V_{CO} = 1.89 \text{ V}, FF = 90.18 \%, \text{ et } \eta = 36.45 \%$$

Le tandem (Ga_{0,5}In_{0,5}P/Si) :

La deuxième structure tandem que nous avons simulée est inspirée du travail de Stephanie Essig et Scott W. sur une cellule solaire tandem à quatre bornes (GaInP / Si) empilée mécaniquement. On gardant les mêmes paramètres que l'article de Stephanie, on ajoutant une jonction tunnel (GaAs/GaAs) à la structure.

Pour cette structure, nous avons obtenu les résultats suivants :

$$J_{cc} = 17.04 \text{ mA/cm}^2, V_{CO} = 2.07 \text{ V}, FF = 87.99 \%, \text{ et } \eta = 31.11 \%$$

Nous avons également étudié l'influence de la température sur les deux cellules tandems. Nous avons montré que l'augmentation de la température provoque une dégradation de la tension en circuit ouvert, du facteur de forme et du rendement de conversion de la cellule. La diminution de la tension en circuit ouvert est considérée comme importante en comparaison avec l'augmentation du courant de court-circuit. La tension se dégrade linéairement avec l'augmentation de la température.

Ce travail ouvre la voie à de nouvelles perspectives dans le domaine des cellules solaires tandem à base des semi-conducteurs (III-V/Si). De telles structures simplifieront ainsi les procédés de fabrication des cellules, diminueront ainsi les coûts tout en produisant de hauts rendements de conversion photovoltaïque.

ملخص

نظراً لأن الخلايا الشمسية عالية الكفاءة تعتمد في الغالب على تكنولوجيا أشباه الموصلات III-V ، فإن الهدف هو تحسين أداء الخلايا الشمسية باستخدام مواد ومفاهيم جديدة. الهدف الرئيسي من هذا البحث هو تقليل تكلفة التصنيع وزيادة كفاءة هذه الخلايا الشمسية. يؤدي استخدام خلايا الوصلات المتعددة (Tandem) ، التي تعتمد على مفهوم التحويل متعدد الأطياف ، إلى استغلال أفضل للطيف الشمسي ، من خلال توسيع النطاق المفيد للطيف. توجد الخلايا الضوئية من النوع III-V / Ge مثل (GaInP / GaAs / Ge) ، ولكن تكلفتها العالية تجعلها غير متوافقة مع التطبيقات "الارضية". إن الدمج الأحادي لانصاف النواقل III-V على السيليسيوم سيخفّض إلى حد كبير تكلفة التصنيع للخلايا III-V من خلال خفض تكلفة الركيزة ، وسيكون بمثابة خطوة نحو تعميم تطبيقات الطاقة الشمسية بكفاءة عالية. في هذا السياق ، قمنا بدراسة تشغيل الخلايا الفولتضوئية الترادفية على أساس أشباه موصلات III-V / Si بواسطة محاكاة رقمية ثنائية الأبعاد تحت إضاءة مع طيف AM1.5 تم تنفيذه تحت سيلفاكو نحدد خلية مرجعية مع مجموعة من المعلمات المادية ، من أجل تحليل تأثيراتها على كفاءة التحويل.

الكلمات المفتاحية: أشباه الموصلات III-V ، الخلايا الشمسية ، الترادفية ، المحاكاة الرقمية ، أطلس / سلفاكو

Résumé

Les cellules solaires à haut rendement étant souvent basées sur la technologie des semi-conducteurs III-V, on vise dans ce travail à améliorer les performances des cellules solaires en utilisant de nouveaux matériaux et de nouveaux concepts. L'objectif principal de ces recherches est de minimiser le cout de fabrication et d'augmenter le rendement de ces photopiles. L'utilisation des cellules multi-jonctions (Tandem), qui repose sur le concept de conversion multi-spectrale, conduit à une meilleure exploitation du spectre solaire, en élargissant la gamme utile du spectre.

Des cellules photovoltaïques de type III-V/Ge comme (GaInP/GaAs/Ge) existent, mais leur cout trop élevé les rend incompatibles avec des applications « grand public ». L'intégration monolithique de III-V sur Si permettrait de réduire sensiblement le cout de fabrication des cellules III-V en diminuant le cout du substrat, et constituerait un pas vers la démocratisation des applications solaires à fort rendement.

Dans ce contexte, nous avons étudié le fonctionnement des cellules photovoltaïques Tandem à base des semi-conducteurs III-V/Si par la simulation numérique à deux dimensions sous éclairage avec un spectre AM1.5 effectuées sous Silvaco/Atlas. Nous définissons une cellule de référence avec un ensemble de paramètres physiques, afin d'analyser leurs influences sur le rendement de conversion.

Mots clés : Semi-conducteur III-V, cellule solaire, Tandem, simulation numérique, Atlas /Silvaco

Abstract

Because high-efficiency solar cells are often based on III-V semiconductor technology, the goal is to improve the performance of solar cells by using new materials and concepts. The main objective of this research is to minimize the manufacturing cost and increase the efficiency of these solar cells. The use of multi-junction cells (Tandem), which is based on the concept of multi-spectral conversion, leads to a better exploitation of the solar spectrum, by widening the useful range of the spectrum.

Type III-V / Ge photovoltaic cells such as (GaInP / GaAs / Ge) exist, but their high cost makes them incompatible with "general public" applications. The monolithic integration of III-V on Si would significantly reduce the manufacturing cost of III-V cells by reducing the cost of the substrate, and would be a step towards the democratization of high-efficiency solar applications.

In this context, we studied the operation of Tandem photovoltaic cells based on III-V / Si semiconductors by two-dimensional digital simulation under illumination with an AM1.5 spectrum performed under Silvaco / Atlas. We define a reference cell with a set of physical parameters, in order to analyze their influences on conversion efficiency.

Keywords: III-V Semi-conductors, solar cell, Tandem, numerical simulation, Atlas/Silvaco