

**III.1 Introduction:**

Dans ce travail nous allons étudier les caractéristiques électriques de la cellule solaire à hétérojonction (AlGaAs / GaAs) de structure p+pn et n+np où la couche (AlGaAs) fortement dopée est utilisée comme une couche fenêtre, suivie des couches émetteur et base en (GaAs). Nous considérons les deux cas où la structure est avec un substrat épais en (GaAs) et sans substrat. L'étude est réalisée par l'application du logiciel de simulation numérique sophistiqué SILVACO-ATLAS. Le logiciel SILVACO comprend une gamme large d'étude intégrale dans l'élaboration et la caractérisation des cellules solaires. Nous, nous allons appliquer la partie SILVACO-ATLAS pour générer les résultats des caractéristiques électriques de la cellule solaire à l'obscurité et sous l'éclairement  $AM_0$  du fait que les cellules en (GaAs) sont généralement destinées aux applications spatiales. Dans ce chapitre nous présentons une description relativement détaillée sur SILVACO- ATLAS.

**III.2 SILVACO ATLAS :**

Silvaco International est une société de logiciels qui offre des programmes pour la modélisation de tous les domaines de l'électronique, y compris les circuits analogiques et numériques. Cette société dispose de logiciel allant de la simple modélisation Spice jusqu'aux schémas des circuits intégrés de pointe et des outils d'extraction [48].

Le logiciel SILVACO-ATLAS est un simulateur de dispositifs semi-conducteurs basé sur les principes physiques à deux et à trois dimensions, ce qui signifie qu'il peut prédire les caractéristiques électriques qui sont associés aux structures physiques bien spécifiées et des conditions de polarisation. Ceci est obtenu en rapprochant le fonctionnement d'un dispositif sur une grille à deux ou trois dimensions, comprenant un certain nombre de points de grille appelés nœuds. En appliquant un ensemble d'équations différentielles, dérivées des lois de Maxwell, sur cette grille, vous pouvez simuler le transport des porteurs à travers une structure. Cela signifie que le rendement électrique d'un dispositif peut maintenant être modélisé en courant continu, alternatif ou en modes de fonctionnement transitoires [49].

ATLAS est conçu pour être utilisé avec les outils interactifs de VIRTUAL WAFER FAB (VWF). Il s'agit de DECKBUILD, TONYPLOT, DEVEDIT, MASKVIEWS et OPTIMIZER [50]:

DECKBUILD: fournit un environnement d'exécution interactive.

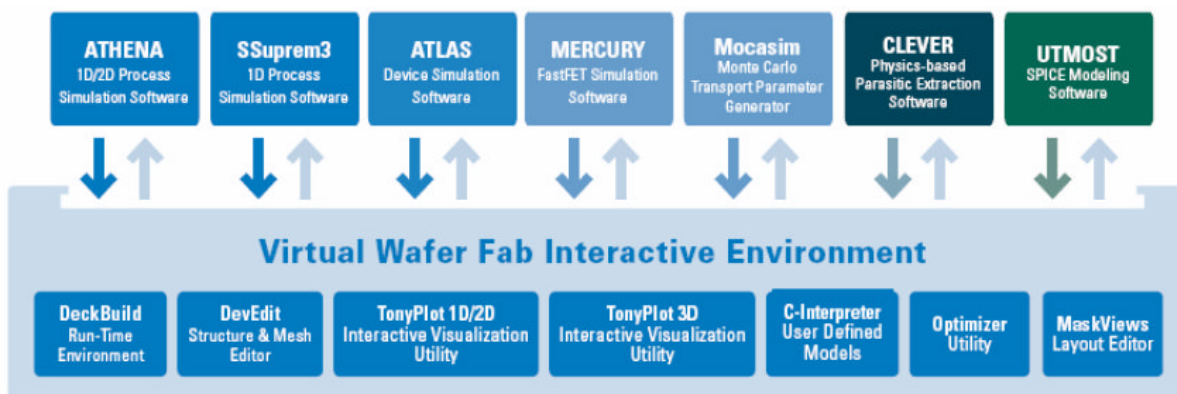
TONYPLOT: fournit des capacités de visualisation scientifique.

DEVEDIT: est un outil interactif pour la spécification de la structure et du maillage ainsi que le raffinement.

MASKVIEWS: est un éditeur de masque pour le circuit intégré IC.

OPTIMIZER: supports d'optimisation à travers de multiples simulateurs.

Virtual Wafer Fabrication (VWF) aident à effectuer la simulation efficacement sans avoir recours à des logiciels tiers. De la figure III-1, on voit que Silvaco avec VWF propose des logiciels de simulation puissante.



**Figure III-1** : Environnement Virtual Wafer Fabrication [3].

### III.3 Entrées et Sorties dans SILVACO ATLAS :

La figure III-2 présente les types d'informations qui entrent et sortent d'ATLAS. La plupart des simulations sur ATLAS utilisent deux entrées : un fichier texte qui contient des commandes pour ATLAS à exécuter et un fichier de structure qui définit la structure qui sera simulée. ATLAS produit trois types de sortie. La sortie d'exécution (Runtime output) fournit un guide pour le progrès des simulations en cours d'exécution, et c'est là que les messages d'erreur et les messages d'avertissement apparaissent. Les fichiers Log (Log-files) stockent toutes les tensions et courants terminaux de l'analyse de dispositif, et les fichiers de solution (Solution files) stockent les données deux et tridimensionnelles relatives à la valeur des variables de solution à l'intérieur du dispositif pour un seul point de polarisation [10].

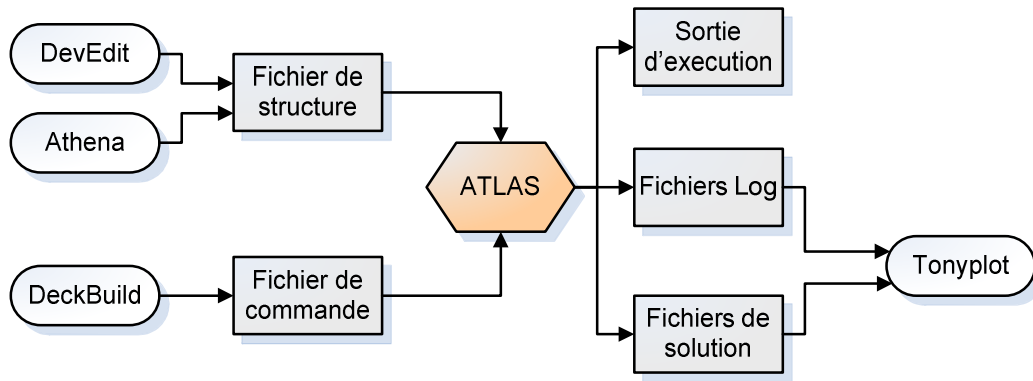


Figure III-2 : ATLAS entrées et sorties [49].

### III.3.1 DECKBUILD:

DeckBuild est un environnement d'exécution graphique interactive, pour le développement de procédé et les dispositifs de simulation des entrées de plate-formes. Il se compose d'une fenêtre pour la création de la plate-forme d'entrée et une fenêtre pour la sortie du simulateur et le contrôle et un ensemble de fenêtres pop-up pour chaque simulateur qui fournissent le langage complet et le support d'exécution (voir la figure III-3) [51].

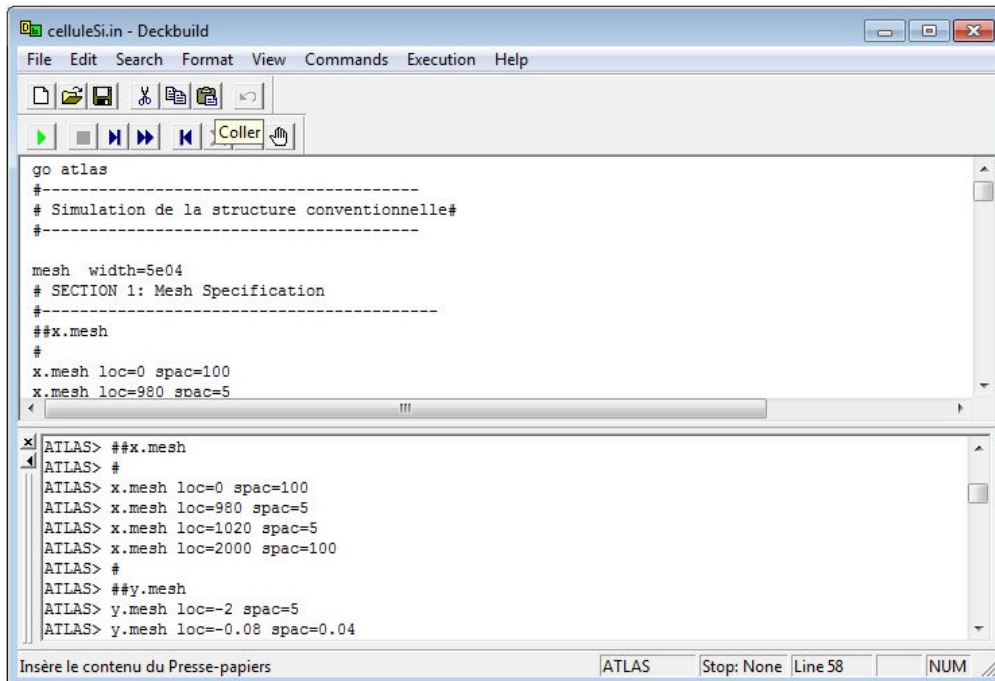


Figure III-3 : Menu de commandes de Deckbuild.

### III.3.2 TONYPLOT :

TonyPlot est un outil de traitement graphique utilisé avec tous les simulateurs SILVACO et fait partie intégrante des VWF, Il donne des possibilités complètes pour la visualisation et l'analyse des caractéristiques de sortie (structure du composant électronique, profil du dopage, et caractéristiques électriques). TONYPLOT peut fonctionner en autonome ou avec d'autres outils interactifs de VWF, comme DECKBUILD, VWF ou SPDB (voir le figure III-4) [52].



Figure III-4 : Fenêtre de Base de TonyPlot.

### III.4 Structure D'entrée dans SILVACO ATLAS :

Un fichier de commande ATLAS est une liste de commandes pour ATLAS à exécuter. Cette liste est stockée sous forme de fichier texte ASCII qui peut être préparé dans DECKBUILD ou en utilisant n'importe quel éditeur de texte. La préparation du fichier d'entrée en DECKBUILD est préférée, et peut être facilitée par l'utilisation appropriée du menu Commandes de DECKBUILD. Le fichier d'entrée contient une séquence d'instructions. Chaque déclaration se compose d'un mot clé qui identifie la déclaration et un ensemble de paramètres. Le format général est:

<STATEMENT> <PARAMETER>=<VALUE>

Quelques conseils sur la structure appropriée des déclarations sont énumérés ci-dessous :

1. La déclaration doit venir en premier, mais après cela, l'ordre des paramètres dans une instruction n'est pas important.
2. Il est seulement nécessaire d'utiliser suffisamment de lettres de n'importe quel paramètre pour le distinguer de tout autre paramètre sur la même déclaration. Ainsi, le paramètre Concentration peut-être raccourci à Conc. Cependant, le paramètre Région ne peut pas être réduit à R car il ya également le paramètre RATIO associé à la déclaration du dopage.
3. Les Valeurs Logiques peuvent être explicitement défini comme faux (False) en les faisant précéder par le symbole  $\wedge$ .
4. Toute ligne commençant par # est ignorée. Ces lignes sont utilisées comme des commentaires.
5. ATLAS peut lire jusqu'à 256 caractères sur une ligne. Cependant, il est préférable de répartir les longues déclarations d'entrée sur plusieurs lignes pour rendre le fichier d'entrée plus lisible. Le caractère \ à la fin d'une ligne indique la continuation.

L'ordre dans lequel les déclarations se produisent dans un fichier d'entrée d'ATLAS est important. Il y a cinq groupes de déclarations, et ceux-ci doivent se produire dans l'ordre correct. Ces groupes sont indiqués dans le tableau III-1.

Chaque fichier d'entrée doit contenir ces cinq groupes en ordre. Sinon, cela entraînera généralement un message d'erreur et la fin du programme, mais il pourrait également conduire à un mauvais fonctionnement du programme. Par exemple, les paramètres matériels ou modèles figurant dans le mauvais ordre ne peuvent pas être utilisés dans les calculs. L'ordre des déclarations dans la définition du maillage, la définition structurelle, et les groupes de la solution est également important [50].

Group		Statements
1. Structure specification	_____	MESH REGION ELECTRODE DOPING
2. Material models specification	_____	MATERIAL MODELS CONTACT INTERFACE
3. Numerical method selection	_____	METHOD
4. Solution specification	_____	LOG SOLVE LOAD SAVE
5. Results analysis	_____	EXTRACT TONYPLOT

**Tableau III-1** : Groupes de commande ATLAS avec les déclarations de base dans chaque groupe

### III.5 Contour général de construction d'ATLAS:

Dans cette simulation, la cellule solaire à hétérojonction (AlGaAs/GaAs) est définie graphiquement dans ATLAS via l'interface Deckbuild. Afin de bien définir une cellule, il est nécessaire d'entrer non seulement les dimensions, mais aussi les propriétés des matériaux. L'organigramme suivant sur la figure III-6 peut clarifier les étapes pour construire chaque modèle.

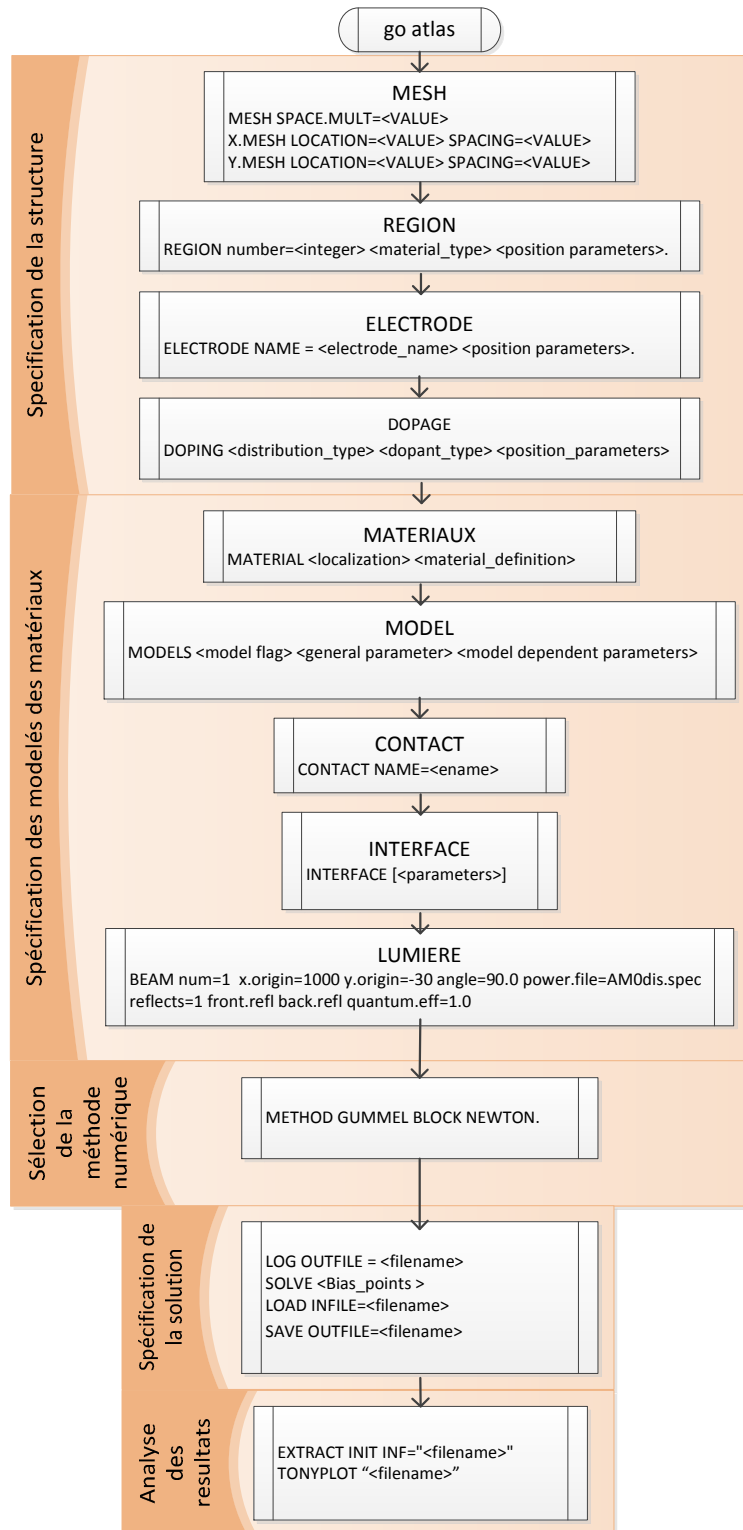


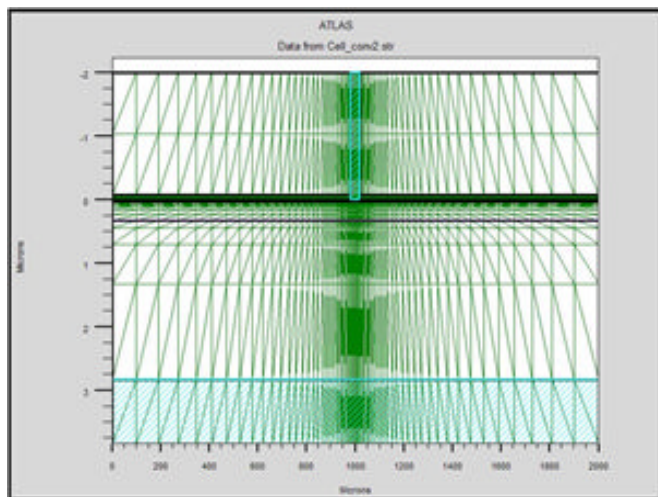
Figure III-5: Organigramme des étapes de construction d'un modèle sur ATLAS.

### III.5.1 Mesh :

La première étape dans la construction d'un dispositif après la déclaration go atlas, est de définir le maillage. Le maillage est une grille qui recouvre la zone physique dans lequel le dispositif est construit et simulé. Le maillage est simplement réalisé par une série de lignes horizontales et verticales définies par l'utilisateur avec un espacement entre eux [10].

Le maillage joue un rôle important pour l'obtention de bonnes simulations. Celui-ci doit être fait avec la plus grande attention pour garantir la fiabilité des résultats. Le choix de maillage doit être fait de façon à avoir un compromis entre la vitesse d'exécution et l'exactitude des résultats [53].

Un exemple de maillage créé dans ATLAS est illustré dans la figure III-6.



```
##x.mesh
x.mesh loc=0 spac=100
x.mesh loc=980 spac=5
x.mesh loc=1020 spac=5
x.mesh loc=2000 spac=100
#
##y.mesh
y.mesh loc=-2 spac=5
y.mesh loc=-0.08 spac=0.04
y.mesh loc=0 spac=0.0125
y.mesh loc=0.5 spac=1.25
y.mesh loc=10 spac=5
v.mesh loc=11 spac=5
```

Figure III-6: Atlas mesh.

### III.5.2 Régions :

La déclaration de la région est utilisée pour séparer l'instruction du maillage initial en blocs distincts et définit les paramètres matériels initiaux qui peuvent être désignés plus tard par des numéros de région. Tous les domaines maillés d'une structure doivent être assignés à une région et les régions doivent être ordonnées de la plus basse vers la plus élevée. Par exemple, la région 5 ne peut pas être définie avant la région 4 [6].

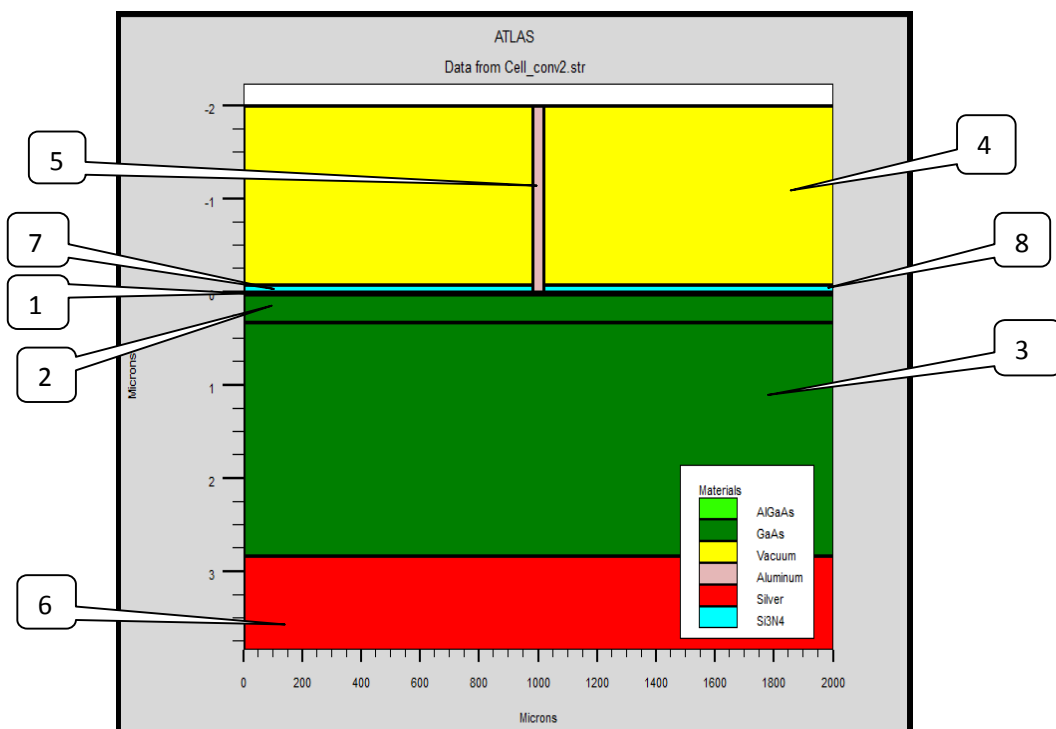
La cellule solaire à hétérojonction (AlGaAs/GaAs) est décrite par les commandes de DeckBuild ainsi que les lignes de la région comme il est illustré dans la figure III-7.



```

region num=1 material=AlGaAs x.comp=0.099 x.min=0 x.max=2000 y.min=0 y.max=0.03
region num=2 material=GaAs x.min=0 x.max=2000 y.min=0.03 y.max=0.33
region num=3 material=GaAs x.min=0 x.max=2000 y.min=0.33 y.max=2.83
region num=4 material=vacuum x.min=0 x.max=2000 y.min=-2 y.max=0
region num=5 material=aluminum x.min=980 x.max=1020 y.min=-2 y.max=0
region num=6 material=silver x.min=0 x.max=2000 y.min=2.83 y.max=3.83
region num=7 material=SiN x.min=0 x.max=980 y.min=-0.08 y.max=0
region num=8 material=SiN x.min=1020 x.max=2000 y.min=-0.08 y.max=0

```



**Figure III-7 :** Régions créées dans la cellule à hétérojonction (AlGaAs/GaAs)

### III.5.3 Electrode :

La définition des électrodes permet de réaliser les contacts Grille, Anode et Cathode [54]. Cependant, SILVACO ATLAS a une limite de 50 électrodes qui peuvent être définis [3].

D'après la figure III-8, la déclaration des électrodes est définie pour l'anode et la cathode. A noter que la cathode est définie avec de l'argent en tant que matériau. La localisation par x et y

correspond à la région 6 précédemment définie (figure III-7). L'anode est définie avec l'Aluminium comme matériau et définie dans la région 5 (figure III-7).

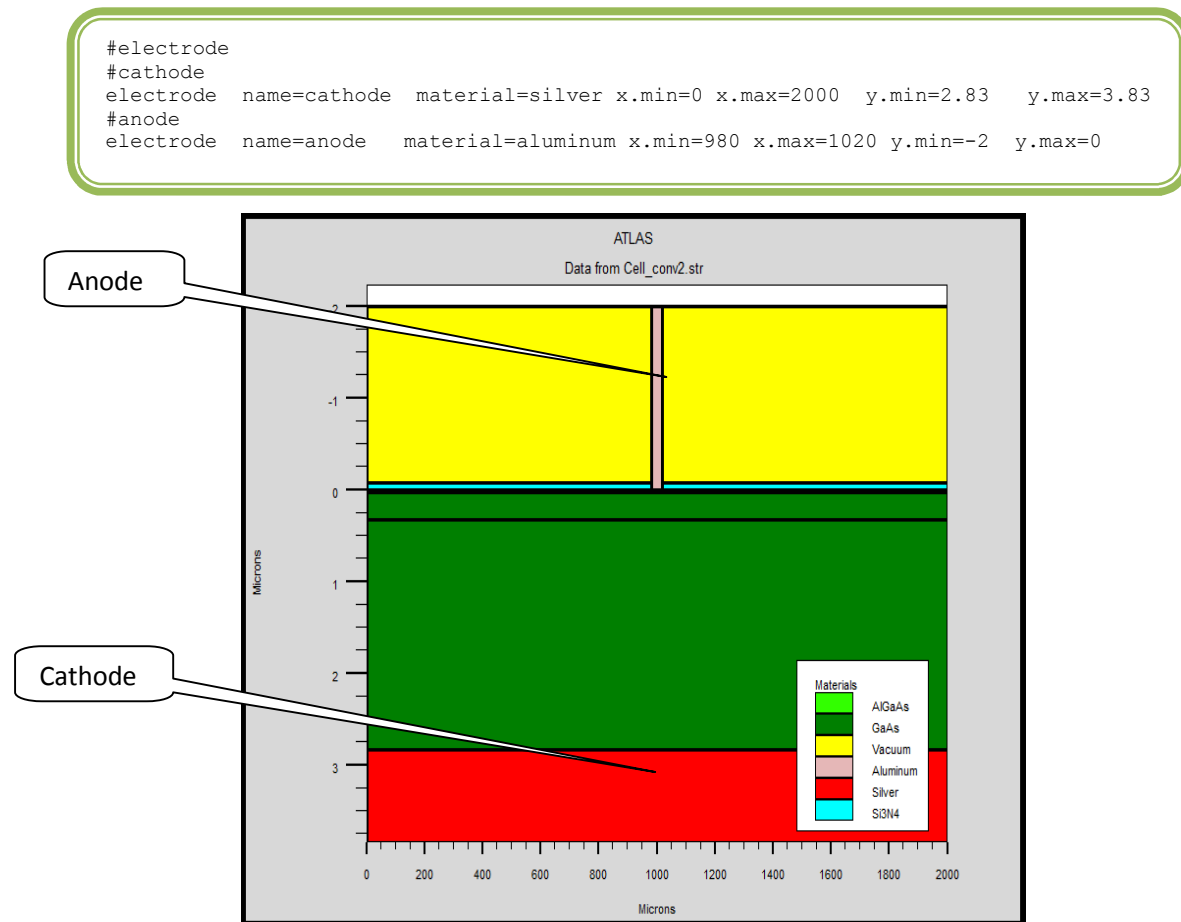


Figure III-8 : Déclaration des Électrodes dans ATLAS.

### III.5.4 Dopage :

Le dernier aspect de la construction de la structure est le dopage. Le dopage peut être de type n ou p, aussi la distribution peut être uniforme, gaussien, etc... [54].

Dans la figure III-9, les types et les niveaux de dopage sont définis.

```
doping uniform region=1 p.type conc=2e18 x.min=0 x.max=2000
doping uniform region=2 p.type conc=2e18
doping uniform region=3 n.type conc=2e17
```

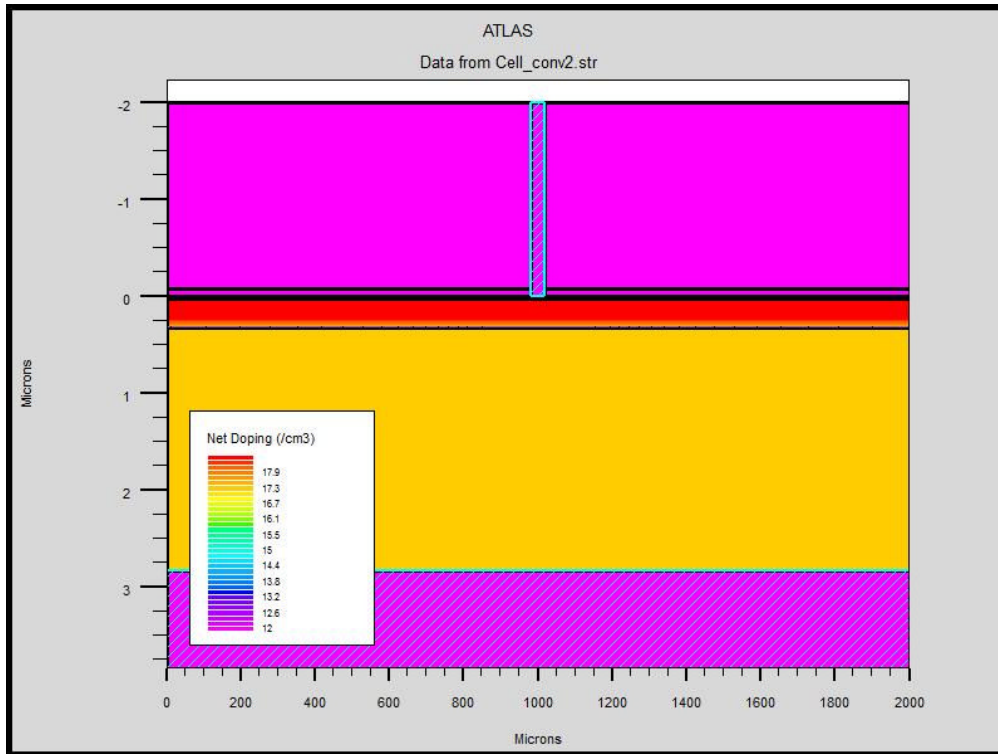


Figure III-9 : ATLAS DOPAGE.

### III.5.5 Matériel :

Une fois que la structure est complètement assemblée, les matériaux utilisés pour construire le dispositif doivent eux-mêmes être définis. La déclaration matérielle permet la spécification de certains paramètres de base. Ces valeurs peuvent s'appliquer à un matériau ou à une région [49].

La capacité la plus importante que les déclarations matérielles permettent est la création des matériaux définis par l'utilisateur. L'utilisateur peut utiliser arbitrairement n'importe quel matériau lors de la définition d'une structure, puis modifier l'ensemble de ses propriétés pour correspondre à celle d'un matériau désiré. Bien que le matériel porte le nom du matériau choisi, il agira fonctionnellement comme n'importe quel matériau l'utilisateur le désire [1].

**III.5.6 Modèles physiques :**

Les modèles physiques se répartissent en cinq catégories: la mobilité, la recombinaison, les statistiques des porteurs, l'ionisation par impact, et l'effet tunnel.

Le choix du modèle dépend des matériaux choisis pour la simulation. L'exemple ci-dessous active plusieurs modèles.

MODELS CONMOB FLDMOB SRH

CONMOB est le modèle de mobilité dépendant de la concentration du dopage. FLDMOB est le modèle de mobilité dépendant du champ électrique parallèle. SRH est le modèle Shockley-Read-Hall pour les statistiques des porteurs de charge [3].

**III.5.7 Contacts :**

Indique les attributs physiques d'une électrode (résistivité, travail de sortie,...) [54].

**III.5.8 Interface :**

Indique les paramètres d'interface aux frontières des semi-conducteurs ou des isolants. Tous les paramètres s'appliquent seulement aux nœuds de frontière exceptés là où ils sont déjà indiqués [54].

**III.5.9 Lumière :**

Lorsque l'éclairage est important pour un dispositif (comme dans les cellules solaires), il y a la possibilité d'utiliser un certain nombre de sources lumineuses et d'ajuster leur emplacement, l'orientation et l'intensité. Le spectre de la lumière peut être décrit avec tous les détails nécessaires [13].

**III.5.10 Méthode de la solution :**

ATLAS contient plusieurs méthodes numériques pour calculer les solutions aux problèmes de dispositif à semi-conducteur. Il existe trois principaux types de méthodes numériques. La première méthode est la méthode de GUMMEL qui est utile lorsque le système d'équations est faiblement couplé mais a seulement la convergence linéaire. La méthode suivante est méthode de NEWTON, qui est utile lorsque le système d'équations est fortement couplé et a convergence quadratique. Cette méthode prend plus de temps pour résoudre les quantités qui sont essentiellement constantes ou faiblement couplées et exige également une estimation initiale plus

précise du problème pour obtenir la convergence. La dernière méthode est la méthode des blocs qui peut fournir des temps de simulation plus rapides [10].

### **III.5.11 Spécification de la solution :**

Cette section de la plate-forme d'entrée est où la simulation fait ses calculs à résoudre pour le dispositif spécifié. Elle est divisée en quatre parties : Log, Solve, Load, and Save.

L'instruction Log crée le fichier de sauvegarde de l'état d'équilibre, transitoires ou DC, données déterminées par une déclaration Solve après la déclaration Log.

La déclaration Solve suit une instruction Log et calcule les informations relatives à un ou plusieurs points de polarisation.

Les instructions Load et Save sont utilisés ensemble pour aider à créer de meilleures estimations initiales pour les points de polarisation. L'instruction Save sert d'abord à stocker toutes les informations sur les points de polarisation, et plus tard l'instruction Load est utilisée pour récupérer ces informations et l'aide dans la solution [10].

### **III.5.12 Extraction des données et traçage :**

Une fois qu'une solution est trouvée pour le problème du dispositif, l'information peut être visualisée graphiquement avec TONYPLOT. En plus, les paramètres des dispositifs peuvent être extraits par la déclaration EXTRACT [3].

### **III.6 Conclusion:**

Dans ce chapitre, nous avons présenté une description relativement détaillée sur le logiciel de simulation SILVACO-ATLAS. Nous avons défini sa structure, ses outils et ses capacités permettant de calculer tous les paramètres internes et externes liés à la cellule solaire et générer ainsi ses caractéristiques électriques soit à l'obscurité ou sous éclairage comme la caractéristique densité de courant – tension ( $J-V$ ) et la réponse spectrale ; une étude qui fera en détail l'objet du prochain chapitre pour les cellules solaires à hétérojonction (AlGaAs / GaAs).