I.1 Introduction :

Le succès industriel des dispositifs à semi-conducteurs est en grande partie dû aux technologies de pointe qui ont été développées pour leur préparation. Les semi-conducteurs ont pris une importance considérable dans notre société. Ils sont à la base de tous les composants électroniques et optoélectroniques utilisés dans les systèmes informatiques, la télécommunication, la télévision, les voitures et les appareils électroménagers, etc.

Dans tous les matériaux semi-conducteurs, les composés III-V sont d'une classe bien définie avec des propriétés qui sont des sources d'intérêt en termes de connaissances et d'applications fondamentale. En effet, le GaAs est à gap direct ayant une largeur proche de la valeur idéale de 1.5 eV qui en résulte dans une efficacité maximale de conversion photovoltaïque assurée par une cellule solaire même à unique jonction. Des rendements de conversion autour de 25.7 % ont été atteints par de telle cellule au spectre $AM_{1.5}$

Ce chapitre couvre des notions sur les matériaux semi-conducteurs en général, les composés binaires (III-V) et ternaires, et l'hétérojonction AlGaAs/GaAs.

I.2 Notion générale sur les matériaux semi-conducteurs :

I.2.1 Classification des matériaux :

Une manière commune de classer un matériel est par ses propriétés électriques. Selon le niveau de la résistivité d'un élément, elle peut être classée par catégorie comme isolateur, conducteur, ou semi-conducteur. La capacité de résister ou de conduire l'électricité d'un matériel dépend de beaucoup de facteurs; la structure de réseau, les électrons libres, l'énergie de bande interdite, et la température. Quelques matériaux ont des propriétés électriques très discrètes qui les définissent en tant qu'un isolateur ou conducteur. Cependant, d'autres matériaux tels que le silicium et l'arséniure de gallium peuvent agir en tant qu'isolateur ou conducteur et sont donc considérés des semi-conducteurs. La figure I-1 montre la gamme typique des conductivités pour des isolateurs, des conducteurs, et des semi-conducteurs.

Des semi-conducteurs peuvent être trouvés sous la forme élémentaire ou composée. Le silicium et le germanium sont des exemples des semi-conducteurs élémentaires, qui appartiennent au groupe IV dans le tableau périodique. La figure I-2 montre une table périodique partielle. En plus des semi-conducteurs du groupe IV, des composés peuvent être faits avec des éléments à partir des groupes III et V. Les exemples des semi-conducteurs III-V incluent le phosphure en aluminium (AIP), nitrure de gallium (GaN), phosphure d'indium (InP), arséniure de gallium (GaAs). Notamment, Il est possible de faire des composés de semi-conducteur à partir des groupes II-VI, tel que l'oxyde de zinc (ZnO), tellurure de cadmium (CdTe), sulfure de Mercurey (HgS).



Figure I-1 : Résistivité pour différents types de matériaux [6].

	3A	13	4A	14	5A	15	6A	16
	5	В	6	C	7	N	8	0
	10.811 Boron		12.0107 Carbon		14.0067 Nitrogen		15.9994 Oxygen	
	13	AI	14	Si	15	Ρ	16	S
2B 12	26.9 Alum	1815 inum	28.0 Sili	9855 con	30.9 Phos	9738 shorus	32. Su	065 Ifur
³⁰ Zn	31	Ga	32	Ge	33	As	34	Se
65.409 Zinc	69.3 Gall	723 ium	72. Germa	.64 anium	74.9 Ars	a216 enic	78 Sele	.96 mium
48 Cd	49	In	50	Sn	51	Sb	52	Те
112.411 Cadmium	114. Indi	.818 ium	118. Ti	710 in	121 Antii	.760 mony	12 Telli	7.60 urium
⁸⁰ Hg	81	TI	82	Pb	83	Bi	84	Po
200.59 Mercury	204. That	.383 lium	20 Le	7.2 ad	208. Bisr	9804 nuth	[2 Polo	09) nium

Figure I-2 : Table périodique partiel [3].

Le sujet de ce mémoire est l'alliage aluminium arséniure de gallium (AlGaAs). L'aluminium et le gallium sont des éléments du groupe III, alors que l'arséniure est un élément du groupe V

I.2.2 Bandes d'énergie :

Les semi-conducteurs et les métaux possèdent une structure cristalline particulière, c'està-dire que les atomes sont groupés en réseaux régulièrement disposés dans l'espace. Dans ces réseaux, la distance inter atomique étant faible, de l'ordre de quelques Å, les atomes ne peuvent plus être considérés comme isolés, et il en résulte des interactions de nature électrostatique entre les divers atomes. Les états d'énergie électroniques sont distribués selon une loi de dispersion appelée structure de bandes, représentée par une succession de bandes permises pouvant être séparées par des bandes interdites. Toutes les directions de propagation des électrons, c'est à dire tous les points du réseau réciproque, doivent être examinées afin d'établir l'existence d'une bande interdite (le terme anglais "gap") [7].

Dans le diagramme de bande de la figure I-3, la distance inter atomique est représentée graphiquement à l'encontre de l'énergie d'électrons. Le diagramme de bande montre que lorsque les atomes du même élément sont infiniment éloignés les uns des autres, ils ont les mêmes niveaux d'énergie. Toutefois, lorsque les atomes sont rapprochés, les électrons de chaque atome s'interagissent, et les niveaux d'énergie discrets divergent dans une bande d'énergie autorisée représentée par la partie grise du graphique de la figure I-3.



Figure I-3 : Distance inter atomique représentée graphiquement contre l'énergie, pour montrer la formation des bandes d'énergie dans un matériau [1].

Dans un solide à 0 K°, toutes les bandes d'énergie les plus basses sont remplies, sauf la dernière qui peut être partiellement remplie ou complètement remplie. Lorsque cette bande est

partiellement remplie, on a affaire à un conducteur car si on applique un champ électrique, les électrons qui ont l'énergie la plus élevée peuvent acquérir une énergie supplémentaire en occupant des niveaux d'énergie très voisins disponibles. Lorsque cette bande est remplie, on a affaire à un isolant à 0 K° car l'application d'un champ électrique ne peut fournir assez d'énergie pour lui faire franchir la bande interdite afin d'atteindre les premiers niveaux disponibles : les électrons ne peuvent acquérir un mouvement collectif correspondant au passage du courant [8].

On distingue isolants et conducteurs par la différence d'énergie qu'existe entre ces bandes, comme illustré à la figure I-4.



Figure I-4 : Bandes d'énergie dans différents types de matériaux [9].

I.2.3 Porteurs de charge :

Pour l'application des semi-conducteurs dans les cellules solaires, l'aspect le plus important d'un matériau est la caractéristique courant-tension. Le courant est le mouvement de la charge à travers un matériau, les charges dans un semi-conducteur qui peuvent se déplacer à l'intérieur du matériau par suite de la force appliquée sont appelées les porteurs. Les porteurs doivent circuler vers les bandes de conduction et à partir des bandes de valence dans le but de créer un courant dans le semi-conducteur [10].

Il existe deux types de conduction: la conduction par électrons et la conduction par trous. Dans un cristal semi-conducteur intrinsèque, certaines liaisons entre les atomes se cassent. L'électron est alors libre de se déplacer dans le cristal. Sur l'emplacement de la liaison rompue on dit qu'il y a un trou. Pour chaque liaison rompue, il y a formation d'une paire électron- trou. Sous l'effet du champ électrique les électrons (charge -e) se déplacent dans le sens inverse du champ, les trous (charge +e) se déplacent dans le sens du champ [8]. La figure I-5 décrit très simplement ce phénomène.



Figure I-5 : Représentation symbolique du mécanisme de conduction dans les bandes de valence et de conduction. Les densités de courant résultantes sont dans le même sens [11].

Quand le réseau est formé entre les différents atomes, il y a une probabilité finie qui à n'importe quelle température au-dessus de zéro Kelvin (0 K°), un électron de la bande de valence sera frappé librement et une défectuosité électronique connue sous le nom de trou sera laissée. Le trou laissé maintient une charge positive égale à la valeur absolue de la charge d'électron [6]. Un nouveau électron de valence peut venir occuper ce trou et ainsi de suite.

La figure I-6 donne une idée du mécanisme mis en jeu. On retrouve un mécanisme similaire à celui des pièces d'un jeu de taquin ou « pousse-pousse ».



déplacement global de la lacune

Figure I-6 : Représentation symbolique du mécanisme de déplacement des électrons dans la bande de valence [11].

On peut noter que si les électrons se déplacent de la droite vers la gauche, les trous se déplacent de la gauche vers la droite, c'est-à-dire dans le sens inverse.

A l'équilibre thermique, les densités totales d'électrons dans la bande de conduction et des trous dans la bande de valence sont données par les expressions suivantes [12] :

$$n = \frac{2}{h^3} (2\pi m_e kT)^{3/2} \exp\left[\frac{E_F - E_C}{kT}\right] = N_C \exp\left[\frac{E_F - E_C}{kT}\right]$$
(I-1)

$$p = \frac{2}{h^3} (2\pi m_h kT)^{3/2} \exp\left[\frac{E_v - E_F}{kT}\right] = N_v \exp\left[\frac{E_v - E_F}{kT}\right]$$
(I-2)

Où :

 N_c et N_v sont respectivement la densité effective d'états des électrons dans la bande de conduction et la densité effective d'états des trous dans la bande de valence [12].

Les densités d'états énergétiques (densité d'électrons ou de trous) s'expriment par les relations suivantes [11] :

$$dN_{c}(E) = \frac{1}{2\pi^{2}} \left(\frac{2m_{c}^{*}}{\eta^{2}}\right)^{3/2} (E - E_{c})^{1/2} dE$$
(I-3)

$$dN_{\nu}(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_{\nu}^*}{\eta^2}\right)^{3/2} (E_{\nu} - E)^{1/2} dE$$
(1-4)

L'électron libre ainsi que le trou est connu comme paire électron-trou (*EHP*) et peut être décrit par le phénomène d'ionisation ou de génération. Quand un électron libre et un trou se combinent disparaissent, un processus qui est connu sous le nom de recombinaison. Le taux de recombinaison est proportionnel au nombre d'électrons libres et de trous existants. Lorsque l'équilibre thermique de la génération et de la recombinaison est maintenu le nombre d'*EHP* sera constant. Le Germanium réagit de la même façon même s'il a 32 électrons au total, 28 qui constituent le noyau atomique, laissant 4 électrons de valence [6]. Recombinaison et génération sera discuté plus en détail plus tard.

Les électrons et les trous ont chacun une mobilité associée à chaque matériau à base de la simplicité avec laquelle les porteurs de charge libres peuvent se déplacer à travers le matériau.

Bien que les électrons et les trous soient de charge égale, les électrons ont une plus grande mobilité. Les électrons et la mobilité des trous sont fonction de caractéristiques matérielles telles que la structure en réseau, la taille des atomes dans la matière, et l'orientation du canal, dans lequel le support de charge se déplace. La mobilité d'électrons et de trous détermine les paramètres tels que la conductance et la résistivité d'un matériau, qui sont des facteurs importants pour les cellules solaires [1].

I.2.4 Dopage et impuretés des semi-conducteurs :

Il y a deux types de semi-conducteurs, intrinsèque et extrinsèque. Les semi-conducteurs intrinsèques sont complètement purs, signifiant qu'ils ont seulement un type d'élément ou un composé dans sa structure cristalline [10], et ayant un taux d'impuretés très faible (moins de 1 atome d'impureté pour 10¹³ atomes de l'élément semi-conducteur). Ils se comportent comme des isolants à très basse température et leur conductivité augmente avec la température [8].

I.2.4.1 Semi-conducteur intrinsèque :

Il est impossible de créer des semi-conducteurs intrinsèques totalement purs parce qu'à un certain point pendant le processus de croissance les impuretés contaminent le matériel [10]. Si un lien de semi-conducteur intrinsèque est cassé, un électron libre et un trou sont créés simultanément, de même, si un électron est excite de la bande de valence à la bande de conduction alors un trou sera simultanément créé dans la bande de valence [6]. On peut considérer que le trou s'est déplacé par combinaisons d'électrons. La structure cristalline du silicium pur est présentée dans la figure I-7 :



Figure I-7 : Structure cristalline du Silicium pur [9]

I.2.4.1.1 Concentration en porteurs intrinsèques :

Dans des conditions d'équilibre, un semi-conducteur intrinsèque a un nombre égal des trous (p) et des électrons (n) qui est finalement égal à la concentration en porteur intrinsèque (n_i) .Les nombres de p et n sont égaux à un semi-conducteur intrinsèque parce que les porteurs sont créés uniquement par paires dans un matériau très pur [6]. Ceci se résume à cette équation :

$$n = p = n_i \tag{I-5}$$

Les concentrations des porteurs mobiles sont fonction de la largeur de bande interdite E_g (voir tableau I-1), mesurée par rapport à l'énergie thermique kT. Pour les petites valeurs de T($kT \ll E_g$), n_i est petite, ce qui implique moins de porteurs mobiles. Le nombre moyen de porteurs (électrons ou trous mobiles) qui existent dans un matériau semi-conducteur intrinsèque peut être trouvé à partir de la loi d'action de masse [13] :

$$n_i = AT^{1.5} \exp\left[-\frac{E_g}{(kT)}\right]$$
(I-6)

Où

T est la température absolue, en K° *k* est la constante de Boltzmann ($k = 1.38 \times 10^{-23}$ J/K ou 8.62×10^{-5} eV/K) *E_g* est la largeur de la bande interdite en eV. Elle est donnée par

$$E_g = E_C - E_v \tag{I-7}$$

A est une constante dépendant du matériau donné et il est donné par

$$A = \frac{2}{h^3} \left(2\pi m_o k \right)^{3/2} \left(\frac{m_n^* m_p^*}{m_o m_o} \right)^{3/4}$$
(I-8)

Où

h est la constante de Planck (
$$h = 6.62 \times 10^{-34}$$
 Js ou 4.14×10^{-15} eV s)

 m_o est la masse au repos d'un électron.

 m_n^* est la masse effective d'un électron dans le matériau.

 m_p^* est la masse effective d'un trou dans le matériau.

	$E_{\rm g}({\rm eV})$	$n_{\rm i}({\rm cm}^{-3})$	$N_{\rm C}({\rm cm^{-3}})$	$N_{\rm V}({\rm cm}^{-3})$
InSb	0.18	1.6×10^{16}		
InAs	0.36	8.6×10^{14}		
Ge	0.67	2.4×10^{13}	1.04×10^{19}	6.0×10^{18}
Si	1.124	1.0×10^{10}	7.28×10^{19}	1.05×10^{19}
GaAs	1.43	1.8×10^6	4.35×10^{17}	5.33×10^{18}
GaP	2.26	2.7×10^0		
GaN	3.3	$\ll 1$		

Tableau I-1 : Bande interdite, concentration intrinsèque des porteurs, densité effective de la bande de conduction et la bande de valence à $T = 300 \text{ K}^{\circ}$ pour différents semiconducteurs [14].

Les cristaux semi-conducteurs purs, qui ne contiennent pas d'atomes étrangers, sont appelées intrinsèque. Dans un semi-conducteur intrinsèque à 0 K° il n'y a pas de *EHP*, lorsque la température augmente, cependant, la chaleur absorbée par le matériau créera un certain nombre de *EHP* et la conductivité du matériau augmente. Depuis que *EHP* sont responsables de la conductivité, ils sont appelés porteurs intrinsèques. Leur nombre augmente de façon logarithmique. Ceci est montré dans la figure I-8 pour Si, Ge et GaAs.



Figure I-8 : Densité des porteurs intrinsèques en fonction de la température [15].

I.2.4.2 Semi-conducteurs extrinsèques :

Les semi-conducteurs extrinsèques sont créés en ajoutant des atomes d'impuretés dans les matériaux intrinsèques. Heureusement, ajouter des impuretés dans un matériel peut être bénéfique aux performances du semi-conducteur. L'ajout des impuretés dans la substance avec l'intention de contrôler ses caractéristiques de fonctionnement est connu sous le nom de dopage [10], ce processus peut engendrer des changements des propriétés électriques.

Le dopage est employé pour contrôler le nombre d'électrons ou de trous dans un matériel par l'addition d'une quantité déterminée d'impuretés, avec résultats des matériaux de type-p ou de type-n en concordance avec le nombre des trous ou des électrons libres [6].

I.2.4.2.1 Semi- conducteur dopé de type-n :

Les dopants de type -n sont également connus comme donneurs, car ils sont des éléments ou des composés avec cinq électrons de valence ou plus qui donneront un électron après que les quatre autres forment des liaisons covalentes avec le matériau intrinsèque dans lequel ils ont été placés.



Figure I-9 : Dopage d'un monocristal de silicium par un atome de phosphore, dopage donneur de type-n [9], [11].

Dans le matériau de type-n, les électrons sont des porteurs majoritaires et les trous sont des porteurs minoritaires [10]. Prenons le cas d'un atome de la colonne V, par exemple le phosphore. La couche externe de cet atome comporte, a priori, 5 électrons, comme représenté sur la figure I-9. Inclus dans le réseau cristallin, cet atome va se retrouver avec 9 électrons sur sa couche externe. Dès que l'énergie thermique sera suffisante, cet électron va quitter son orbite pour circuler dans le cristal. Il rejoint dans ce cas la bande de conduction du cristal. Le noyau de l'atome de phosphore ayant une charge (due à ses protons) qui n'est plus compensée, cet atome va s'ioniser positivement. Cet atome a ainsi un comportement dopant et puisqu'il a fourni un électron au cristal (dans sa bande de conduction), on l'appelle atome donneur. Notons que la charge totale du cristal reste nulle, le cristal étant globalement neutre.

I.2.4.2.2 Semi- conducteur dopé de type-p :

Les dopants de type-p, ou accepteurs, sont des éléments ou des composés ayant trois ou moins d'électrons de valence et acceptent des électrons, forment des liaisons covalentes avec quatre ou plusieurs de leurs cinq trous. Les matériaux de type-p ont des trous comme porteurs majoritaires et des électrons comme porteurs minoritaires [10].



Figure I-10 : Dopage d'un monocristal de silicium par un atome de Bore, dopage accepteur de type-P [9], [11].

Prenons le cas d'un atome de la colonne III, par exemple le bore. La couche externe de cet atome comporte, a priori, 3 électrons, comme représenté sur la figure I-10. Inclus dans le réseau cristallin, cet atome va se retrouver avec 7 électrons sur sa couche externe. Dès que l'énergie thermique sera suffisante, un électron de valence voisin va quitter son orbite pour venir créer un octet autour de l'atome de bore. Il crée dans ce cas une lacune dans la bande de valence du cristal, c'est-à-dire qu'il crée un trou. Le noyau de l'atome de bore ayant une charge due à ses protons insuffisante, cet atome va s'ioniser négativement. Cet atome a ainsi un comportement dopant et puisqu'il a fourni un trou au cristal (dans sa bande de valence), on l'appelle atome accepteur, puisqu'il accepte un électron. Notons que la charge totale du cristal reste toujours nulle, le cristal étant globalement neutre.

Le nombre des porteurs majoritaires est analogue au dopage dans une matière, tandis que le nombre des porteurs minoritaires est analogue à la température. Notons que les deux typesp et n du matériau reste neutres. Toutefois, l'effet de dopage est optimal pour les propriétés électriques de la matière, même à de très faibles concentrations [15].

I.2.5 Semi-conducteurs directs et indirects :

Les comportements «directs» et «indirects» sont suffisamment importants qu'ils méritent une mention spéciale. Les aspects critiques des structures de bandes d'énergie de ces deux types de semi-conducteurs sont représentés schématiquement sur la figure I-11. L'énergie minimale de la bande de conduction dans les matières indirectes a une autre dynamique que celle de l'énergie maximale de la bande de valence. Les électrons dans la bande de conduction vont rapidement se déplacer à l'énergie de la bande minimale. Les trous également vont rapidement se déplacer à l'énergie maximale de la bande de valence. Par conséquent, les électrons et les trous n'ont normalement pas la même dynamique dans un semi-conducteur indirecte tandis que dans un matériau direct, ces quantités de mouvement sont égales. Cela a des conséquences sur la durée de vie des porteurs minoritaires et les propriétés optiques des semi-conducteurs [16].

Lorsque la bande de valence et la bande de conduction coïncident en vecteur d'onde k, le semi-conducteur a une bande interdite directe. Lorsque la bande de valence et la bande de conduction ont différents vecteurs d'onde k, le semi-conducteur possède une bande interdite indirecte.

Le vecteur d'onde *k* représente la différence de dynamique. Afin d'exciter un électron de la bande de valence à la bande de conduction dans un semi-conducteur à bande interdite indirecte, en plus d'un photon, un phonon est nécessaire. Le phonon est une vibration en réseau. Le phonon transfère son mouvement pour l'électron au moment où le photon est absorbé. Par conséquent, un semi-conducteur à bande interdite direct est généralement préférable pour l'optoélectronique. Le silicium est un exemple d'un semi-conducteur à bande interdite indirecte. L'Arséniure de gallium et le nitrure d'indium gallium sont des exemples de semi-conducteurs à bande interdite directe [3].



Figure I.11 : Différence entre une bande interdite directe et indirecte d'un semi-conducteur [12].

La structure de bande est la relation entre l'énergie de la particule et son vecteur d'onde k: E(k). On représente l'évolution de l'énergie de l'électron par la courbe E(k) en forçant le vecteur d'onde k à demeurer dans une direction remarquable de l'espace des k, c'est à dire une direction cristallographique du réseau réciproque [12].

I.2.6 Génération-Recombinaison :

Lorsqu'il y a dans la bande de conduction et dans la bande de valence un excès d'électrons libres et de trous libres par rapport aux concentrations d'équilibre thermique, différents processus tendent à ramener le système vers son état d'équilibre. Ces processus sont traduits dans les équations de conservation par les termes G et R, qui caractérisent la création (génération) et la disparition (recombinaison) des porteurs dans un semi-conducteur [17]. Une équation importante pour les considérations suivantes est l'équation de continuité, dans sa forme générale pour la concentration d'un certain type de particule i;

$$\frac{\partial n_i(x)}{\partial t} = G_i(x) - R_i(x) - div \quad j_i(x)$$
(I-9)

Cette relation exprime que la densité des particules n_i de type i dans un élément de volume à l'emplacement x augmente avec le temps lorsque ces particules sont produites à un taux G_i , que n_i diminue quand les particules à l'emplacement x sont anéantis au taux R_i , ou quand ils s'échappent de l'élément de volume à l'emplacement x, parce que la densité de courant des particules j_i circulant vers la droite est supérieure à celle circulant vers la gauche, exprimée par $div j_i > 0$ [18].

I.2.6.1 Génération :

Les électrons et les trous sont produits par des procédés qui peuvent fournir au moins l'énergie minimum de génération \mathcal{E}_G d'une paire électron-trou. Cela comprend l'ionisation par impact, dans lequel un électron (ou un trou) avec une énergie cinétique suffisante frappe un électron lié (dans la bande de valence) hors de son état lié et le favorise à un état dans la bande de conduction, en créant ainsi un électron et un trou. Le même processus pour exciter un électron de la bande de valence à la bande de conduction peut se faire avec une vibration du réseau géant fournissant l'énergie, ou par l'absorption d'un photon. En présence d'impuretés fournissant des états d'énergies dans le gap d'énergie, l'excitation peut se dérouler en plusieurs étapes et l'énergie générée \mathcal{E}_G peut être fournie en portions plus petites par des phonons ou même des photons [18].

I.2.6.2 Recombinaison :

Les électrons qui se déplacent librement à travers le cristal ont tendance à se recombiner avec les trous. De cette façon, les *EHP* disparaissent. Ce phénomène est appelé recombinaison et sa vitesse est proportionnelle au nombre de trous et d'électrons libres existants. Lorsque la recombinaison se produit, l'électron et le trou cessent d'être des porteurs libres. Au cours de ce phénomène, l'électron transite dans un état d'énergie inférieure. Pour cela, il doit libérer un quantum d'énergie égale à la différence de son origine et son état final [15]. Cette énergie peut être classée en trois façons: radiative où l'émission d'un photon (lumière), non radiative où l'émission d'un phonon (chaleur), et Auger où un transfert d'énergie cinétique à un autre électron libre ou trou [10].

La recombinaison peut être caractérisée comme suit:

- Recombinaison directe (de bande à bande)
- Recombinaison indirect (de bande aux impuretés, avec l'aide de pièges)
- Recombinaison Auger
- Recombinaison de surface

Ces processus sont présentés dans la figure I-12.



Figure I.12 : Types de recombinaison [10].

I.2.6.2.1 Recombinaison directe :

La recombinaison directe est quand un électron dans la bande de conduction se combine avec un trou dans la bande de valence, sans variation d'énergie cinétique de l'électron. Ce type de recombinaison se produit dans les matériaux directs tels que le GaAs. Étant donné qu'aucune quantité de mouvement n'est nécessaire le taux de recombinaison est le plus élevé. La durée de vie d'un porteur est l'inverse de son taux de recombinaison, par conséquent, cette durée de vie est très courte [15].

I.2.6.2.2 Recombinaison indirecte :

La recombinaison assistée par piège se produit lorsqu'un électron tombe dans un «piège», ou un niveau d'énergie au sein de la bande interdite résultant d'un défaut structural ou impureté. Une fois que le piège est rempli, il ne peut accepter un autre électron. Les électrons occupant le piège, dans un deuxième temps, s'installent dans des états de la bande de valence vides, complétant ainsi le processus de recombinaison. On peut envisager ce processus comme une transition en deux étapes d'un électron de la bande de conduction à la bande de valence ou l'anéantissement de l'électron et le trou, qui se rencontrent dans le piège [19].

I.2.6.2.3 Recombinaison Auger :

Nous avons une recombinaison de type Auger, lorsque l'énergie de l'électron qui se recombine dans la bande de valence est transférée sous forme d'énergie cinétique à un autre électron libre. L'énergie transférée est libérée ensuite sous forme de phonons. Ce mécanisme est prédominant pour les régions fortement dopées [12]. Cette recombinaison nécessite trois particules: au moins un trou et un électron et la troisième peut être un trou ou un électron. Ce type de recombinaison est similaire à la recombinaison de bande à bande, mais la troisième particule reçoit l'énergie à partir de la recombinaison [10].

I.2.6.2.4 Recombinaison de surface :

Recombinaison au niveau des surfaces et des interfaces peuvent avoir un impact significatif sur le comportement des dispositifs semi-conducteurs. C'est parce que les surfaces et interfaces contiennent généralement un grand nombre de centres de recombinaison en raison de l'interruption soudaine du cristal semi-conducteur, ce qui laisse un grand nombre d'États électriquement actives. En outre, les surfaces et les interfaces sont plus susceptibles de contenir des impuretés car elles sont exposées pendant le processus de fabrication du dispositif [19].

Les recombinaisons en surface avant et arrière inhérentes aux densités de dopages selon la relation suivante :

$$S = S_0 \left(\frac{N}{N_{set}}\right)^{\alpha}$$
(I-10)

 S_{0} , N_{set} et α dépendent du traitement de la surface et de la passivation. Pour une oxydation thermique d'une couche de silicium de type-n, α est de 1 et N_{set} est de 10^{18} cm^{-3} [12].

I.3 Hétérojonction AlGaAs/GaAs :

I.3.1 Jonction de base PN :

L'implémentation réussite d'une jonction PN est essentielle dans l'électronique moderne et les dispositifs à semi-conducteurs, y compris le transistor à jonction bipolaire (*BJT*), le transistor à effet de champ de structure métal-oxyde-semi-conducteur (*MOSFET*), le redresseur, diode Zener, et les dispositifs photovoltaïques.

Une jonction PN est formée pour contrôler efficacement les caractéristiques électriques d'un matériau [6]. On sait qu'elle ne permet le passage du courant que dans un sens [9], et qu'elle est constituée de deux zones respectivement dopées P et N juxtaposées d'une façon que nous supposerons abrupte (figure I-13), c'est à- dire que la transition de la zone P à la zone N se fait brusquement. Lorsque l'on assemble les deux régions, la différence de concentration entre les porteurs des régions P et N va provoquer la circulation d'un courant de diffusion tendant à égaliser la concentration en porteurs d'une région à l'autre. Les trous de la région P vont diffuser vers la région N laissant derrière eux des atomes ionisés, qui constituent autant de charges négatives fixes.

Il en est de même pour les électrons de la région N qui diffusent vers la région P laissant derrière eux des charges positives. Il apparaît aussi au niveau de la jonction une zone contenant des charges fixes positives et négatives. Ces charges créent un champ électrique E qui s'oppose à la diffusion des porteurs de façon à ce qu'un équilibre électrique s'établisse [20].

La force qui maintient l'équilibre sans aucune force externe est la barrière de potentiel intégré V_{bi} . Cette barrière maintient l'équilibre en séparant les électrons porteurs majoritaires dans la région n et les électrons porteurs minoritaire dans la région P. De même, il sépare les trous porteurs majoritaires dans la région P et les trous porteurs minoritaire dans la région N. Parce que cette tension maintient l'équilibre et ne produit pas de courant. La représentation mathématique de cette tension est [10]

$$V_{bi} = \frac{kT}{q} \ln \left(\frac{N_a N_d}{n_i^2} \right)$$
(I-11)

Où

 N_a est la concentration d'accepteur (cm⁻³), N_d la concentration de donneur (cm⁻³), et q est la charge élémentaire (C).

La largeur de la région de déplétion (*W*) est également liée au niveau de dopage des deux régions. Elle peut être calculée en utilisant l'équation (I-12) [6].

$$W = \left\{ \frac{2\varepsilon_s V_{bi}}{e} \left[\frac{N_a + N_d}{N_a N_d} \right] \right\}^{1/2}$$
(I-12)

Les valeurs typiques de la largeur de la région de déplétion est de 0.1 à 10 µm.



Figure I-13 : Représentation d'une jonction PN à l'équilibre [21]

I.3.2 Polarisation de la jonction en direct :

Si on polarise la jonction sous une tension directe V_{direct} , elle réduit la hauteur de la barrière qui devient (V_{bi} - V_{direct}) entraînant une diminution de l'épaisseur W (dans l'équation (I-12) V_{bi} est remplacé par (V_{bi} - V_{direct}). De nombreux électrons de la région N et de trous de la région P peuvent alors franchir cette barrière de potentiel et, se présentant alors dans un "milieu hostile", ils sont recombinés (figure I-14). Cette recombinaison consomme près de la région de déplétion W des trous dans la région P (des électrons dans la région N). Pour rétablir l'équilibre, les trous de la région neutre P se mettent en mouvement vers la zone où se produit la recombinaison (déficit en trous). Les électrons de la région neutre N sont soumis à un phénomène analogue [20].



Figure I-14 : Jonction polarisée dans un sens direct [6].

Comme les porteurs majoritaires continuent à partir de la région N vers la région P, ils deviennent minoritaires où ils diffusent et éventuellement se recombinent avec les trous majoritaires. De même, les trous en permanence générés dans la région P seront disponibles à se recombiner avec les électrons traversant la barrière de potentiel. Une partie du courant étant produite est due à la saturation (I_S) et une partie est due à la diffusion (I_D).

Toutefois, dans l'état de polarisation direct le courant de diffusion est beaucoup plus grand que le courant de saturation (l'équation (I-13)) en raison de la diminution de la région de déplétion. La figure I-15 montre la caractéristique courant –tension (*I-V*) d'une jonction PN dans l'état de polarisation directe.

$$I_{Total} = I_S + I_D \approx I_D \tag{1-13}$$



Figure I-15 : Caractéristique *I-V* de la jonction PN en polarisation directe [6].

I.3.3 Polarisation de la jonction en inverse :

Si on polarise la jonction en sens inverse, la hauteur de barrière de potentiel entre les régions P et N est renforcée par la tension extérieure inverse appliquée (V_{inv}) et devient ($V_{bi}+V_{inv}$). Le champ électrique dans la région de charge d'espace augmente ainsi que son épaisseur W (dans l'équation (I-12), V_{bi} devient $V_{bi}+V_{inv}$). Les porteurs majoritaires des régions N et P n'ont pas l'énergie nécessaire pour sauter cette barrière de potentiel. La jonction est alors traversée par un très faible courant de saturation I_s . La (figure I-16) nous montre l'origine du courant inverse de saturation I_s de cette jonction [20].



Figure I-16 : Jonction polarisée dans un sens inverse [6].

La largeur de région de déplétion est donnée par l'équation (I-14).

$$W = \left\{ \frac{2\varepsilon_s (V_{bi} + V_R)}{e} \left[\frac{N_a + N_d}{N_a N_d} \right] \right\}^{1/2}$$
(I-14)

$$I_{Total} = I_S + I_D \approx I_S \tag{I-15}$$

En cas de polarisation inverse, la probabilité qu'un électron aura suffisamment d'énergie pour surmonter la barrière de potentiel est très faible et la jonction va agir comme un isolant, en ne permettant pas le courant de circuler. Avec la croissance de la région de déplétion, le courant de diffusion (I_D) est très faible et le courant total dans le système est approximativement égal au courant de saturation (I_S) (l'équation (I-15)). Idéalement, ce courant serait égal à zéro, mais en réalité, il ya une petite quantité de courant de saturation, comme illustré dans la figure I-17.



Figure I-17 : Caractéristique I-V de la jonction PN en polarisation inverse [6].

I.3.4 Hétérojonctions :

Les jonctions constituées par la mise en contact de deux régions différemment dopées d'un même semi-conducteur, sont appelées homojonctions. Par contre, les jonctions réalisées par la juxtaposition de deux matériaux différents sont appelées hétérojonctions [5]. La réalisation d'hétérojonction s'effectue par la croissance cristalline d'un matériau sur l'autre et nécessite l'utilisation de semi-conducteurs ayant des propriétés cristallines voisines (la taille des atomes doit être notamment assez proche). Selon les matériaux utilisés pour les semi-conducteurs, on peut distinguer deux types d'hétérojonctions.

Le schéma de la figure I-18 donne une description schématique des décalages de bandes de conduction et de valence pour deux types d'hétérojonction.



Figure I-18 : Diagrammes schématiques montrant deux types différents d'hétérojonction [22].

Pour l'hétérojonction de type I (figure (I-18.a)), les offsets de bande pour la bande de conduction et de valence agissent comme des barrières de potentiel et gardent les électrons et les trous dans le matériau de plus petite bande interdite. Une énergie est donc nécessaire pour faire déplacer les porteurs du matériau petite bande interdite au matériau grande bande interdite. Les hétérojonctions (GaAs-AlGaAs, InP-InGaAs, Si-SiGe) sont des hétérojonctions de type I. Les hétérojonctions de type II (figure (I-18.b)) dites à bande interdite décalée favorisent le déplacement d'un seul type de porteurs.

Selon le type de dopage utilisé pour les semi-conducteurs, deux hétérojonctions se distinguent :

- L'hétérojonctions iso-types, pour lesquelles les deux semi-conducteurs sont de même type de dopage [23], les porteurs qui diffusent dans la zone de charge d'espace sont majoritaires, donc le courant total est celui des porteurs majoritaires [5].
- L'hétérojonctions aniso-types, pour lesquelles les deux semi-conducteurs sont dopés différemment [23], les porteurs qui sont émis thermiquement à l'interface d'un semiconducteur, deviennent dans l'autre des porteurs minoritaires [5].

I.3.5 L'hétérojonctions AlGaAs/GaAs :

L'hétérojonction constituée du matériau de grande bande interdite (dopé N), $Al_xGa_{1-x}As$ et du matériau de faible bande interdite (non dopé) GaAs est la plus étudiée du fait de la facilité relative de réalisation des couches épitaxiales. La figure I-19 représente la structure de bandes de l'hétérojonction, avant et après contact.



Figure I-19 : Diagramme de bandes d'énergie de l'hétérojonction AlGaAs/GaAs [24].

De chaque côté de l'hétérojonction formée, infiniment loin de l'interface, le diagramme de bande doit tendre asymptotiquement vers chacun des diagrammes initiaux. Ceci implique la courbure des diagrammes de conduction et de valence au voisinage de l'hétérojonction. Ces courbures ont pour effet de créer un puits de potentiel qui permet le confinement des électrons issus des donneurs du matériau de grande bande interdite (AlGaAs) dans le matériau de faible bande interdite (GaAs).

L'étroitesse de ce puits (10 à 20 nm) induit la quantification des niveaux d'énergie dans la direction perpendiculaire à la jonction et le mouvement des électrons se fait dans un plan parallèle à l'hétérojonction.

I.3.6 Les composés binaires et ternaires :

I.3.6.1 Les composés binaires :

L'étude des propriétés des composés binaires, et en particulier celles de la structure des bandes montre que les éléments les plus légers donnent des composés dont laquelle la bande interdite est large et indirecte, et dans laquelle la masse effective des électrons est élevée.

Composé III-V	Eg (ev)	<i>m * / m</i> °	μ (cm ² /V.S)	a (A°)
BN	7,5	-	-	3,6150
AIP	2,45	-	-	5,4510
A1A s	2,16	-	-	5,6605
A 1Sh	1,58	0,12	200	6,1355
AISU	2,0	-	-	4,5380
BP	3,36	0,19	380	<i>a</i> =3,189
GaN				<i>b</i> =5,185
	2,26	0,82	110	5,4512
GaP	1.42	0.067	8800	5.653
GaAs	0.72	0.042	5000	6 0959
GaSp	1.25	0,077	4600	5 9696
InP	1,55	0,077	4000	5,0000
InAs	0,36	0,023	33000	6,0584
InSp	0,17	0,0145	80000	6,4794

Tableau I-2 :	Propriétés de	es principaux	composés binaires	III-V à 300 K° [17].
---------------	---------------	---------------	-------------------	----------------------

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, qui demande des semiconducteurs à forte mobilité des porteurs ou pour l'optoélectronique où une structure de bande directe est nécessaire pour que les transitions optiques soient efficaces. A l'autre extrémité, les éléments lourds comme le Thallium 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.

I.3.6.2 Les composés ternaires :

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 sait par exemple obtenir des alliages ternaires, qui sont identifiés de la façon suivante :

 $A_x A'_{(1-x)} B$ exemple: $Al_x Ga_{1-x} As$, lorsque la composition exacte compte peu, on écrit tout court AlGaAs [17].

I.3.7 Le composé GaAs :

Le faible coût, la grande disponibilité, la grande conductivité thermique et la bonne qualité de son oxyde ont fait du silicium le matériau clé de l'électronique. Toutefois, les semiconducteurs III-V sont rapidement apparus comme des matériaux de choix pour des applications spécialisées. Notamment, l'arséniure de gallium (GaAs) et le phosphure d'indium (InP) se sont distingués par leur grande mobilité électronique et leur bande interdite directe. Leur grande mobilité électronique permet d'obtenir des dispositifs à haute rapidité de commutation en électronique, alors que leur bande interdite directe favorise les transitions optiques. Ces propriétés, communes à la plupart des matériaux III-V sont très prises dans l'élaboration des dispositifs optoélectroniques [25]. Le GaAs cristallise dans une structure de type zinc–blende (voir figure I-20). Il est formé de deux réseaux cubiques à faces centrées identiques qui s'interpénètrent, l'un contenant les atomes de gallium 'Ga', l'autre l'atome de l'arsenic 'As'. Le décalage entre les deux réseaux est d'un quart de la diagonale principale du cube. On a donc quatre paires d'atomes par cellule conventionnelle.

Les liaisons tétraédriques covalentes telles que les liaisons Si-Si par exemple ou partiellement ioniques et partiellement covalentes telles que les liaisons Ga-As dans le cas qui nous concerne sont la base de la structure zinc-blende. En effet, chaque atome est l'origine de quatre liaisons orientées dans l'espace suivant les axes de symétrie d'un tétraèdre régulier, comme le montre (figure I-20) [26].



Figure I-20 : Structure cristalline du GaAs, liaison tétraédrique de la structure Zinc–blende [27].

Ces conditions sont bien satisfaites pour certains semi-conducteurs, tel que l'arséniure de gallium et le germanium, où le désaccord entre les paramètres cristallins est de l'ordre de 0.088% et les coefficients de dilatation ont des valeurs voisines, ainsi que pour le GaAs et le Al_xGa_{1-x}As, comme il est montré dans le tableau I-3.

Propriété	Symbole	Ge	GaAs	Ga _{1-x} Al _x As (x=0.3)
Paramètre de maille (Å)	а	5.658	5.653	5.655
Densité (g.cm ⁻³)	ρ	5.32	5.36	4.88
Structure de bande	·	indirecte	directe	Directe
Energie de bande interdite (gap) (eV)	Eg	0.67	1.424	1.798
Concentration intrinsèque (cm ⁻³)	ni	$2,4.10^{13}$	$2,2.10^{6}$	$2,4.10^3$
Mobilité électronique (cm ² .V ⁻¹ .s ⁻¹)	μ_n	4000	8800	-
Mobilité des trous $(cm^2.V^{-1}.s^{-1})$	$\mu_{\rm p}$	2000	400	-
Vitesse de saturation (cm/s)	Vs	-	10^{7}	10^{7}
Conductivité thermique (W.cm ⁻¹ .°C ⁻¹)	Κ	0.6	0.46	-
Coefficient de dilatation thermique ($\times 10^{-6} \circ C^{-1}$)	α_{th}	5,5	6.4	6.04
Permittivité relative	ε _r	16.3	13.18	12.24

Tableau I-3 : Propriétés physiques de quelques matériaux à 300 K° [5].

I.3.8 L'alliage AlGaAs :

L'alliage $Al_xGa_{1-x}As$ est une solution solide de GaAs et de AlAs (voir figure I-21). Les paramètres physiques relatifs à cet alliage peuvent être obtenus par combinaison des paramètres correspondants au GaAs et à l'AlAs. Les deux matériaux ont la même structure cristalline. Avec des paramètres physiques voisins et se rejoignent pour une température de 900 °C environ.



Figure I-21 : Structure du GaAs, elle se compose de deux sous réseaux cubiques à faces centrées, décalés d'un quart de la grande diagonale du cube, et occupés l'un par l'anion (As), et l'autre par le cation (Al,Ga) [27].

La nature de la transition énergétique de l'alliage $Al_xGa_{1-x}As$ change selon le taux d'aluminium x, avec 0 < x < 1. Pour une fraction d'aluminium inférieure à 0,45, la transition de l'alliage est identique à celle du GaAs caractérisé par une transition directe. La transition devient indirecte Quand le taux d'aluminium devient supérieur à 0,45. Les différents paramètres physiques du $Al_xGa_{1-x}As$ sont donnés en fonction de la fraction x de l'aluminium. À la température ambiante l'affinité électronique χ s'écrit [26] :

$$\chi = 4,07 - 1,1 x \quad pour \qquad x \pi \ 0,45$$

$$et \quad \chi = 3,64 - 0,14 \ x \quad pour \qquad 0,45 \ \pi \ x \ \pi \ 1$$
(I-16)

Pour que deux matériaux puissent former une bonne hétérojonction, il est d'abord nécessaire que les paramètres de maille soient aussi voisins que possible. A cet effet, le matériau Al_xGa_{1-x}As est très intéressant car, lorsque (*x*) varie de 0 à 1, c'est à dire lorsque l'on passe de GaAs à AlAs, la structure de bande passe d'une bande interdite à gap direct de valeur de 1.43 eV à une bande interdite à gap indirect de valeur de 2.16 eV, alors que la constante de maille passe de 5.653 A° à 5.661 A°, soit une variation < 0.2%. Ainsi il est possible de faire croître toutes les compositions sur le GaAs avec un accord de maille convenable.

La constante de maille et les bandes d'énergies en fonction de la composition (x) de l'aluminium sont données par [17] :

Constante de maille (en A°)
$$a = 5.6533 + 0.0078x$$
 (I-17)

Bande interdite (en eV) $E_g = 1.424 + 1.155x + 0.37x^2$ (I-18)

Discontinuité de
$$E_c$$
 (en eV) $\Delta E_C = \begin{cases} 0.67x + 0.27x^2 & x \pi \ 0.45 \\ 0.475 - 0.31x & 0.45 \pi \ x \pi \ 1 \end{cases}$ (I-19)

Discontinuité de Ev (en eV)
$$\Delta E_{v} = \begin{cases} 0.413x + 0..166x^{2} & x \pi \ 0.45 \\ 0.413 - 0.166x^{2} & 0.45 \pi \ x \pi \ 1 \end{cases}$$
(I-20)

I.3.9 Propriété optique :

I.3.9.1 Indice de réfraction :

Dans un matériau l'indice de réfraction se trouve généralement dans sa forme réelle. Toutefois, il peut être trouvé sous sa forme complexe

$$\widetilde{n} = n + jk \tag{I-21}$$

Avec

 \tilde{n} : L'indice de réfraction complexe,

n : L'indice de réfraction réel,

k : Le coefficient d'extinction du matériau.

L'indice de réfraction caractérise la vitesse de propagation d'une radiation monochromatique dans le matériau et est directement relié à la valeur du diélectrique du matériau. Il est définit par:

$$n = \frac{c}{v} = \sqrt{\varepsilon}$$
(I-22)

Avec

c : la vitesse de la lumière dans le vide,

v : Vitesse de l'onde lumineuse dans un milieu ;

 ε : Constante diélectrique.

I.3.9.2 Le coefficient d'extinction :

Le coefficient d'extinction d'un matériau, est une mesure qui caractérise la capacité du matériau à absorber une onde électromagnétique à une longueur d'onde particulière.

le coefficient d'extinction, relie au coefficient d'absorption a par 1'expression :

$$k = \frac{\lambda}{4\pi}\alpha\tag{I-23}$$

Le coefficient de réflexion normale du matériau s'écrit [28]:

$$R = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2}$$
(I-24)

Les spectres des indices de réfraction en fonction de l'énergie du photon E ; n(E) et des coefficients d'extinction k(E) pour l'AlGaAs sont présentés respectivement dans les graphes de la figure I-22 pour différentes valeurs de la composition x.



Figure I-22 : Spectres n(E) et k(E) pour AlGaAs avec les neuf compositions, de gauche à droite lorsque x augmente [29].

I.3.9.3 Le coefficient d'absorption:

L'énergie minimale nécessaire au photon incident pour provoquer la transition électronique dépend de la largeur de bande interdite du matériau, c'est la raison pour laquelle on détermine un coefficient d'absorption intrinsèque. Pour des photons d'énergie inférieure à $E_{\rm g}$ le coefficient d'absorption est négligeable et la radiation lumineuse traverse le matériau avec une atténuation quasiment nulle.

A proximité du seuil d'absorption intrinsèque, le coefficient d'absorption est proportionnel à la différence ($hv - E_g$):

$$\alpha = B(h\nu - E_g)^a \tag{I-25}$$

L'indice *a* prend des valeurs différentes, selon que le matériau est à transition interbande directe (a=1/2), ou indirecte (a=2). Le facteur multiplicatif *B* dépend du matériau.

Dans le cas du composé ternaire $Al_xGa_{1-x}As$, le coefficient d'absorption change avec la fraction molaire *x*. Une expression a été donnée dans la référence, peut être utilisé pour le calcul du coefficient d'absorption, qui est en fonction de l'énergie du minimum des bandes interdites :

$$\alpha = 4.10^4 (E - E_{g1})^{1/2} + 10^3 (E - E_{g2})^2 + 35.10^5 (E - E_{g3})^{1/2} \qquad (cm^{-1})$$
(I-26)

Où

$$\begin{split} E_{g1}, E_{g2} &\text{et } E_{g3} \text{ sont les énergies des bandes interdites minimums, données par :} \\ E_{g1} &= 1.44 + 1.04x + 0.47x^2 \quad (eV) \end{split} \tag{I-27} \\ E_{g2} &= 1.92 + 0.17x + 0.07x^2 \quad (eV) \end{aligned}$$

$$E_{g3} = 2.90 + 0.36x + 0.52x^2 \qquad (eV) \tag{I-29}$$

Le coefficient d'absorption en fonction de la composition x est représenté sur la figure (I-23). L'influence des transitions interbandes indirectes sur le coefficient d'absorption est sensible à partir d'une composition en aluminium supérieure à x=0.6.



Figure I-23: Spectre d'absorption optique du composé Al_xGa_{1-x}As [5].

I.4 Conclusion :

Dans ce chapitre, nous avons présenté une introduction de l'étude des cellules solaires, qui sont des dispositifs pouvant être composés de différents matériaux semi-conducteurs. Des notions générales sur les matériaux semi-conducteurs ont été présentées ainsi que les propriétés générales des composés binaires (III-V) et ternaires destinés dans la conception des cellules solaires à hétérojonction AlGaAs /. GaAs. Nous avons aussi clarifié certains concepts sur les types de polarisation d'une jonction PN et la physique de l'hétérojonction AlGaAs /. GaAs .