

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
République Algérienne Démocratique et Populaire
وزارة التعليم العالي و البحث العلمي
Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique

Université Mohamed Khider – Biskra
Faculté des Sciences et de la technologie
Département : Génie Electrique.
Ref :.....



جامعة محمد خيضر بسكرة
كلية العلوم و التكنولوجيا
قسم: الهندسة الكهربائية
المرجع:.....

Mémoire présenté en vue de l'obtention
du diplôme de
Magister en Electronique

Option
Signaux et communications

**Modélisation des cellules solaires en InGaN
en utilisant Atlas Silvaco.**

Présenté par :

Yacine MAROUF

Soutenu publiquement le: 27/06/2013.

Devant le jury composé de :

Pr. SENGOUGA Nouredine. Professeur. Président.
université de Biskra.

Pr. DEHIMI Lakhdar. Professeur. Directeur de mémoire
université de Batna.

Dr. BENAKCHA A/hamid. Professeur. Examineur
université de Biskra.

Dr. TOBECHE Souad. Professeur. Examineur
université de Biskra.

Table des matières

<i>Table des matières</i>	<i>I</i>
<i>Résumé</i>	<i>V</i>
<i>Summary</i>	<i>V</i>
<i>ملخص</i>	<i>V</i>
<i>Remerciements</i>	<i>VI</i>
<i>Liste des figures</i>	<i>VII</i>
<i>Liste des tableaux</i>	<i>X</i>
<i>Liste des symboles</i>	<i>XI</i>
<i>Introduction générale</i>	<i>1</i>
 <i>Chapitre 1: Les matériaux semi-conducteurs III-V.</i>	
<i>1.1 Introduction</i>	<i>4</i>
<i>1.2 Définition de semi-conducteurs III-V</i>	<i>5</i>
1.2.1 Les composés binaires	<i>5</i>
1.2.2 Les composés ternaires et quaternaires	<i>6</i>
<i>1.3 L'intérêt des nitrures d'éléments III en optoélectronique</i>	<i>7</i>
<i>1.4 Description du nitrure d'Indium-Gallium</i>	<i>8</i>
1.4.1 Caractéristiques structurelles.....	<i>8</i>
a) Structure cristalline	<i>8</i>
b) Polarisation interne et piézoélectricité	<i>10</i>
1.4.2 Propriétés électriques.....	<i>11</i>
a) Gap d'énergie interdite dans les nitrures	<i>14</i>
b) Caractère intrinsèque de type N dans les nitrures	<i>18</i>
c) Mobilité des porteurs dans les nitrures.....	<i>19</i>
d) Longueur de diffusion	<i>20</i>
1.4.3 Propriétés optiques	<i>21</i>
1.4.4 Propriétés thermiques	<i>27</i>
a) Conductivité thermique	<i>27</i>
b) Expansion thermique	<i>27</i>
<i>1.5 Conclusion</i>	<i>28</i>

Chapitre 2: Les cellules solaires.

2.1	Introduction	29
2.2	Spectre solaire.....	30
2.3	L'air masse.....	31
2.4	La bande interdite.....	33
2.5	Principe de fonctionnement d'une cellule solaire	34
2.6	Caractéristiques électriques d'une cellule solaire	35
2.7	Différents régimes de fonctionnement d'une cellule solaire.....	36
2.7.1	le régime photodiode	36
2.7.2	le régime photovoltaïque.....	37
2.8	Circuit équivalent d'une cellule photovoltaïque.....	38
2.9	Paramètres de la cellule solaire	39
2.9.1	Courant de court circuit, I_{cc}	39
2.9.2	Tension de circuit ouvert, V_{co}	39
2.9.3	Facteur de forme, FF	39
2.9.4	Rendement de conversion, η	40
2.9.5	Réponse spectrale d'une cellule solaire.....	41
2.10	Groupement des cellules solaires.....	41
2.10.1	Branchement série	42
2.10.2	Branchement parallèle	42
2.10.3	Branchement mixte.....	43
2.11	Calcul du photo courant.....	43
2.11.1	Courant dans la région quasi neutre de type N	45
2.11.2	Courant dans la région quasi neutre de type P	46
2.11.3	Courant dans la région de charge d'espace.....	47
2.11.4	Courant total d'éclairement.....	48
2.12	Les constituants de base d'une cellule photovoltaïque	48
2.12.1	Contacts face avant et arrière	48
2.12.2	Couche anti-reflet	49
2.12.3	Texturation de surface	49

2.12.4	BSF	50
2.13	Conclusion.....	51
<u>Chapitre 3: Concept théorique des modèles physiques.</u>		
3.1	Introduction.....	52
3.2	Equations fondamentales dans les semi-conducteurs.....	52
3.2.1	Equation de Poisson	53
3.2.2	Equations de continuité.....	53
3.2.3	Equations de transport	54
a)	Diffusion	55
b)	Drift.....	56
3.3	Génération optique	56
3.4	Mécanismes de recombinaison.....	59
3.4.1	Recombinaison SRH (Schokley-Read-Hall).....	60
3.4.2	Recombinaison Auger	62
3.4.3	Recombinaison Radiative.....	65
3.4.4	Recombinaison en surface	65
3.5	Les modèles de mobilité	67
3.5.1	Modèle de mobilité « Caughey et Thomas ».....	67
3.5.2	Modèle de mobilité « Massetti »	69
3.5.3	Modèle de mobilité « Canali »	70
3.6	Rétrécissement de la bande interdite (Bandgap-Narrowing)	71
3.7	Conclusion	73
<u>Chapitre 4: Le simulateur Atlas TCAD Silvaco.</u>		
4.1	Introduction	74
4.2	Présentation d'Atlas.....	74
4.3	Ordres de commandes d'Atlas	76
4.4	Spécification de la structure	78
4.4.1	Mesh	78
4.4.2	Region	79
4.4.3	Electrodes	81
4.4.4	Doping	81

4.5	<i>Spécification des modèles des matériaux.....</i>	82
4.5.1	Matériau.....	82
4.5.2	Models	83
4.5.3	Beam	83
4.5.4	Contact	83
4.6	<i>Sélection de la méthode numérique</i>	84
4.7	<i>Spécification des solutions.....</i>	84
4.7.1	Log.....	85
4.7.2	Solve.....	85
4.7.3	Load et save	85
4.8	<i>Analyse des résultats</i>	86
4.9	<i>Organigramme de simulation.....</i>	87
4.10	<i>Conclusion.....</i>	89
<u>Chapitre 5: Résultats de simulation.</u>		
5.1	<i>Introduction</i>	90
5.2	<i>Simulation sous SILVACO/Atlas</i>	91
5.2.1	Description de la structure	91
5.2.2	Paramètres de simulation.....	91
5.2.3	Modèles physiques utilisés dans la simulation.....	92
a)	Mobilité	92
b)	Recombinaison	93
5.2.4	Procédure	94
a)	L'influence du dopage	94
b)	Influence de l'épaisseur de l'émetteur d_E	97
c)	Performances optimales de la cellule $In_{0.65}Ga_{0.35}N$	99
d)	Influence de la longueur de diffusion sur les performances de la cellule	99
e)	Effet de la couche BSF sur les performances de la cellule	101
f)	Effet de la couche Fenêtre sur les performances de la cellule.....	103
g)	Comparaison entre la cellule solaire de référence et celles avec BSF et Fenêtre	105
h)	Comparaison avec des travaux similaires	106
5.3	<i>Conclusion.....</i>	107
<i>Conclusion générale.....</i>		108
<i>Bibliographie.....</i>		110

Résumé

Depuis plus d'une décennie, les matériaux III-V sont intensément étudiés pour des applications optoélectroniques dans l'UV et le bleu. En 2003, le gap d'énergie de l'InN est abaissé à 0,7 eV ouvrant la voie à des alliages pouvant couvrir quasiment tout le spectre solaire. En particulier, l'alliage InGaN fut largement étudié pour des applications photovoltaïques grâce à sa large couverture spectrale, ses bonnes caractéristiques électriques et sa résistance à de fortes puissances.

Dans ce contexte, nous avons étudiés le fonctionnement des cellules photovoltaïques à base d'InGaN 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. Ainsi, plusieurs paramètres sont retenus : le dopage et le dimensionnement des régions n et p de la cellule, ainsi que dopage et le dimensionnement des couches BSF et Fenêtre.

Mots clés : Modélisation, Nitrure d'Indium Gallium, cellules solaires, simulation numérique, Atlas/Silvaco,.

Summary

For over a decade, the III-V materials are intensively studied for optoelectronic applications in the UV and blue. In 2003, the energy gap of InN is lowered to 0.7 eV paving the way for alloys can cover almost the entire solar spectrum. In particular, the InGaN alloy was extensively studied for photovoltaic applications due to its wide spectral coverage, its good electrical properties and resistance to high powers.

In this context, we studied the operation of photovoltaic cells based on InGaN by two-dimensional numerical simulation under illumination with AM1.5 spectrum performed under SILVACO / ATLAS. We define a reference cell with a set of physical parameters, in order to analyze their influence on the conversion efficiency. Thus, several parameters are considered: Doping and dimensions of n and p regions of the cell, as well as doping and sizing window and BSF layers.

Keywords : Modelling, Indium Gallium Nitride, solar cells, numerical simulation, Atlas/Silvaco.

ملخص

لأكثر من عقد، درست المواد V-III بشكل مكثف لاستعمالها في التطبيقات الكهروضوئية و خاصة في المجال الطيفي الموافق للأشعة فوق البنفسجية والزرقاء. أسفرت هذه الدراسات في عام 2003 عن تخفيض فجوة الطاقة لـ InN إلى 0.7 eV، مما فتح الطريق للسبائك المشكلة من InN لتغطية الطيف الشمسي بأكمله تقريباً. على وجه الخصوص، سبائك InGaN التي درست بشكل واسع للتطبيقات الكهروضوئية نظراً لخصائصها الكهربائية الجيدة، مقاومتها لتوترات عالية وتغطيتها الواسعة للطيف الشمسي.

في هذا السياق، قمنا بدراسة الخلايا الضوئية باستعمال سبائك InGaN عن طريق المحاكاة ثنائية الأبعاد تحت إضاءة AM1.5 بواسطة البرنامج ATLAS / SILVACO. نحدد خلية مرجعية بواسطة خصائصها الفيزيائية والتكنولوجية من أجل دراسة تأثيرها على مردودية التحويل. على هذا الأساس، تم تحديد العديد من الخصائص: أبعاد و تركيز المناطق p و n للخلية، وكذلك أبعاد و تركيز طبقات الحقل الخلفي BSF والنافذة Fenêtre.

الكلمات المفتاحية : النمذجة، نترات الأنديموم والغاليوم، الخلايا الشمسية، المحاكاة الرقمية، أطلس/سيلفاكو.

Remerciements

Toute ma reconnaissance va en premier lieu à mon encadreur Professeur L.DEHIMI, avec qui j'ai eu la chance de travailler, d'être dirigé, d'être enseigné. Merci de m'avoir initié au photovoltaïque, de m'avoir appris à faire des cellules solaires. Mon manuscrit de mémoire n'aurait jamais vu le jour sans l'aide précieuse de sa part. Je tiens à le remercier sincèrement pour sa disponibilité, sa gentillesse et sa patience.

Ce travail a été effectué au Laboratoire des matériaux métalliques et semi-conducteurs (LMSM) de l'université mohamed kheïdar de BISKRA, sous la direction de monsieur le professeur N.SENGOUGA. Je le remercie sincèrement pour m'avoir accueillie au sein du laboratoire et d'avoir accepté de présider le jury.

Je suis très reconnaissant aux membres du jury, le professeur A.BENAKCHA et le docteur S.TOBECHE, qui m'ont fait l'honneur d'examiner mon travail. Je les remercie pour le temps et de l'attention qu'ils ont consacrés à la lecture de mon manuscrit et pour les nombreuses améliorations qu'ils y ont apportées.

J'adresse mes vifs remerciements à mon frère monsieur A.BENCHADI pour m'avoir accueillie dans sa maison je ne saurais trop le remercier pour l'hospitalité et le confort qu'il m'a réservé durant ma première année d'étude.

Évidemment, je ne peux clore ces lignes sans une pensée pour mes proches, ma famille et mes amis. Une attention toute particulière va à ma femme et mes deux enfants, qui représentent le support de ma vie, ma femme qui a été toujours patiente avec moi et m'a toujours soutenu et sans elle l'aboutissement de ce travail n'aurait pas été possible. Je remercie également mes collègues de la direction du commerce d'Oum El Bouaghi, pour leurs soutien et leurs encouragements et mes collègues de magistère pour l'année si agréable qu'on a passée ensemble.

Pour finir, je tiens à remercier toute personne qui a contribué de près ou de loin à la réussite de ce travail.

Liste des figures

Figure 1.1	Tableau périodique partiel [7].	5
Figure 1.2	Bande interdite de divers composés semi-conducteurs en fonction de leur paramètre de maille.	7
Figure 1.3	Structure wurtzite, exemple du GaN.	9
Figure 1.4	Structure cubique zinc-blende, exemple du GaN.	9
Figure 1.5	Diagramme des énergies pour un matériau. q est la charge élémentaire, V le potentiel électrostatique pouvant régner dans le matériaux, χ l'affinité électronique, Φ le travail de sortie et φ le potentiel d'ionisation.	11
Figure 1.6	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.	13
Figure 1.7	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 [21].	14
Figure 1.8	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 [21].	14
Figure 1.9	Evolution du gap d'énergie interdite de l' $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}$ en fonction de la concentration du Ga. Pour le coté riche en Ga, La courbe en trait plein correspond à l'ajustement des points en utilisant un paramètre de courbure de $b=1,43$ eV. La courbe en pointillés est l'ajustement des points du coté riche en Ga en prenant en compte 1,9 eV pour le gap de l'InN.	16
Figure 1.10	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 [28].	17
Figure 1.11	Evolution du gap d'énergie pour InN en fonction de la température. Les données expérimentales de photoluminescence sont également montrées [29].	17
Figure 1.12	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 [33].	18
Figure 1.13	Concentration d'électrons en fonction de la température dans $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}$ avec différentes concentrations d'indium [32].	19
Figure 1.14	Mobilité des porteurs libres dans $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}$ en fonction de la température [32].	20
Figure 1.15	Longueur de diffusion des trous dans GaN en fonction de la concentration d'électrons [39].	21
Figure 1.16	Indice de réfraction du GaN entre 0.35 et 10 μm [42].	22
Figure 1.17	Estimation de la variation de l'indice de réfraction dans l'InGaN, le GaAlN et l'InAlN [37].	23

Figure 1.18 Schéma des chemins optiques au niveau d'un dioptre plan. Le rayon incident arrive sur le dioptre avec un angle θ_1 par rapport à la normale. Une partie du rayon est réfléchi avec le même angle, appelé θ_1' , l'autre partie du rayon est transmise avec un angle θ_2 par rapport à la normale. Dans cet exemple, on a pris $n_1 < n_2$, donc $\theta_1 > \theta_2$	24
Figure 1.19 Courbe de transmission (noire) et de réflexion (rouge) du GaN.	26
Figure 2.1 Effet photovoltaïque [46].	29
Figure 2.2 Spectre électromagnétique [47].	30
Figure 2.3 Différentes constantes d'illumination.	31
Figure 2.4 Distribution spectrale de l'énergie solaire AM0 (bleu) et AM1.5 (rouge) [49].	32
Figure 2.5 Effet de l'énergie de la lumière sur différentes bandes interdites E_g [6].	34
Figure 2.6 Structure et diagramme de bande d'une cellule photovoltaïque [50].	35
Figure 2.7 Caractéristiques $I(V)$ à l'obscurité et sous éclairage d'une cellule photovoltaïque.	36
Figure 2.8 Caractéristiques $I(V)$ d'une cellule solaire	38
Figure 2.9 Schéma équivalent d'une cellule solaire [53].	38
Figure 2.10 Caractéristiques $I(V)$ et $P(V)$ d'une cellule solaire.	40
Figure 2.11 Association en série de N_s cellules solaires [53].	42
Figure 2.12 Association en parallèle de N_p cellules solaires identiques [53].	42
Figure 2.13 Association mixte de NSP branches et de NMS modules composés de N_c cellules solaires identiques.	43
Figure 2.14 Dimensions de la cellule solaire.	44
Figure 2.15 Composition d'une cellule photovoltaïque.	48
Figure 3.1 Les angles d'incidence, de réflexion et de transmission d'un rayon incident de lumière.	57
Figure 3.2 L'évolution de l'indice de réfraction n et le coefficient d'extinction k du silicium en fonction de la longueur d'onde [58].	58
Figure 3.3 Mécanisme de recombinaison Schokley-Read-Hall (SRH).	61
Figure 3.4 Mécanisme de recombinaison Auger. L'excès d'énergie issu de la recombinaison peut être transféré à un électron (a) ou à un trou (b).	63
Figure 3.5 Influence du dopage sur les durées de vie Auger et SRH dans le volume du Silicium [66].	65
Figure 3.6 Mécanisme de recombinaison en surface.	66
Figure 3.7 Vitesse de recombinaison effective de surface en fonction du niveau de dopage [67].	66
Figure 4.1 Entrées et sorties d'Atlas [61].	75
Figure 4.2 Ordre des groupes des commandes d'Atlas (Les commandes fondamentales afférentes) [61].	76
Figure 4.3 Définition du maillage avec Atlas [76].	79
Figure 4.4 Définition des régions avec Atlas [76].	80
Figure 4.5 Attribution de matériaux pour les régions avec Atlas [76].	80

Figure 4.6	Définition des électrodes avec Atlas [76].....	81
Figure 4.7	Types et niveau de dopage avec Atlas [76].	82
Figure 4.8	Courbe de l'échantillon IV [76].....	86
Figure 4.9	Organigramme du programme de simulation [77].	88
Figure 5.1	Structure de la cellule à simuler sous SILVACO/Atlas.	91
Figure 5.2	Influence du dopage de l'émetteur Na sur le courant de court circuit I_{cc} ($N_a=N_d$).	95
Figure 5.3	Influence du dopage de l'émetteur sur la tension à circuit ouvert ($N_a=N_d$).	96
Figure 5.5	Influence de l'épaisseur de l'émetteur sur le rendement de la cellule.....	98
Figure 5.6	Influence de l'épaisseur de l'émetteur sur le courant de court circuit.....	98
Figure 5.7	Caractéristique I (V) de la cellule $In_{0.65}Ga_{0.35}N$	99
Figure 5.8	Influence de la longueur de diffusion sur le rendement.	100
Figure 5.9	Influence de la longueur de diffusion sur le courant de court circuit.	100
Figure 5.10	Influence de la longueur de diffusion sur la tension à circuit ouvert.....	101
Figure 5.11	Effet de la couche Bsf sur le rendement.	102
Figure 5.12	Effet de la couche Bsf sur le courant de court circuit.	102
Figure 5.13	Effet de la couche Bsf sur la tension à circuit ouvert.....	103
Figure 5.14	Effet de la couche fenêtre sur le rendement.....	104
Figure 5.15	Effet de la couche fenêtre sur le courant de court circuit.....	104
Figure 5.16	Effet de la couche fenêtre sur la tension à circuit ouvert.	105
Figure 5.17	Caractéristiques $I(V)$ des trois cellules.	105

Liste des tableaux

Tableau 1.1 Paramètres des principaux composés binaires III-V.....	6
Tableau 1.2 Paramètres structuraux a, c et u pour le GaN et l'InN [14,15]	9
Tableau 1.3 Les valeurs de la polarisation spontanée du GaN et InN [16].....	10
Tableau 1.4 Constantes piézoélectriques pour le GaN et l'InN.	11
Tableau 1.5 Paramètres de Varshni et gap d'énergie à 0 K et 300 K du GaN et de l'InN.....	17
Tableau 1.6 Résumé des propriétés électriques du GaN et de l'InN à 300 K.....	21
Tableau 1.7 Résumé des paramètres optiques du GaN et de l'InN, d'après la référence [11], sauf indiqué.....	26
Tableau 1.8 Résumé des propriétés thermiques du GaN et de l'InN.....	27
Tableau 2.1 Longueurs d'ondes approximatives des différentes couleurs dans le vide [48].....	31
Tableau 2.2 Résumé des différentes distributions spectrales.	33
Tableau 2.3 Bandes interdites de quelques semi conducteurs.....	33
Tableau 3.1 Paramètres par défaut du modèle Schokley-Read-Hall dans Silvaco.....	61
Tableau 3.2 Paramètres par défaut du modèles CONSRH dans Silvaco [61].	62
Tableau 3.3 Paramètres par défaut des équations (3.34) et (3.35) dans Silvaco.	62
Tableau 3.4 Paramètres par défaut du modèle de recombinaison standard AUGER dans Silvaco..	63
Tableau 3.5 Paramètres par défaut des équations 3.38 et 3.39 dans Silvaco.....	64
Tableau 3.6 Paramètres par défaut des équations (3.38) et (3.39) dans Silvaco.....	64
Tableau 3.7 Paramètres utilisés par défaut dans Silvaco pour le modèle de mobilité qui dépend du champ électrique.....	68
Tableau 3.8 Paramètres utilisés par défaut dans Atlas pour le modèle de mobilité dépendant du dopage et de la température [61].	69
Tableau 3.9 Paramètres utilisés par défaut dans Atlas pour le modèle de mobilité dépendant du dopage et de la température [61].	69
Tableau 3.10 Paramètres utilisés par défaut des équations (3.47) et (3.48) dans Atlas pour le modèle de mobilité dépendant du dopage et de la température [61].	69
Tableau 3.11 Paramètres par défaut dans Silvaco pour le modèle de mobilité (Masetti) des électrons en introduisant le phosphore dans le silicium.....	70
Tableau 3.12 Paramètres utilisés par défaut dans Silvaco pour le modèle de (Masetti) des trous en introduisant le bore dans le silicium.....	70
Le modèle de Canali peut être employé pour le silicium jusqu' à 430K	70
Tableau 3.13 Paramètres utilisés défaut par défaut dans Silvaco pour le modèle de Canali.....	71
Tableau 3.14 Paramètres utilisés par défaut dans Silvaco pour les modèles de Benett-Wilson et Del-Alamo.....	72
Tableau 5.1 Paramètres de simulation à 300 K pour une concentration de 65% de l'InN [79].....	91
Tableau 5.2 Paramètres utilisés dans le calcul de la mobilité des porteurs en fonction..... de la concentration de dopage [78].	92
Tableau 5.3 Paramètres photovoltaïques des trois cellules.....	106
Tableau 5.4 Comparaison avec des travaux similaires.....	107

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}
q	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}
ϵ_1	Déformation dans le plan		s.d
ϵ_3	Déformation selon l'axe c		s.d
P_{piezo}	Polarisation piézoélectrique		C.m^{-2}
P_{sp}	Polarisation interne (ou spontanée)		C.m^{-2}
u	Paramètre interne		Å
Paramètres électriques			
B	Paramètre de courbure dans la loi de Vegard		eV
D	Coefficient de diffusion des porteurs		$\text{cm}^{-2}.\text{s}^{-1}$
Δn	Densité d'électrons en excès dans un matériau N		cm^{-3}
Δp	Densité des trous en excès dans un matériau P		cm^{-3}
ϵ_r	Permittivité relative du matériau		F.m^{-1}
$\tilde{\epsilon}$	Permittivité relative complexe		
$E \leftrightarrow \xi$	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
G	Taux de génération pour les électrons et les trous		
I	Courant		A
I_{cc}	Courant de court-circuit		A
$I_m = I_{\text{max}}$	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}

Paramètres électriques (suite)

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	Taux de recombinaison pour les électrons et les trous	
R_s	Résistance de série	Ω
R_{sh}	Résistance parallèle	Ω
ρ	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	Susceptibilité du matériau	s.d
χ	Affinité électronique	eV
ψ	Potentiel électrostatique	V

Paramètres optiques

α	Coefficient d'absorption	cm^{-1}
k	Coefficient d'extinction (atténuation)	s.d
n	Indice de réfraction	s.d
\tilde{n}	Indice de réfraction complexe	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}

Introduction générale

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]. 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].

L'épuisement de ces ressources fossiles, à plus ou moins long terme, et la lutte contre les émissions de gaz à effet de serre rendent urgentes la diversification des sources d'énergie : l'utilisation et le développement des énergies renouvelables.

On considère qu'une énergie est renouvelable, toute source d'énergie qui se renouvelle assez rapidement pour être considérée comme inépuisable (d'où son nom). Les énergies renouvelables sont issues de phénomènes naturels réguliers ou constants provoqués principalement par le Soleil (l'énergie solaire mais aussi hydraulique, éolienne et biomasse...), la Lune (énergie marémotrice, certains courants: énergie hydrolienne...) et la Terre (géothermique profonde...).

Le rayonnement solaire constitue une ressource énergétique non polluante, la mieux partagée sur la terre et la plus abondante : La quantité d'énergie libérée par le soleil (captée par la planète terre) pendant une heure pourrait suffire à couvrir les besoins énergétiques mondiaux pendant un an.

Une partie de ce rayonnement peut être exploitée pour produire directement de la chaleur (solaire thermique) ou de l'électricité : c'est l'énergie solaire photovoltaïque. Ce mode de production ne nécessite pas forcément de réseau de distribution. En effet on peut produire de l'énergie électrique là où on la consomme : Villages, maisons isolées (un tiers de la population mondiale n'a pas accès à l'énergie électrique), Relais de communication, Pompes à eau, Eclairage des routes, ... [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].

L'industrie des cellules solaires s'est développée autour du silicium, le matériau le plus couramment utilisé pour les applications terrestres en raison de son faible coût. Cependant, depuis quelques années, cette même industrie s'intéresse à d'autres matériaux répondant aux normes de rendement élevé, de poids et de durées de vie importantes exigées par les applications spatiales. Les cellules photovoltaïques sont rapidement devenues des cellules multicouches basées sur divers matériaux inorganiques, elles présentent des rendements très élevés, une bonne fiabilité et une faible détérioration de leur caractéristique au cours du temps (sur au moins 20 ans). De nouveaux matériaux ont vu le jour, tel que le Nitrure d'Indium Gallium « InGaN » qui a subi des recherches approfondies depuis 2002 en tant que matériau photovoltaïque. En faisant varier la composition de nitrure d'indium et de nitrure de gallium au sein de l'InGaN, la bande interdite de ce matériau semi-conducteur peut être changée. La gamme de bande interdite de l'InGaN coïncide avec la partie visible du spectre solaire. Ainsi, une cellule solaire à haut rendement peut être développée par l'utilisation de multicouches de l'InGaN [6].

L'objectif de notre travail est la modélisation d'une cellule solaire à base du nitrure d'Indium Gallium InGaN, par simulation en utilisant le logiciel Atlas TCAD Silvaco.

Ce manuscrit est constitué de cinq chapitres, il est organisé comme suit :

- Le premier chapitre présente les matériaux semi-conducteurs III-V ainsi que les principales propriétés des nitrures de Gallium GaN, d'Indium InN et de leur alliage l'InGaN.
- Le deuxième chapitre est consacré à l'étude des cellules solaires leurs principe de fonctionnement, leurs caractéristiques électriques, leurs paramètres et leurs constituants de base.
- 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.

- Le quatrième chapitre est consacré à l'exposition du logiciel de simulation Atlas de la société SILVACO et sa mise en œuvre dans le cadre de notre travail.
- Enfin, dans le cinquième chapitre, nous avons effectué des simulations de cellules photovoltaïques à base d'InGaN. Afin de modéliser une cellule la plus optimale, Nous avons fait varier les paramètres technologiques (épaisseurs, dopages) de ses différentes couches afin d'optimiser ses performances.
- Ce travail se termine par une conclusion générale des résultats obtenus au cours de simulation et nous citerons quelques critères s'inscrivant dans la perspective d'une meilleure efficacité des cellules photovoltaïques à base d'InGaN.

Chapitre 1 :

Les matériaux semi-conducteurs III-V

1.1 Introduction

Dans l'ensemble des matériaux, les semi-conducteurs constituent une classe bien définie, avec des propriétés physiques particulières qui sont sources d'intérêt au plan de la connaissance fondamentale et à celui des applications. Ces deux facteurs indissociables font l'importance de ces matériaux, malgré le nombre limité d'éléments et de composés semi-conducteurs.

Principalement remarquables par leurs propriétés électroniques, les semi-conducteurs interviennent dans presque tous les équipements électroniques et optiques. La plus grande partie des composants (transistors, diodes, et ce qu'on appelle puce en générale) sont réalisés en silicium qui joue un rôle prépondérant, sa technologie et sa connaissance théorique ont atteint des niveaux inégalés.

En électronique rapide et en optoélectronique, les propriétés du silicium sont insuffisantes (mobilités des porteurs relativement petites et transitions électroniques indirectes au seuil d'absorption optique). Dans de telles applications, les composés semi-conducteurs III-V sont préférables. Les propriétés de ces matériaux sont très intéressantes pour les performances de ces dispositifs.

Parmi ces semi-conducteurs, on trouve principalement le nitrure de gallium-indium (InGaN) qui est au centre de ce travail. Ce matériau est un semi-conducteur faisant partie de la catégorie des nitrures-III, c'est-à-dire, composé d'azote et d'éléments de la colonne III du tableau de Mendeleïev, à savoir le bore, l'aluminium, le gallium, l'indium et le thallium, voir **figure 1.1**. Le nitrure de gallium-indium est un alliage entre le nitrure de gallium (GaN) et le nitrure d'indium (InN). C'est pourquoi, nous allons principalement définir les semi-conducteurs III-V puis décrire les propriétés de ces deux alliages binaires (GaN) et (InN), pour ensuite décrire les propriétés de l'InGaN qui en découlent.

1.2 Définition de 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 du tableau de la classification périodique de Mendeliev (**figure 1.1**). Ainsi de nombreux composés binaires, ternaires et quaternaires 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

Figure 1.1 Tableau périodique partiel [7].

1.2.1 Les composés binaires

Parmi tous les composés binaires possibles, tous n'ont pas 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 laquelle 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 [8], 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 [9]. A l'autre extrémité, les éléments lourds comme le thallium ou le bismuth donnent des composés à base de Gallium (GaAs, GaSb) ou d'indium (InP, InAs, InSb) dont les propriétés sont les plus intéressantes.

Le **tableau (1.1)** résume quelques paramètres pour différents matériaux de la famille III-V.

Composé III-V	Eg (ev)	m^*/m_0	μ (cm ² /VS)	a (A°)
BN	7,5			3,6150
AlP	2,45			5,4510
AlAs	2,16			5,6605
AlSb	1,58	0,12	200	6,1355
BP	2,0			4,5380
GaN	3,36	0,19	380	a=3,189 (b=5,185)
GaP	2,26	0,82	110	5,4512
GaAs	1,42	0,067	8500	5,6533
GaSp	0,72	0,042	5000	6,0959
InP	1,35	0,077	4600	5,8686
InAs	0,36	0,023	33000	6,0584
InSp	0,17	0,0145	80000	6,4794

Tableau 1.1 Paramètres des principaux composés binaires III-V [9].

1.2.2 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 sait par exemple obtenir 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: $A_x A'_{(1-x)} B$

Exemple: $Ga_x In_{(1-x)} P$, lorsque la composition exacte compte peu, on écrit tout court $GaInP$.

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

$A_x A'_y A''_{(1-x-y)} B$.

Exemple: $Ga_x In_y Al_{(1-x-y)} As$.

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 (composition).

1.3 L'intérêt des nitrures d'éléments III en optoélectronique

Les nitrures d'éléments III (GaN, AlN, InN et leurs alliages) sont des semi-conducteurs aux propriétés remarquables. La plus importante est sans conteste le faible gap d'énergie interdite de l'InN **0.7 eV [10]**. Ce dernier étend la couverture spectrale des nitrures qui couvrent maintenant de l'ultraviolet lointain avec l'AlN (**6.2 eV, soit 200 nm**) [11], à l'infrarouge moyen avec l'InN (**0.7 eV, soit 1770 nm**), en passant par l'ultraviolet proche avec le GaN (**3.39 eV, soit 365 nm**) [12] et le visible avec les alliages InGaN ou AlInN.

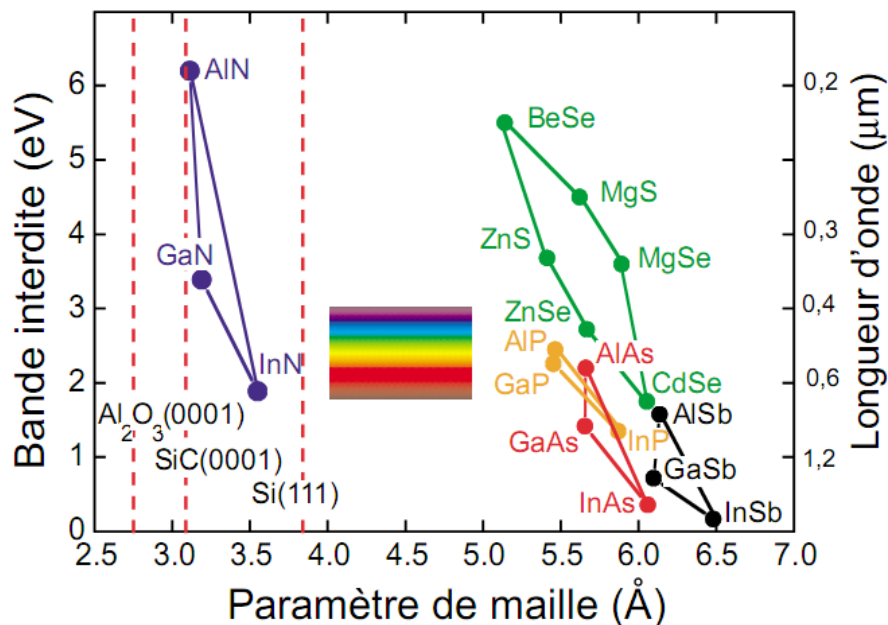


Figure 1.2 Bande interdite de divers composés semi-conducteurs en fonction de leur paramètre de maille [13].

1.4 Description du nitrure d'Indium-Gallium

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 direct, 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.

1.4.1 Caractéristiques structurales

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 1.3**). 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 [14]. 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 1.4**) est constitué 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 $a \frac{\sqrt{3}}{4}$, « a » étant la longueur du cube, Le **tableau 1.2** 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.

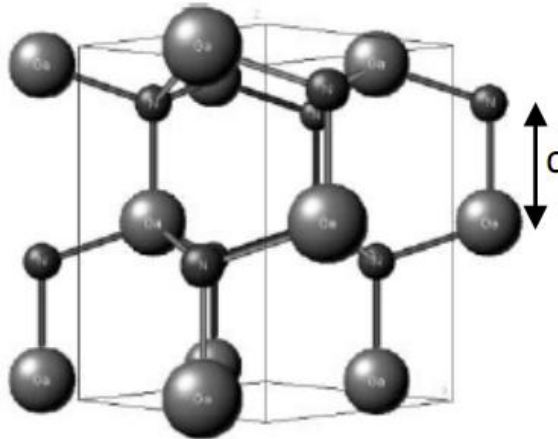


Figure 1.3 Structure wurtzite, exemple du GaN [15].

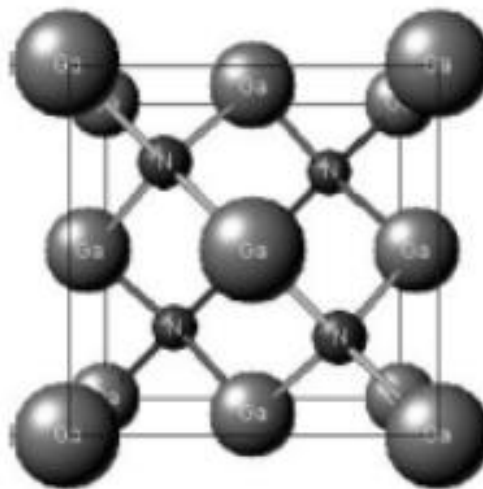


Figure 1.4 Structure cubique zinc-blende, exemple du GaN [15].

	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 1.2 Paramètres structuraux a, c et u pour le GaN et l'InN [16,17].

b) Polarisation interne et piézoélectricité

• 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-centrosymétrique, 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.

<i>Matériaux</i>	<i>GaN</i>	<i>InN</i>
c/a	1.6259	1.6116
$P_{sp}(C/m^2)$	- 0.029	- 0.032

Tableau 1.3 Les valeurs de la polarisation spontanée du GaN et InN [18].

• Polarisation piézoélectrique

Outre la polarisation interne, les nitrures-III possèdent également un caractère piézoélectrique. Cet effet est défini comme la création d'un champ électrique suite à une déformation mécanique, et réciproquement comme la création de déformations mécaniques lorsqu'on applique un champ électrique à un matériau. Il est dû au manque de symétrie dans la structure cristalline, à la nature fortement ionique des liaisons chimiques et aux déformations présentes dans le cristal (dus au désaccord de maille entre le matériau et le substrat, par exemple) [15].

La polarisation piézoélectrique peut s'exprimer sous la forme :

$$P_{piezo} = e_{33}\epsilon_3 + e_{31}(\epsilon_1 + \epsilon_2) \quad (1.1)$$

Avec

- e_{33} et e_{31} les coefficients piézoélectriques du matériau (C/m^2).
- ϵ_1 la déformation dans le plan (supposée isotopique), définie par $\epsilon_1 = \epsilon_2 = (a - a_0)/a_0$ [sans dimension (s. d)].
- ϵ_3 la déformation selon l'axe c, définie par $\epsilon_3 = (c - c_0)/c_0$ [s. d].
- a_0 et c_0 les paramètres de maille à l'équilibre [Å]

Matériaux	GaN	InN
$e_{31}[C/m^2]$	-0.49 [19] -0.32 [20]	-0.57 [19]
$e_{33}[C/m^2]$	0.73 [19,20]	0.97 [19]

Tableau 1.4 Constantes piézoélectriques pour le GaN et l'InN.

1.4.2 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.

❖ Diagramme d'énergie

Le diagramme d'énergie d'un matériau est présenté dans la **figure 1.5**.

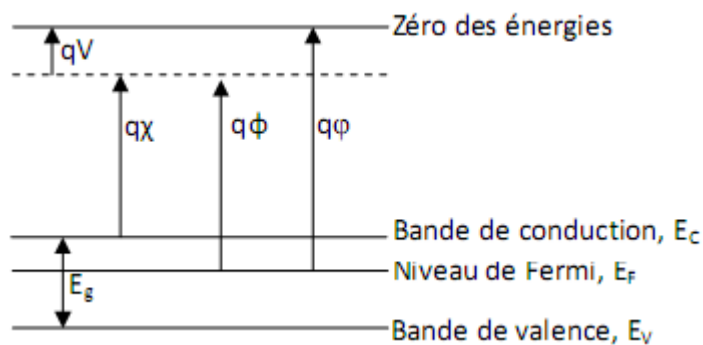


Figure 1.5 Diagramme des énergies pour un matériau. q est la charge élémentaire, V le potentiel électrostatique pouvant régner dans le matériaux, χ l'affinité électronique, Φ le travail de sortie et ϕ le potentiel d'ionisation [21].

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.

❖ Niveau de Fermi

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 statique de Fermi-Dirac, défini par l'équation (1.2). La probabilité d'occupation de l'énergie E par un trou est $1 - f(E)$.

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)} \quad (1.2)$$

- 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 1.6**.

❖ Densité d'état

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 :

$$N_c = 2 \left(\frac{2\pi m_e k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \approx 4,82 \cdot 10^{15} \cdot \left(\frac{m_e}{m_0} \right)^{3/2} \cdot T^{3/2} \approx 4,3 \cdot 10^{14} \cdot T^{3/2} \quad (1.3)$$

$$N_v = 2 \left(\frac{2\pi m_h k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \approx 8,9 \cdot 10^{15} \cdot T^{3/2} \quad (1.4)$$

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

$$N_c \approx 4,82 \cdot 10^{15} \cdot \left(\frac{m_e}{m_0} \right)^{3/2} \cdot T^{3/2} \approx 1,76 \cdot 10^{14} \cdot T^{3/2} \quad (1.5)$$

$$N_v = 10^{16} \cdot T^{3/2} \quad (1.6)$$

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) [$MeV \cdot c^{-2}$].
- 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) [$MeV \cdot c^{-2}$].
- m_0 la masse d'un électron [$9,109 \times 10^{-31} kg$] ou [$0,5101 MeV \cdot c^2$].
- h la constante de Planck [$4,136 \times 10^{-15} eV \cdot s$].

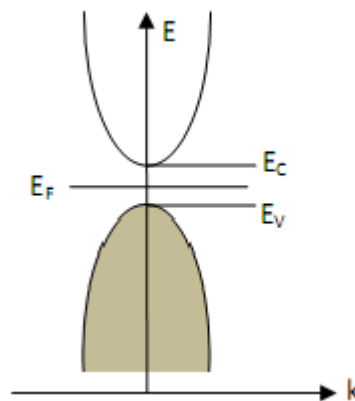


Figure 1.6 Schéma du diagramme de bande dans l'espace réciproque à 0 K. La bande de valence est remplie par les électrons et aucun électron ne se trouve dans la bande de conduction [21].

a) 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. 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 [12]**. Le diagramme de bande du GaN est montré dans la **figure 1.7** et celui de l'InN est représenté dans la **figure 1.8**. Le GaN et l'InN sont des matériaux à gap direct, le minimum de leur bande de conduction est donc aligné au maximum de leur bande de valence dans l'espace des vecteurs d'onde.

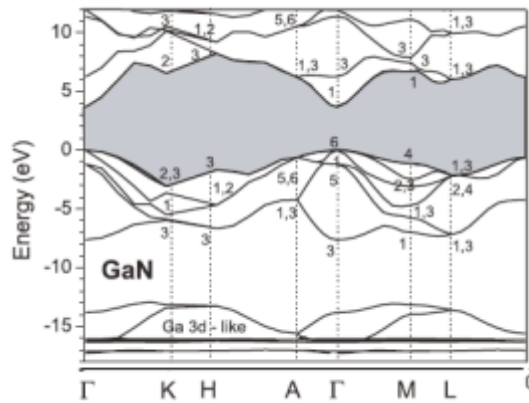


Figure 1.7 Diagramme de la bande du GaN. Le maximum de la bande de valence est pris comme le 0 des énergies. Le gap d'énergie interdite correspond à la partie grisée [23].

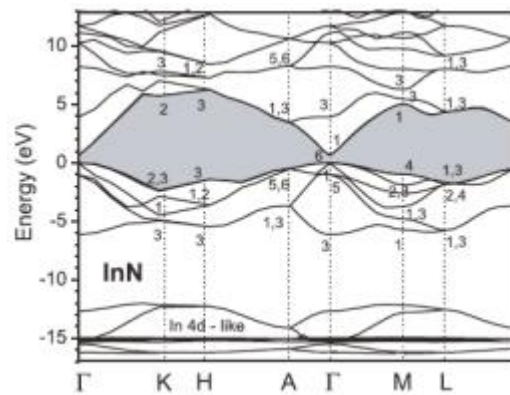


Figure 1.8 Diagramme de bande de l'InN. Le maximum de la bande de valence est pris comme le zéro des énergies. Le gap d'énergie interdite correspond à la partie grisée [23].

- Evolution du gap d'énergie dans l' $In_xGa_{1-x}N$

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 1.9**. 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 [24,25]. 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 [26,27]. 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:

$$E_g^{InGaN} = (1 - x)E_g^{GaN} + xE_g^{InN} - bx(1 - x) \quad (1.7)$$

Avec

- x la concentration d'Indium dans l' $In_xGa_{1-x}N$ [s. d].
- b le paramètre de courbure [eV].
- E_g^{InGaN} le gap d'énergie de l' $InGaN$ [eV].
- E_g^{GaN} le gap d'énergie du GaN [eV].
- E_g^{InN} le gap d'énergie de l' InN [eV].

La courbe en trait plein de la **figure 1.9** correspond à l'ajustement des points expérimentaux en utilisant l'expression (1.7) avec $E_g^{GaN} = 3.42\text{eV}$, $E_g^{InN} = 0.77\text{eV}$, et comme paramètre de courbure $b = 1.43\text{eV}$ [10]. La courbe en pointillés représente l'ajustement des points du côté riche en Ga en utilisant l'ancien gap de l' InN , soit 1.9eV . On voit alors la grande déviation de cette courbe avec les mesures expérimentales à partir d'environ 30% d'indium. Cette valeur de 1.43eV pour le paramètre de courbure a également été rapporté par Wu et al. est en accord avec la plupart des prédictions théoriques [28,29].

Cependant, des effets extérieurs tels que la déformation, le dopage, ou la fluctuation de la composition peuvent faire varier ce paramètre.

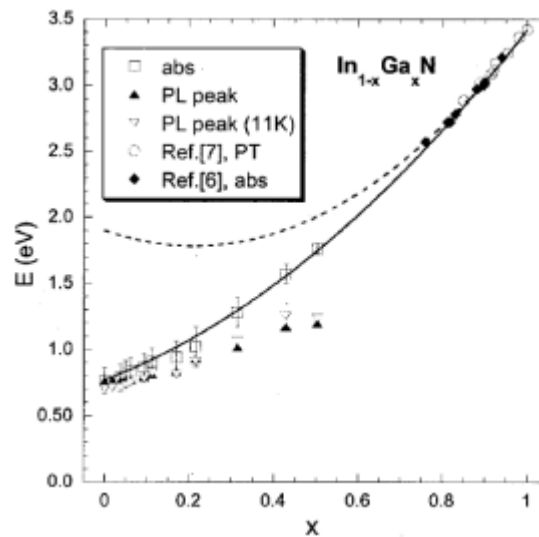


Figure 1.9 Evolution du gap d'énergie interdite de l' $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}$ en fonction de la concentration du Ga. Pour le côté riche en Ga, la courbe en trait plein correspond à l'ajustement des points en utilisant un paramètre de courbure de $b=1,43$ eV. La courbe en pointillés est l'ajustement des points du côté riche en Ga en prenant en compte 1,9 eV pour le gap de l'InN [10].

• 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 :

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{T + \beta} \quad (1.8)$$

Avec

- $E_g(0)$ le gap d'énergie du matériau à 0K [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 1.5**. L'évolution des gaps d'énergie de GaN et de l'InN en fonction de la température est représentée dans la **figure 1.10** et la **figure 1.11**, respectivement.

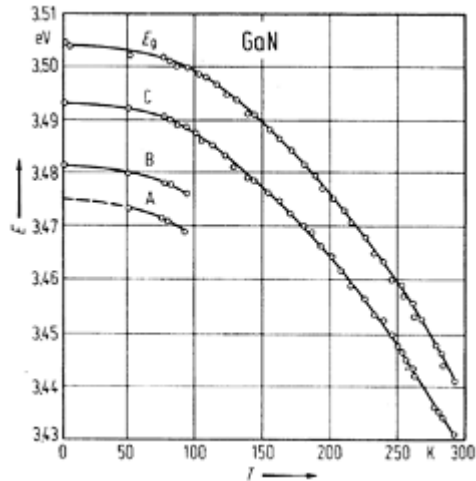


Figure 1.10 Evolution du gap d'énergie de GaN en fonction de la température. Les courbes A, B et C font référence aux excitons du même nom [30].

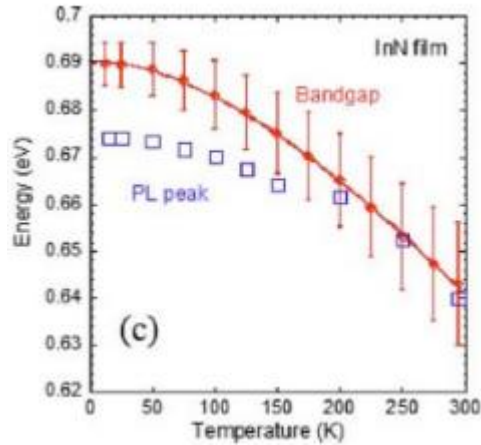


Figure 1.11 Evolution du gap d'énergie pour InN en fonction de la température. Les données expérimentales de photoluminescence sont également montrées [31].

	GaN			InN	
	Monemar [30]	Bougrov et al. [33]	Vurgaftman Et Meyer [32]	Wu et al. [31]	Vurgaftman et Meyer [32]
$\alpha [meV.K^{-1}]$	0.508	0.77	0.909	0.41	0.245
$\beta [K]$	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 1.5 Paramètres de Varshni et gap d'énergie à 0 K et 300 k du GaN et de l'InN.

b) Caractère intrinsèque de type N 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 [28,34,35]. 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 [28,36,37]. En effet, d'après les calculs, ces dernières ont la plus faible énergie de formation dans GaN et InN [38]. 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 [28,38,39,40]. Schaff et al. [35] 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 1.12**. C'est pourquoi les défauts, et pas les contaminants, sont la principale source d'électrons dans InN [28].

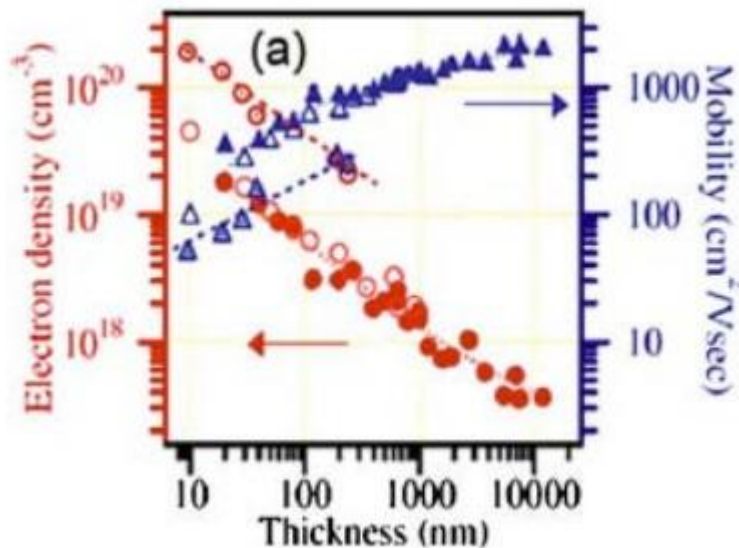


Figure 1.12 Densité d'électrons et mobilité dans InN en fonction de l'épaisseur de la couche. Les symboles pleins correspondent à des couches d'InN déposées sur une couche de GaN tampon. Les symboles vides, identifient les couches déposées sur une couche tampon d'AlN [35].

La **figure 1.13** 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 observe que la concentration d'électrons augmente avec la fraction de Ga dans l' $In_{1-x}Ga_xN$ 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 $In_{1-x}Ga_xN$, la densité d'électrons diminue.

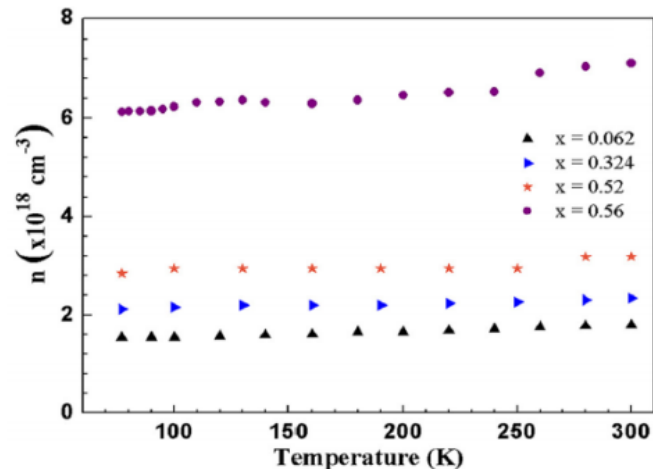


Figure 1.13 Concentration d'électrons en fonction de la température dans $In_{1-x}Ga_xN$ avec différentes concentrations d'indium [34].

Cette forte concentration de porteurs libres dans le matériau peut interférer dans la détermination du gap d'énergie. Donmez et al [34] 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.

c) Mobilité des porteurs dans les nitrures

La mobilité des porteurs libres dans l' $In_{1-x}Ga_xN$ est présentée dans la **figure 1.14** avec x la concentration de Ga [34]. 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' $In_{1-x}Ga_xN$ ($m_e^{GaN} = 0,2m_0$ et $m_e^{InN} = 0,11m_0$), 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' $In_{1-x}Ga_xN$. On observe également que la mobilité est quasiment indépendante de la température.

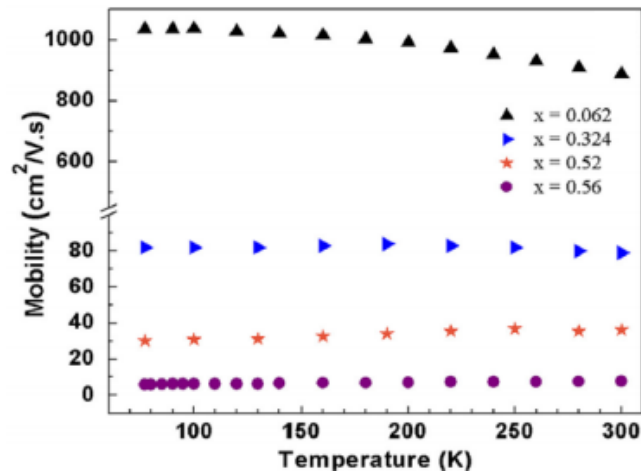


Figure 1.14 Mobilité des porteurs libres dans $In_{1-x}Ga_xN$ en fonction de la température [34].

d) 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 :

$$L = \sqrt{D\tau} \quad (1.9)$$

Avec

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

$$D = \frac{kT}{q} \mu \quad (1.10)$$

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

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 1.15 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.

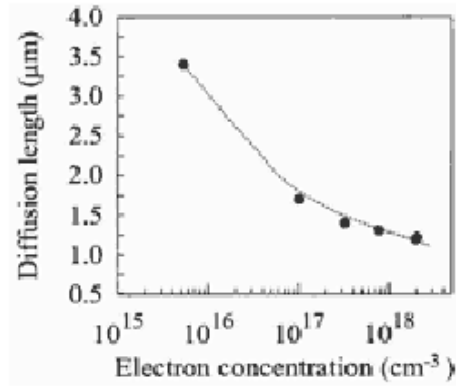


Figure 1.15 Longueur de diffusion des trous dans GaN en fonction de la concentration d'électrons [41].

Les propriétés électriques du GaN et de l'InN sont rassemblées dans le **tableau 1.6**.

	<i>GaN</i>	<i>InN</i>
Gap d'énergie interdite [eV]	3.39	0.7
Affinité électronique [eV]	4.1	5.8
Masse effective des électrons, m_e	$0.20m_0$	$0.11m_0$
Masse effective des trous, m_h	$0.80m_0$	$0.65m_0$
Densité d'états effective de la bande de conduction, N_c [cm ⁻³]	2.3×10^{18} ($4.3 \times 10^{14} \cdot T^{3/2}$)	9×10^{17} ($1.76 \times 10^{14} \cdot T^{3/2}$)
Densité d'états effective de la bande de valence, N_v [cm ⁻³]	4.6×10^{19} ($8.9 \times 10^{15} \cdot T^{3/2}$)	5.3×10^{19} ($10^{16} \cdot T^{3/2}$)
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
β [K]	830	454

Tableau 1.6 Résumé des propriétés électriques du GaN et de l'InN à 300 K.

1.4.3 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 :

$$n = \frac{c}{v} \quad (1.11)$$

La vitesse de la lumière dans un matériau n'est pas constante, elle change avec la longueur d'onde. La **figure 1.16** 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 [42]. Pour l'InN, elle vaut environ 2,9 dans l'infrarouge [43].

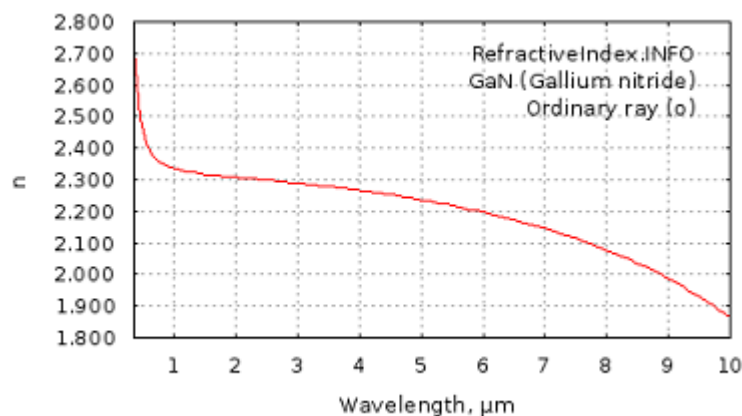


Figure 1.16 Indice de réfraction du GaN entre 0.35 et 10 μm [44].

Anani et al. [45] estiment la variation de l'indice de réfraction d'alliages de nitrures-III, voir la **figure 1.17**. Ils relient la formule de l'indice de réfraction n à l'énergie d'un photon absorbé par un matériau E_g définie par :

$$E_g = \frac{hc}{\lambda} \quad (1.12)$$

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

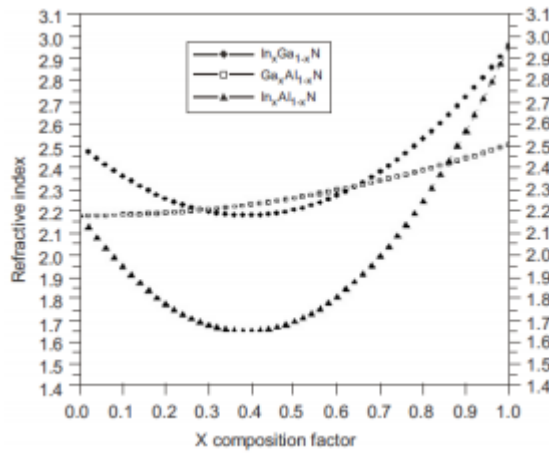


Figure 1.17 Estimation de la variation de l'indice de réfraction dans l'InGaN, le GaAlN et l'InAlN [39].

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

$$n_1 \sin \theta_1 = n_2 \sin \theta_2 \quad (1.13)$$

Avec

- n_1 et n_2 les indices de réfractons de deux milieux [s. d].
- θ_1 et θ_2 les angles des rayons lumineux par rapport à la normale [°], voir

figure 1.18.

- ❖ 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 :

$$R = \frac{I_r}{I_i} ; T = \frac{I_t}{I_i} \quad (1.14)$$

On a alors :

$$R = \frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2} ; T = \frac{2n_1}{n_1 + n_2} \quad (1.15)$$

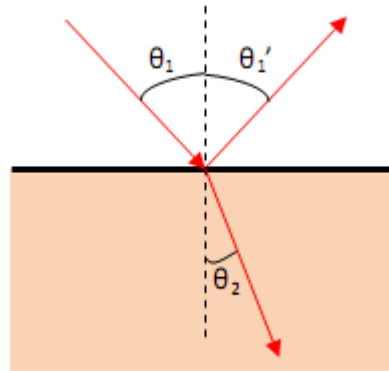


Figure 1.18 Schéma des chemins optiques au niveau d'un dioptre plan. Le rayon incident arrive sur le dioptre avec un angle θ_1 par rapport à la normale. Une partie du rayon est réfléchie avec le même angle, appelé θ_1' , l'autre partie du rayon est transmise avec un angle θ_2 par rapport à la normale. Dans cet exemple, on a pris $n_1 < n_2$, donc $\theta_1 > \theta_2$.

- ❖ 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 :

$$\epsilon_r = \chi \epsilon_0 \quad (1.16)$$

Avec

- χ la susceptibilité du matériau [*s. d.*].
- ϵ_0 la permittivité du vide [$8.85 \times 10^{-12} \text{F. m}^{-1}$].

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

$$n = \sqrt{\epsilon_r} \quad (1.17)$$

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

$$R = \frac{\sqrt{\epsilon_1} - \sqrt{\epsilon_2}}{\sqrt{\epsilon_1} + \sqrt{\epsilon_2}} ; T = \frac{2\sqrt{\epsilon_1}}{\sqrt{\epsilon_1} + \sqrt{\epsilon_2}} \quad (1.18)$$

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 :

$$\tilde{n} = n(\lambda) - ik(\lambda) \quad (1.19)$$

Avec

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

On parle alors d'une permittivité relative complexe

$$\tilde{\epsilon} = (n(\lambda) - ik(\lambda))^2 \quad (1.20)$$

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

$$\alpha(\lambda) = \frac{4\pi k(\lambda)}{\lambda} \quad (1.21)$$

Un exemple de courbe de transmission, de réflexion et d'absorption du GaN est montré dans la **figure 1.19** et la **figure 1.20**. 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.

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.

Les paramètres optiques du GaN et de l'InN sont résumés dans le **tableau 1.7**.

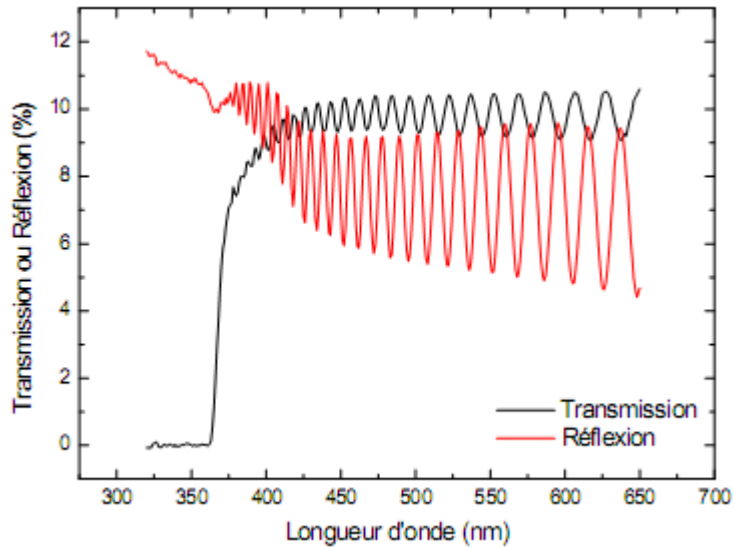


Figure 1.19 Courbe de transmission (noire) et de réflexion (rouge) du GaN [21].

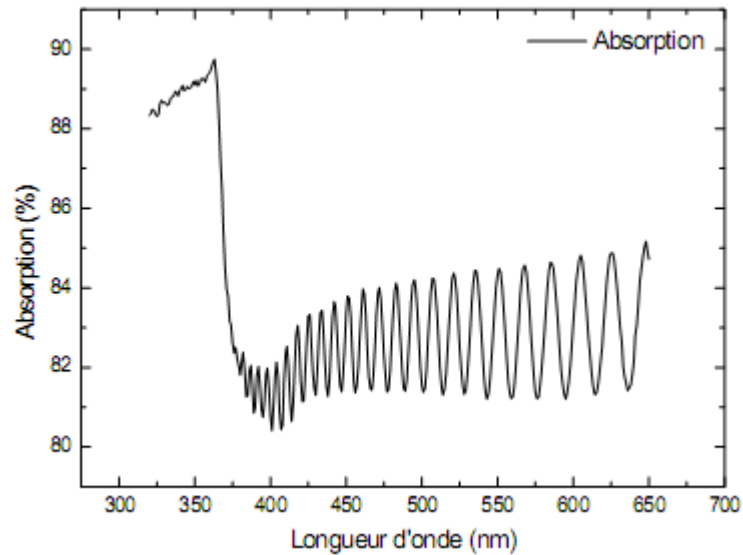


Figure 1.20 Courbe d'absorption du GaN [21].

	<i>GaN</i>	<i>InN</i>
Indice de réfraction [s. d]	2.3	2.9
Constantes diélectriques statiques [s. d]	10,4 (E c)	14,4 (E c)
	9,5 (E⊥c)	13,1 (E⊥c)
Constantes diélectriques à haute fréquence [s. d]	5,8 (E c)	8.4
	5,35 (E⊥c)	
Coefficient d'absorption cm^{-1}	10^5 [46]	$5 \cdot 10^5$ [47]

Tableau 1.7 Résumé des paramètres optiques du GaN et de l'InN, d'après la référence [11], sauf indiqué.

1.4.4 Propriétés thermiques

a) Conductivité thermique

La conductivité thermique représente la capacité du matériau à transférer une quantité de chaleur par unité de temps et par unité de surface sous un gradient de température. La résistance thermique noté R_{th} est inversement proportionnelle à la conductivité thermique :

$$R_{th} = \frac{\Delta T}{P} \quad (1.22)$$

b) Expansion thermique

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 :

$$\alpha_a = \frac{\Delta a}{a \Delta T} \quad \text{et} \quad \alpha_c = \frac{\Delta c}{c \Delta T} \quad (1.23)$$

Avec

- Δa et Δc la variation des paramètres de maille suite à une variation de température dans le plan et perpendiculairement au plan [Å°].
- ΔT la variation de température [K].

Les principales propriétés thermiques sont rassemblées dans le **tableau 1.8**.

	<i>GaN</i> [11]	<i>InN</i> [11]
Expansion thermique [<i>s. d</i>]	$\Delta a/a = 5.59 \times 10^{-6}$ $\Delta c/c = 3.17 \times 10^{-6}$	$\Delta a/a = 2.85 \times 10^{-6}$ $\Delta c/c = 3.75 \times 10^{-6}$
Conductivité thermique, κ à 300 K [$W \cdot cm^{-1} \cdot K^{-1}$] à 300 K	2.3	0.8
Température de Debye [K]	600	660
Température de fusion K	> 1993 à 2kbar	1373

Tableau 1.8 Résumé des propriétés thermiques du GaN et de l'InN.

1.5 Conclusion

Nous avons donc vu dans ce premier chapitre les caractéristiques et les propriétés de l'InGaN tant sur le plan structurel, qu'électronique, optique et thermique. Nous connaissons ses avantages (large gap direct selon toutes les compositions pouvant couvrir quasiment tout le spectre solaire).

Chapitre 2 :

Les cellules solaires

2.1 Introduction

L'effet photovoltaïque a été découvert par Alexandre Edmond Becquerel en 1839. L'effet photovoltaïque est obtenu par absorption des photons dans un matériau semi-conducteur qui génère alors une tension électrique.

L'énergie solaire photovoltaïque provient de la conversion directe du rayonnement solaire en électricité. Elle utilise pour ce faire des modules photovoltaïques composés de cellules solaires qui réalisent cette transformation d'énergie en produisant du courant continu, qui peut être utilisé pour alimenter un appareil ou recharger une batterie. La conversion photovoltaïque a été réalisée pour la première fois dans le laboratoire Bell en 1954 sur une simple jonction *PN* au Silicium. Par suite, plusieurs semi-conducteurs ont été utilisés pour cet objectif.

Trois processus élémentaires interviennent dans l'effet photovoltaïque (**figure 2.1**):

- 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.

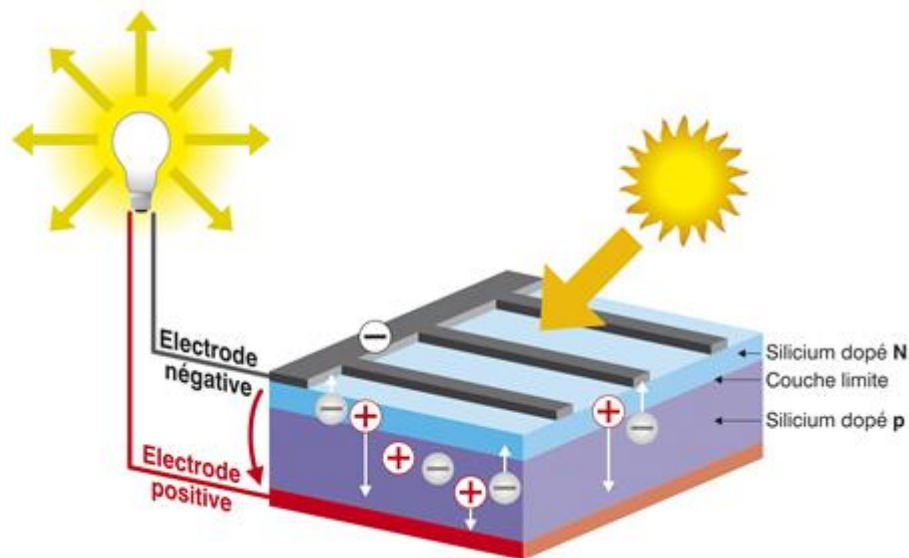


Figure 2.1 Effet photovoltaïque [48].

2.2 Spectre solaire

Le soleil émet un rayonnement électromagnétique, sa décomposition en longueurs d'ondes est appelée spectre électromagnétique. Elle est en effet composée de toutes sortes de rayonnement de couleurs différentes, caractérisées par leur gamme de longueur d'onde. La fréquence de la lumière détermine sa couleur. Les photons, grains de lumière qui composent ce rayonnement, sont porteurs d'une énergie qui est reliée à leur fréquence (longueur d'onde) par la relation :

$$E = h \nu = \frac{h c}{\lambda} \quad (2.1)$$

Où h est la constante de Planck, 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.

La **figure 2.2** montre la partie visible du spectre électromagnétique. La gamme des longueurs d'onde visibles est comprise entre **390 nm** (violet) à **780 nm** (rouge). Le **tableau 2.1** montre la gamme de longueur d'onde approximative des couleurs visibles.

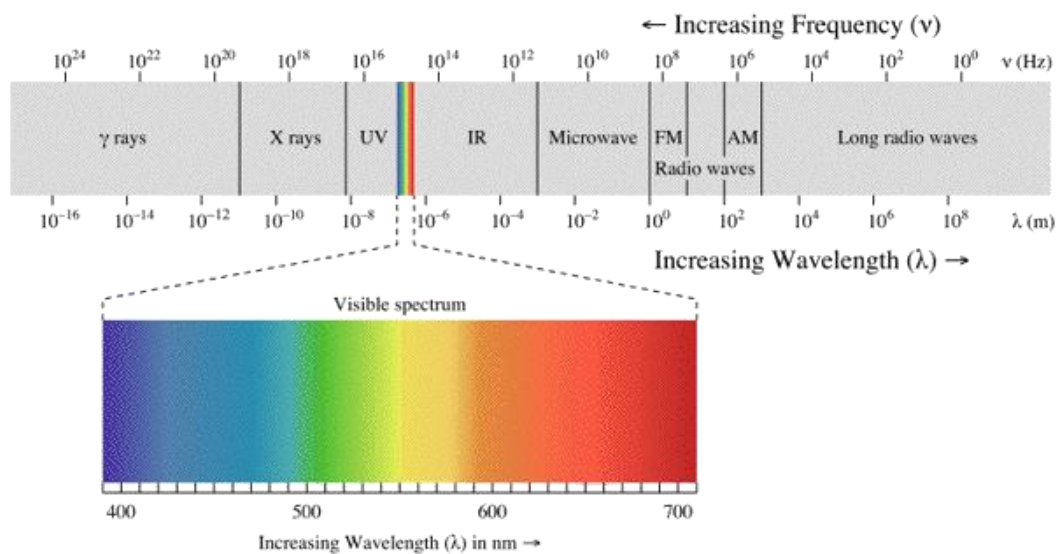


Figure 2.2 Spectre électromagnétique [49].

<i>Le spectre de lumière visible</i>	
<i>Couleur</i>	<i>Longueur d'ondes (nm)</i>
<i>Rouge</i>	622-780
<i>Orange</i>	597-622
<i>Jaune</i>	577-597
<i>Vert</i>	492-577
<i>Bleu</i>	455-492
<i>Violet</i>	390-455

Tableau 2.1 Longueurs d'ondes approximatives des différentes couleurs dans le vide [50].

Le soleil émet de la lumière de l'ultraviolet aux infrarouges en passant par le visible du spectre électromagnétique. L'irradiance solaire a la plus grande ampleur aux longueurs d'onde visibles et un pic dans le bleu-vert.

2.3 L'air masse

Le Soleil émet un rayonnement électromagnétique compris dans une bande de longueur d'onde variant de **0.22 à 10 microns (μm)**. L'énergie associée à ce rayonnement solaire se décompose approximativement ainsi :

- 9% dans la bande des ultraviolets ($< 0.4 \mu\text{m}$),
- 47% dans la bande visible (**0.4 à 0.8 μm**),
- 44% dans la bande des infrarouges ($> 0.8 \mu\text{m}$).

L'atmosphère terrestre reçoit ce rayonnement à une puissance moyenne de **1.37 kW/m²** avec un spectre centré au voisinage de $\lambda = 0.48 \mu\text{m}$.

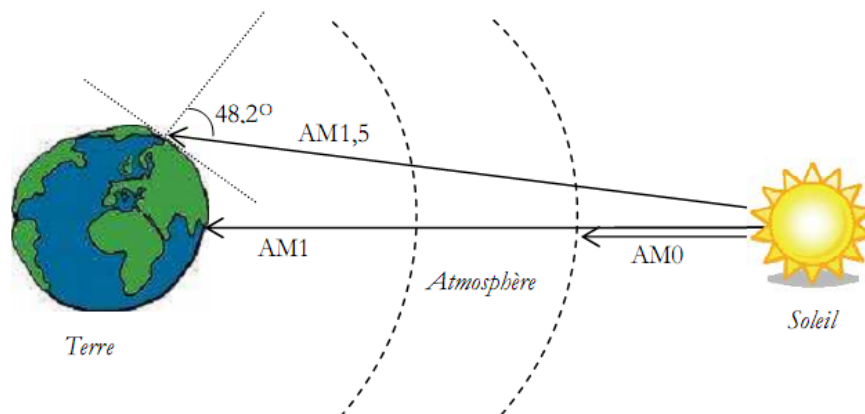


Figure 2.3 Différentes constantes d'illumination [21].

L'atmosphère en absorbe toutefois une partie, de sorte que la quantité d'énergie atteignant la surface terrestre n'est plus que de 0.9 kW/m^2 . Pour mesurer l'effet de l'atmosphère on utilise l'air masse (figure 2.3), défini par $AM = 1/\cos \alpha$ où α représente l'angle que fait la direction du soleil avec la verticale. **AM0** représente le spectre solaire en dehors de l'atmosphère, sa puissance est de 1367 W/m^2 , **AM1** correspond au soleil à la verticale ($\alpha = 0^\circ$) avec une puissance d'incidence de 925 W/m^2 , **AM2** est obtenu pour un angle de 60° et à une puissance d'environ 691 W/m^2 . L'air masse **AM1.5** défini par l'angle 48.2° au dessus de l'horizon, d'une intensité de 844 W/m^2 est approprié pour les applications terrestres. Le spectre solaire est représenté sur la figure 2.4, le tableau 2.2 montre un résumé des différentes distributions spectrales.

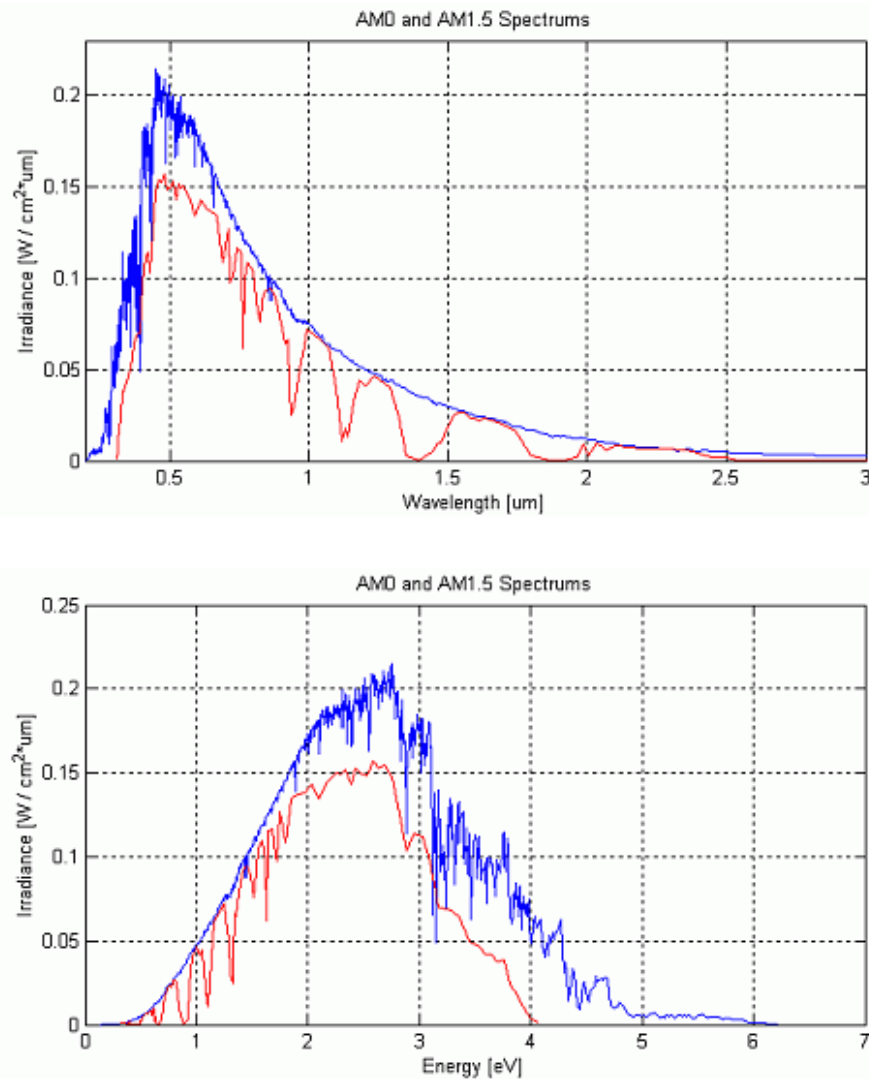


Figure 2.4 Distribution spectrale de l'énergie solaire AM0 (bleu) et AM1.5 (rouge) [51].

Hauteur	Position du soleil	Irradiance (intensité, puissance) (W/m^2)	Distribution spectrale
En dehors de l'atmosphère	–	1367	AM0
Surface	$\alpha = 90^\circ$	925	AM1
Surface	$\alpha = 48^\circ$	963	AM1.5
Surface	$\alpha = 60^\circ$	691	AM2

Tableau 2.2 Résumé des différentes distributions spectrales.

2.4 La bande interdite

La bande interdite (l'énergie de gap) E_g d'un semi-conducteur détermine comment réagit une cellule solaire à la lumière. Le **tableau 2.3** montre les valeurs de la bande interdite de quelques semi-conducteurs.

Matériel	Bande interdite (eV) à 300 K
Si	1.12
Ge	0.66
GaAs	1.42
InP	1.34

Tableau 2.3 Bandes interdites de quelques semi conducteurs

La bande interdite du matériau semi-conducteur détermine la longueur d'onde de la lumière nécessaire pour générer de l'énergie électrique. La relation reliant la bande interdite et la longueur d'onde est:

$$\lambda (\mu m) = \frac{h c}{E_g (eV)} = \frac{1.24}{E_g (eV)} \quad (2.2)$$

Où λ est la longueur d'onde en μm , h est la constante de Planck, c est la vitesse de la lumière dans le vide et E_g est l'énergie de gap en eV ($1eV = 1.6 \times 10^{-19}J$). Dans le cas d'arséniure de gallium, la longueur d'onde qui correspond à $1.42 eV$ est $0.873 \mu m$.

La **figure 2.5** permet de visualiser le concept d'absorption de la lumière. Quand la lumière a une énergie supérieure à $1.1 eV$, le silicium génère de l'électricité. La lumière d'énergie inférieure à $1.1 eV$ est inutilisable. De même pour l'arséniure de gallium, une lumière d'énergie supérieure à $1.43 eV$ excite ses électrons de la couche extérieure. Et enfin, l'arséniure de gallium aluminium requiert une lumière d'énergie supérieure à $1.7 eV$.

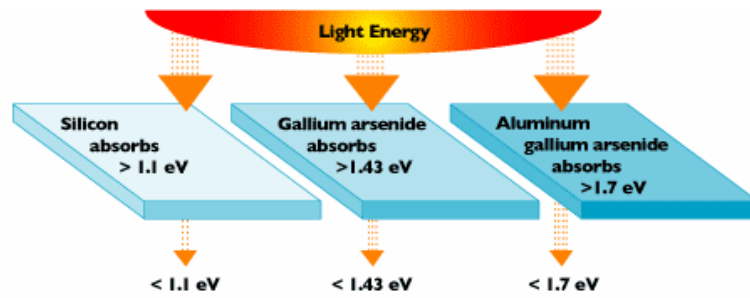


Figure 2.5 Effet de l'énergie de la lumière sur différentes bandes interdites E_g [6].

2.5 Principe de fonctionnement d'une cellule solaire

L'effet photovoltaïque utilisé dans les cellules solaires permet de convertir directement l'énergie lumineuse des rayons solaires en électricité par le biais de la production et du transport dans un matériau semi-conducteur des charges électriques positives et négatives sous l'effet de la lumière. Ce matériau comporte deux parties, l'une présentant un excès d'électrons et l'autre un déficit en électrons, dites respectivement dopée de type N et dopée de type P . Lorsque la première est mise en contact avec la seconde, les électrons en excès dans le matériau N diffusent dans le matériau P . La zone initialement dopée N devient chargée positivement, et la zone initialement dopée P devient chargée négativement. Il se crée donc entre elles un champ électrique qui tend à repousser les électrons dans la zone N et les trous vers la zone P . Une jonction PN est donc formée. En ajoutant des contacts métalliques sur les zones N et P , une diode est obtenue. Lorsque la jonction est éclairée, les photons d'énergie égale ou supérieure à la largeur de la bande interdite cèdent leur énergie aux atomes, chacun fait passer un électron de la bande de valence dans la bande de conduction et laisse aussi un trou capable de se mouvoir, engendrant ainsi une paire électron-trou. Si une charge est placée aux bornes de la cellule, les électrons de la zone N rejoignent les trous de la zone P via la connexion extérieure, donnant naissance à une différence de potentiel et un courant électrique circule.

Le principe de fonctionnement d'une cellule solaire est illustré sur la figure 2.6 [52]. 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 photoporteurs minoritaires diffusent.

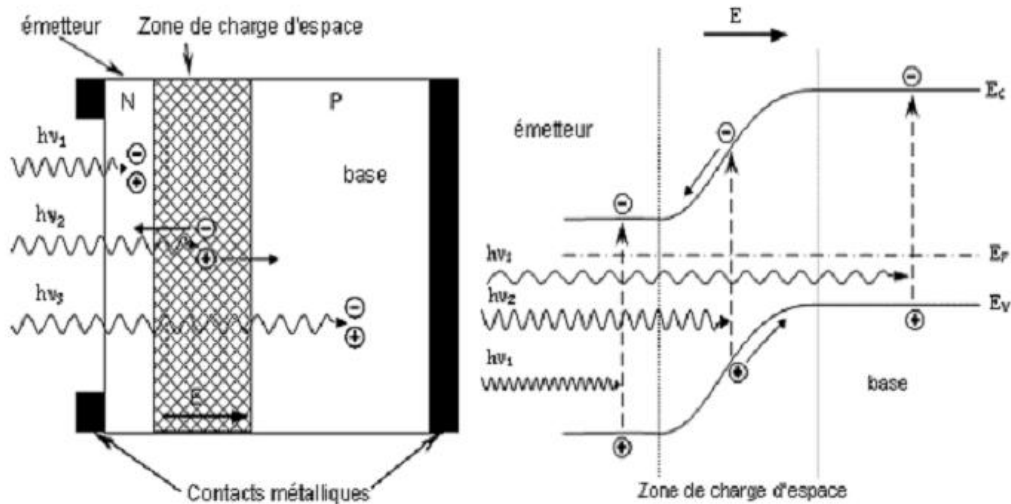


Figure 2.6 Structure et diagramme de bande d'une cellule photovoltaïque [52].

Ceux qui atteignent la région de charge d'espace sont propulsés par le champ électrique vers la région où ils deviennent majoritaires. Ces photoporteurs 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 I_{ph} qui contribue au courant inverse de la diode.

2.6 Caractéristiques électriques d'une cellule solaire

Une cellule solaire reliée à une résistance électrique et soumise à l'éclairement solaire débite un courant qui va se répartir entre la résistance et sa structure interne de diode. Sa caractéristique $I(V)$ correspond à la soustraction du photo courant et du courant de la diode à l'obscurité par [52,53]:

$$I(V) = I_{obs}(V) - I_{ph} = I_s \exp(q \cdot V / K \cdot T - 1) - I_{ph} \quad (2.3)$$

avec I_{ph} la densité de courant photogénéré, I_{obs} la densité de courant d'obscurité, I_s le courant de saturation de la diode, q la charge élémentaire, K la constante de Boltzmann et T la température.

La caractéristique d'une cellule à l'obscurité est identique à celle d'une diode. Nous avons représenté sur la **figure 2.7** les deux caractéristiques courant-tension d'une cellule solaire à l'obscurité en pointillés, et sous illumination en trait plein. On remarque que la courbe sous illumination est simplement décalée par rapport à la première d'une valeur I_{cc} , qui traduit la génération constante du courant par la lumière. Cette valeur est appelée courant de court-circuit, puisque c'est le courant que génère la cellule sous lumière à tension nulle. La valeur V_{co} , à l'inverse, est la tension de circuit ouvert. Il représente en fait l'égalité du courant de génération par la lumière et du courant à l'obscurité.

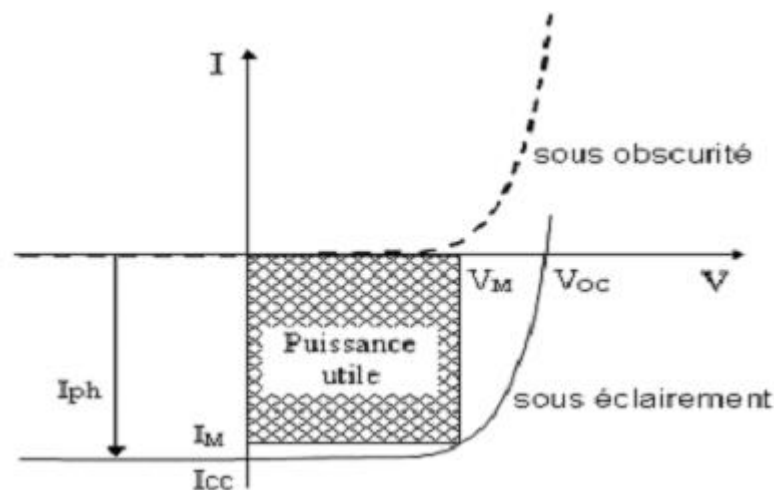


Figure 2.7 Caractéristiques $I(V)$ à l'obscurité et sous éclairage d'une cellule photovoltaïque [52].

2.7 Différents régimes de fonctionnement d'une cellule solaire

La jonction PN polarisée et sous rayonnement dont la caractéristique $I(V)$ vient d'être tracée, peut fonctionner sous deux régimes en plus de sa fonction pour $V > V_{co}$ (dans le 1er quadrant de la **figure 2.7**) :

2.7.1 le régime photodiode

La jonction PN est polarisée en inverse par une tension $V < 0$; avec $V \gg K.T/q$, l'expression du courant devient $I = -(I_s + I_{ph})$, le courant de saturation $I = I_s \ll I_{ph}$ donc $I \approx -I_{ph}$:

Le courant I est alors approximativement proportionnel à l'éclairement (3^{ème} quadrant de la **figure 2.7**). Lorsqu'on met la diode en court-circuit, ($V = 0$), $I = -I_{ph} = I_{cc}$ (courant de court-circuit).

2.7.2 le régime photovoltaïque

La diode n'est pas polarisée mais un courant circule à travers une résistance de charge R_c (4^{ème} quadrant de la **figure 2.7**). Le produit $V \cdot I$ est négatif, la diode fournit une puissance électrique. Si le courant inverse de la diode est compté positivement, compte tenu de cette convention de signe, le courant débité par la photopile s'écrit :

$$I = I_{ph} - I_s \exp(q \cdot V / K \cdot T - 1) \quad (2.4)$$

La caractéristique de la cellule solaire est représentée par la **figure 2.8**. La puissance fournie par la cellule solaire est donnée par le produit $V \cdot I$

$$P = V \cdot I = V \cdot (I_{ph} - I_s \exp(q \cdot V / K \cdot T - 1)) \quad (2.5)$$

Cette puissance fournie est maximum au point défini par $dP/dV = 0$, soit :

$$I_{ph} - I_s \cdot (\exp(q \cdot V / K \cdot T - 1) - V \cdot I_s \cdot \frac{q}{K \cdot T} \exp(q \cdot V / K \cdot T)) = 0 \quad (2.6)$$

La tension V_m et le courant I_m correspondant au maximum de puissance sont donnés par [53].

$$\left(1 + \frac{q \cdot V_m}{K \cdot T}\right) \exp(q \cdot V_m / K \cdot T) = 1 + \frac{I_{ph}}{I_s} \quad (2.7.a)$$

$$I_m = I_s \cdot \frac{q \cdot V_m}{K \cdot T} \exp(q \cdot V_m / K \cdot T) \quad (2.7.b)$$

La puissance débitée est donnée par le produit $V_m \cdot I_m$. Cette puissance est représentée par l'aire du rectangle de la **figure 2.8**.

Nous pouvons déduire la tension en circuit ouvert V_{co} (obtenue pour $I = 0$), par :

$$V_{co} = \frac{K \cdot T}{q} \log\left(\frac{I_{ph}}{I_s} + 1\right) \quad (2.8)$$

On peut en fait considérer, qu'en circuit ouvert, la jonction est polarisée par cette tension V_{co} . Bien que le courant résultant soit nul, elle est le siège de deux courants inverses qui s'annulent, le courant de la diode polarisée par V_{co} exprimé par $I_s \left[\exp\left(\frac{q.V_{co}}{K.T}\right) - 1 \right]$ et le photo courant I_{ph} .

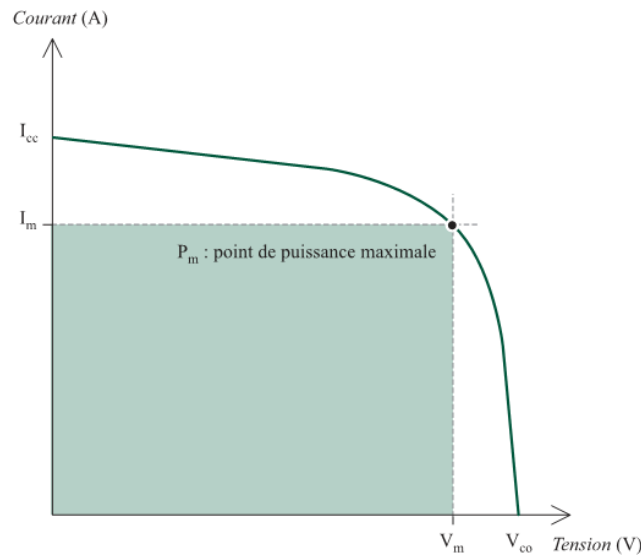


Figure 2.8 Caractéristiques $I(V)$ d'une cellule solaire[54].

2.8 Circuit équivalent d'une cellule photovoltaïque

Une cellule solaire réelle peut être schématisée par la figure 2.9. Elle propose un modèle électrique de la cellule photovoltaïque. on y retrouve le générateur de courant I_{ph} , correspondant au courant photogénéré opposé au courant d'obscurité $I_{obs} = I_d$ de la diode polarisée en direct, ainsi que des résistances R_s , R_{sh} et la résistance de charge R_L .

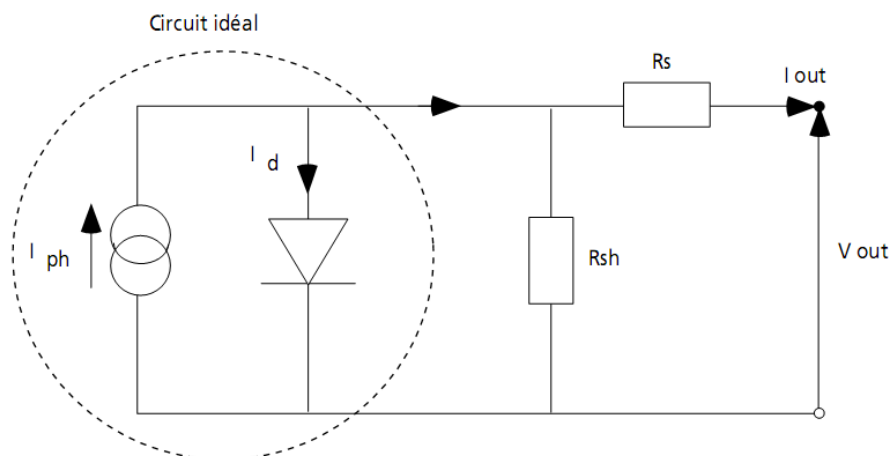


Figure 2.9 Schéma équivalent d'une cellule solaire [55].

R_s , la résistance série est due à la résistivité des différentes couches de la cellule : émetteur, base et contacts métalliques (en particulier leur interface avec le semi-conducteur). Cette résistance doit idéalement être la plus faible possible pour limiter son influence sur le courant de la cellule. Ceci peut être réalisé en diminuant la résistivité du matériau utilisé.

R_{sh} , la résistance shunt (parallèle) traduit quant à elle, la présence d'un courant de fuite à travers l'émetteur causé par un défaut. Ceci est le cas lorsque la diffusion des contacts métalliques à haute température perce l'émetteur. Elle peut aussi être due à un court-circuit sur les bords de la cellule. Cette résistance devra être la plus élevée possible.

2.9 Paramètres de la cellule solaire

Les grandeurs caractéristiques principales des cellules solaires sont

- Le courant de court-circuit I_{cc}
- La tension en circuit ouvert V_{co}
- Le facteur de forme FF
- Le rendement de conversion d'énergie η
- La réponse spectrale RS

2.9.1 Courant de court circuit, I_{cc}

Le courant de court-circuit exprimé en mA , est le courant qui circule dans la cellule sous éclairement et en court-circuitant les bornes de la cellule. Il croît linéairement avec l'intensité d'illumination de la cellule et il dépend de la surface éclairée, de la longueur d'onde du rayonnement, de la mobilité des porteurs de charges et de la température.

2.9.2 Tension de circuit ouvert, V_{co}

La tension de circuit ouvert exprimée en V est obtenue quand le courant qui traverse la cellule est nul.

2.9.3 Facteur de forme, FF

La puissance fournie au circuit extérieur par une cellule photovoltaïque sous éclairement dépend de la résistance de charge (résistance externe placée aux bornes de la

cellule). Cette puissance est maximale (notée $P_m = P_{max}$) pour un point de fonctionnement P_m ($I_m = I_{max}$, $V_m = V_{max}$) de la courbe courant-tension (figure 2.10). Le facteur de forme est défini par la relation suivante:

$$FF = \frac{P_m}{V_{co} \cdot I_{cc}} = \frac{V_m \cdot I_m}{V_{co} \cdot I_{cc}} \quad (2.9)$$

2.9.4 Rendement de conversion, η

Le rendement η de la cellule solaire exprimé en pourcentage, désigne le rendement de conversion en puissance. Il est défini comme étant le rapport entre la puissance maximale délivrée par la cellule et la puissance lumineuse incidente P_{in} .

$$\eta = \frac{P_m}{P_{in}} = \frac{FF \cdot V_{co} \cdot I_{cc}}{P_{in}} \quad (2.10)$$

Ce rendement peut être amélioré en augmentant le facteur de forme, le courant de court-circuit et la tension à circuit ouvert.

A température et éclairage constants, le rendement d'une cellule solaire dépend de la charge dans le circuit électrique. En circuit ouvert ($P_m = 0$, $I = 0$, $V = V_{co}$) ou en court-circuit ($R_c = 0$, $I = I_{cc}$, $V = 0$), aucune énergie n'est transmise à l'extérieur. Entre ces deux extrêmes, il existe une valeur optimale R_{opt} de la résistance de charge R_c pour laquelle la puissance fournie par la cellule solaire à la résistance de charge est maximale notée $P_m = P_{max}$ (figure 2.10).

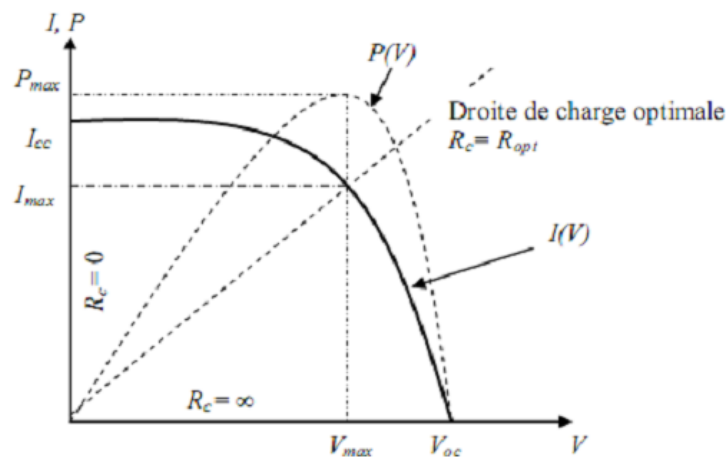


Figure 2.10 Caractéristiques $I(V)$ et $P(V)$ d'une cellule solaire [52].

2.9.5 Réponse spectrale d'une cellule solaire

La réponse spectrale RS d'une cellule photovoltaïque est le rapport entre le courant de court-circuit généré par la cellule et la puissance lumineuse incidente, en fonction des différentes longueurs d'onde formant le rayonnement incident. La réponse spectrale RS est donnée par la relation suivante [56]:

$$RS = \frac{I_{cc}(\lambda)}{P_{in}(\lambda)} (A/W) \quad (2.11)$$

Le rendement quantique externe EQE de la cellule est le rapport du nombre de porteurs générés sur le nombre de photons incidents pour chaque longueur d'onde, il est relié à la réponse spectrale par :

$$EQE(\lambda) = RS(\lambda) \cdot \frac{h \cdot c}{\lambda \cdot q} \quad (2.12)$$

Le rendement quantique interne IQE de la cellule est le rapport du nombre de porteurs générés sur le nombre de photons pénétrant dans le matériau, il est relié au rendement quantique externe EQE par l'équation :

$$IQE(\lambda) = \frac{EQE(\lambda)}{1 - R(\lambda)} \quad (2.13)$$

Où $R(\lambda)$ représente le coefficient de réflexion pour la longueur d'onde λ .

2.10 Groupement des cellules solaires

Les cellules solaires sont rarement employées seules, si ce n'est pour l'alimentation de très petits circuits. Dans la plupart des cas, elles sont regroupées et associées en un grand nombre. En général la puissance fournie par une cellule individuelle étant très petite, nous sommes donc appelés à réaliser des groupements séries ou parallèles des cellules afin de recueillir la tension et le courant nécessaires à une certaine application en fonction de la charge variable ou fixe à alimenter. La forme générale de la caractéristique $I(V)$ d'un module solaire ou photovoltaïque est identique à celle d'une cellule solaire élémentaire.

2.10.1 Branchement série

Les tensions de circuit ouvert de N_s modules peuvent être différentes mais le courant de court circuit qui les traverse est le même. La tension de l'ensemble est égale à la somme des tensions de circuit ouvert (figure 2.11).

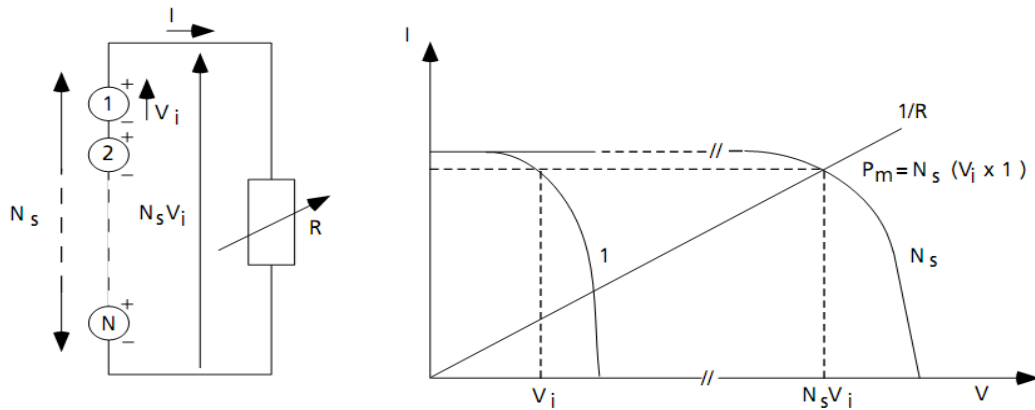


Figure 2.11 Association en série de N_s cellules solaires [55].

2.10.2 Branchement parallèle

Dans un tel montage, les modules ont la même tension de circuit ouvert et des courants de court circuit différents, on aura donc un courant égal à la somme des courants de chaque module alors que la tension sera celle du module (figure 2.12).

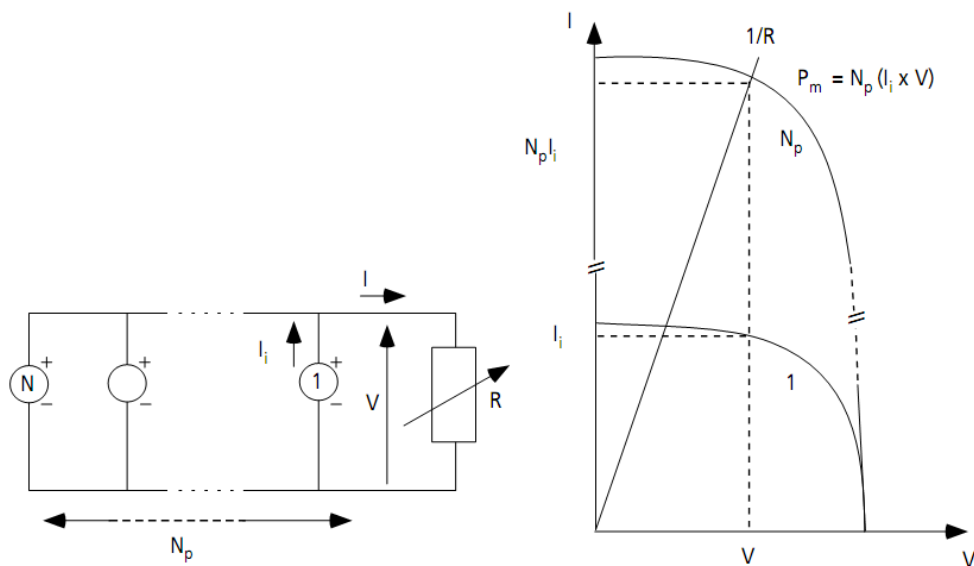


Figure 2.12 Association en parallèle de N_p cellules solaires identiques [55].

2.10.3 Branchement mixte

Si pour une application donnée il est nécessaire de faire augmenter le courant et la tension délivrée par les cellules solaires, on réalise un groupement mixte ou groupement série-parallèle. On parlera dans ce cas de module et de panneaux solaires. Un panneau solaire est par définition un ensemble de modules regroupés selon un montage mixte, le module étant à son tour composé d'un ensemble de cellules montées généralement en série. Il est possible d'utiliser un montage de N_C cellules identiques en série sur un module, N_{SP} nombre de branche (placées en parallèle) et N_{MS} nombre de modules par branche (figure 2.13) [57]. La puissance totale disponible P_T , dans ces conditions, est égale à :

$$P_T = N_{MS} \cdot N_{SP} \cdot P_M \quad (2.14)$$

La résistance optimale est donnée par:

$$R_{opt} = (N_{MS}/N_{SP}) \cdot R_{optm} \quad (2.15)$$

Où R_{optm} est la résistance optimale du module dans les mêmes conditions.

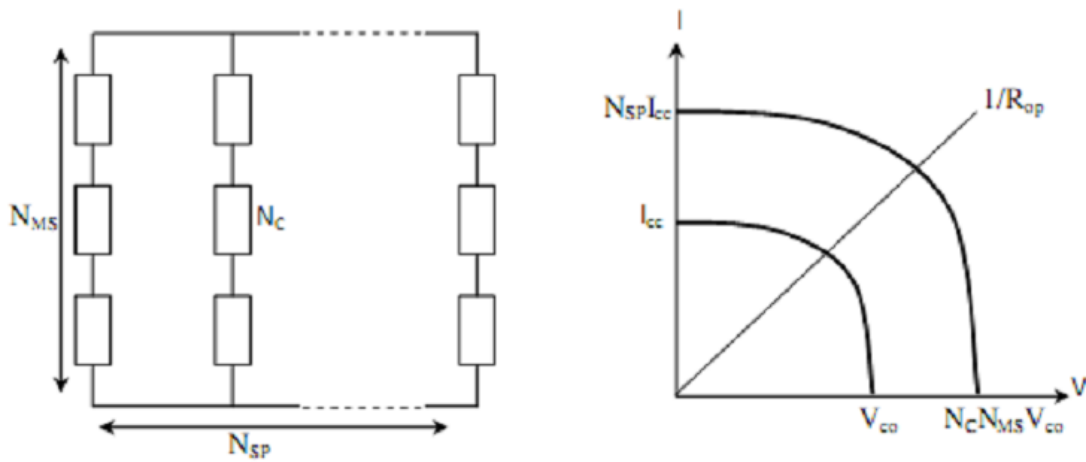


Figure 2.13 Association mixte de N_{SP} branches et de N_{MS} modules composés de N_C cellules solaires identiques [52].

2.11 Calcul du photo courant

Soient une cellule solaire avec ses dimensions représentées sur la figure 2.14, elle est formée par deux régions N et P , la zone de charge d'espace ZCE se trouve entre x_j et $x_j + W$ où W est la largeur de cette zone [53].

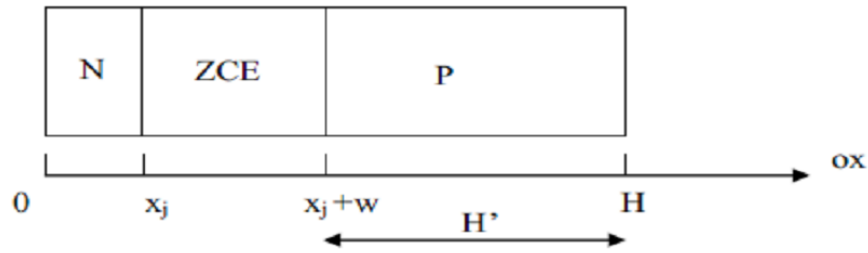


Figure 2.14 Dimensions de la cellule solaire [52].

Lorsqu'une lumière monochromatique de longueur d'onde λ arrive sur la surface d'un matériau semi-conducteur des porteurs libres seront créés sous l'effet des photons et contribuent au photo courant. Le taux de génération des paires électron-trou $G(x, \lambda)$ à une distance x de la surface est donné par la relation (2.16) :

$$G(x, \lambda) = \alpha(\lambda) \cdot F(\lambda) \cdot [1 - R(\lambda)] \cdot \exp(-\alpha(\lambda) \cdot x) \quad (2.16)$$

A partir des équations de continuité, en écrit, pour les trous dans le semi-conducteur de type N :

$$G_p - \frac{p_n - p_{n0}}{\tau_p} - \frac{1}{q} \cdot \frac{dJ_p}{dx} = 0 \quad (2.17)$$

Dans le cas d'un semi-conducteur de type P , les porteurs minoritaires sont les électrons, l'équation de continuité s'écrit :

$$G_n - \frac{n_p - n_{p0}}{\tau_n} + \frac{1}{q} \cdot \frac{dJ_n}{dx} = 0 \quad (2.18)$$

Où $J_n, J_p, G_p, G_n, \tau_n, \tau_p$ sont les densités de courant, les taux de génération et durées de vie des électrons et des trous respectivement, n_p, p_n les densités des porteurs minoritaires générées par la lumière, et n_{p0}, p_{n0} densités des porteurs minoritaires à l'équilibre thermodynamique.

Les équations de transport nous permettent d'obtenir les densités de courant des trous et des électrons, comme suit :

$$J_p = q \cdot \mu_p \cdot p_n \cdot \xi - q \cdot D_p \cdot \frac{dp_n}{dx} \quad (2.19.a)$$

$$J_n = q \cdot \mu_n \cdot n_p \cdot \xi + q \cdot D_n \cdot \frac{dn_p}{dx} \quad (2.19.b)$$

Où ξ est le champ électrique, μ_p , μ_n , D_p , D_n sont respectivement les mobilités et les coefficients de diffusion des trous et des électrons.

2.11.1 Courant dans la région quasi neutre de type N

Lorsque le dopage est uniforme dans les régions neutres, le champ électrique devient nul le long de ces régions (hors la zone de charge d'espace).

Dans le cas d'une cellule N/P, ou l'émetteur est de type N, et la base de type P, la combinaison des équations (2.16), (2.17) et (2.19.a) permet de donner l'expression qui traduit les phénomènes de la région d'émetteur :

$$D_p \cdot \frac{d^2 p_n}{dx^2} + \alpha \cdot F(1-R) \cdot \exp(-\alpha \cdot x) - \frac{p_n - p_{n0}}{\tau_p} = 0 \quad (2.20)$$

La solution générale de cette équation est :

$$p_n - p_{n0} = A \cdot \cosh(x/L_p) + B \cdot \sinh(x/L_p) - \frac{\alpha \cdot F(1-R) \cdot \tau_p}{\alpha^2 \cdot L_p^2 - 1} \cdot \exp(-\alpha \cdot x) \quad (2.21)$$

Où $L_p = \sqrt{D_p \cdot \tau_p}$ est la longueur de diffusion des trous. Tenant compte des conditions aux limites nous pouvons déterminer les constantes **A** et **B**.

- Une recombinaison en surface se produit à la surface de la cellule avec une vitesse de recombinaison S_p :

$$D_p \cdot \frac{d(p_n - p_{n0})}{dx} = S_p \cdot (p_n - p_{n0}) \text{ en } x = 0 \quad (2.22)$$

- A la limite de la jonction, la densité de porteurs en excès est petite, ceci est dû à l'effet du champ dans la région de déplétion:

$$(p_n - p_{n0}) \approx 0 \text{ en } x = x_j \quad (2.23)$$

A partir de ces deux conditions aux limites, nous pouvons déterminer les constantes **A** et **B** et par suite l'équation (2.21) devient:

$$p_n - p_{n0} = [\alpha F(1 - R)\tau_p / (\alpha^2 L_p^2 - 1)] \times \left[\frac{\left(\frac{S_p L_p}{D_p} + \alpha L_p \right) \sinh\left(\frac{x_j - x}{L_p}\right) + e^{-\alpha x_j} \left(\frac{S_p L_p}{D_p} \sinh\frac{x}{L_p} + \cosh\frac{x}{L_p} \right)}{(S_p L_p / D_p) \sinh(x_j / L_p) + \cosh(x_j / L_p)} - e^{-\alpha x} \right] \quad (2.24)$$

Et la densité de photo courant des trous dans la zone de déplétion ($x = x_j$) s'écrit :

$$J_p = -qD_p \left(\frac{dp_n}{dx} \right)_{x_j} = [qF(1 - R)\alpha L_p / (\alpha^2 L_p^2 - 1)] \times \left[\frac{\left(\frac{S_p L_p}{D_p} + \alpha L_p \right) \sinh\left(\frac{x_j - x}{L_p}\right) + e^{-\alpha x_j} \left(\frac{S_p L_p}{D_p} \cosh\frac{x_j}{L_p} + \sinh\frac{x_j}{L_p} \right)}{(S_p L_p / D_p) \sinh(x_j / L_p) + \cosh(x_j / L_p)} - e^{-\alpha x_j} \right] \quad (2.25)$$

Ce courant est la contribution de l'émetteur au photocourant total, ce photocourant est collecté par l'émetteur à une longueur d'onde donnée.

2.11.2 Courant dans la région quasi neutre de type P

Pour trouver le photo courant des électrons générés dans la base, les équations (2.16), (2.18) et (2.19) sont nécessaires avec les conditions aux limites suivantes:

De même que la région de l'émetteur, au bord de la zone de déplétion, la densité des porteurs minoritaires en excès est nulle :

$$(n_p - n_{p0}) \approx 0 \text{ en } x = x_j + W \quad (2.26)$$

A la surface arrière de la cellule, une recombinaison en surface prend place avec une vitesse de recombinaison S_n :

$$S_n(n_p - n_{p0}) = -D_n dn_p/dx \text{ en } x = H \quad (2.27)$$

En exploitant ces conditions aux limites, la distribution des électrons dans la base s'écrit :

$$n_p - n_{p0} = \frac{\alpha \cdot F(1 - R)\tau_n}{\alpha^2 L_n^2 - 1} \exp[-\alpha(x_j + W)] \left\{ \cosh\left(\frac{x - x_j - W}{L_n}\right) - e^{-[\alpha(x - x_j - W)]} \right. \\ \left. - \frac{(S_n L_n / D_n)[\cosh(H' / L_n) - \exp(-\alpha H')] + \sinh(H' / L_n) + \alpha L_n e^{-\alpha H'}}{(S_n L_n / D_n)\sinh(H' / L_n) + \cosh(H' / L_n)} \right. \\ \left. \times \sinh\left(\frac{x - x_j - W}{L_n}\right) \right\} \quad (2.28)$$

Le photo courant des électrons en $x = x_j + W$ s'écrit comme suit :

$$J_n = qD_n \left(\frac{dn_p}{dx} \right)_{x_j+W} = \frac{qF(1 - R)\alpha L_n}{\alpha^2 L_n^2 - 1} \exp[-\alpha(x_j + W)] \\ \times \left\{ \alpha L_n - \frac{(S_n L_n / D_n)[\cosh(H' / L_n) - \exp(-\alpha H')] + \sinh(H' / L_n) + \alpha L_n \exp(-\alpha H')}{((S_n L_n / D_n)\sinh(H' / L_n) + \cosh(H' / L_n))} \right\} \quad (2.29)$$

Où $H' = H - (x_j + W)$

2.11.3 Courant dans la région de charge d'espace

L'équation de continuité s'écrit pour les électrons

$$\frac{dn}{dt} = \frac{1}{q} \frac{dJ_{dr}}{dx} + g - r \quad (2.30)$$

Où J_{dr} est le courant généré dans la région de charge d'espace. A l'état stationnaire et en négligeant les processus de recombinaison, l'équation de continuité donne :

$$0 = \frac{1}{q} \frac{dJ_{dr}}{dx} + g \Rightarrow J_{dr} = -q \int_{x_j}^{x_j+W} g dx \quad (2.31)$$

Le taux de génération de photo porteurs s'écrit $g = F(1 - R)\alpha e^{-\alpha x}$. En portant cette expression de g dans l'équation (2.31) et en intégrant, on obtient

$$J_{dr} = -qF(1 - R)\exp(-\alpha x_j)[1 - \exp(-\alpha W)] \quad (2.32)$$

2.11.4 Courant total d'éclairement

La densité totale du courant d'éclairement par longueur d'onde de radiation incidente est la somme de courants dans les trois régions:

$$J(\lambda) = J_n(\lambda) + J_p(\lambda) + J_{dr}(\lambda) \quad (2.33)$$

2.12 Les constituants de base d'une cellule photovoltaïque

La cellule photovoltaïque est constituée de plusieurs couches, l'élément de base de ses structures est la jonction **PN** qui joue le rôle principal dans le dispositif solaire. Elle est le siège de la génération des porteurs et de leurs séparations.

Bien que différentes structures soient envisageables pour l'élaboration des cellules photovoltaïques, des parties similaires sont présentées dans chaque composant. La structure d'une cellule photovoltaïque standard industrielle est présentée sur la **figure 2.15**.

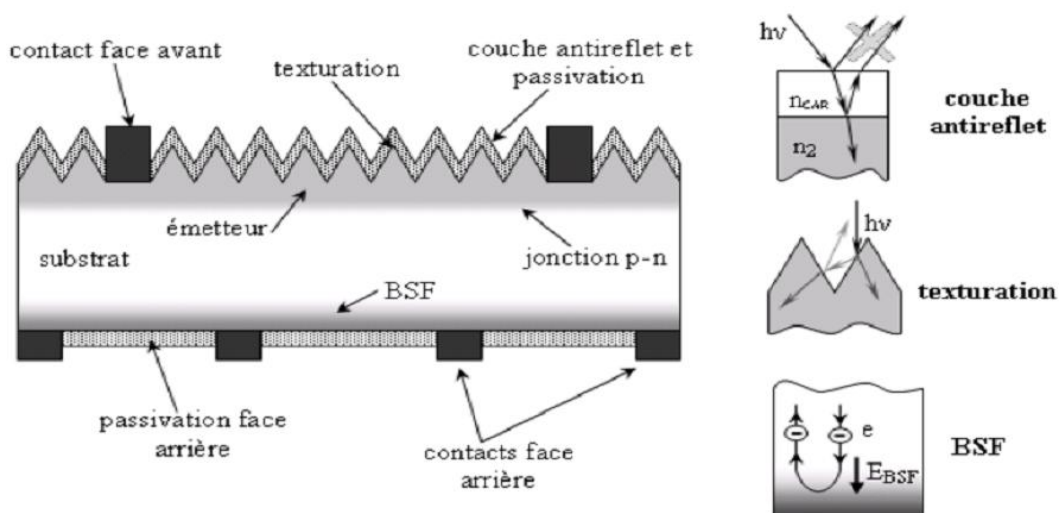


Figure 2.15 Composition d'une cellule photovoltaïque [52].

2.12.1 Contacts face avant et arrière

Les contacts métalliques de l'émetteur et du substrat servent à collecter le courant de porteurs photo générés. Les contacts doivent être ohmiques, c'est à dire que la caractéristique $I = f(V)$ du contact doit être linéaire. La résistance des contacts est un paramètre très important. La forte résistance des contacts augmente la résistance série de la cellule et baisse le facteur de forme ainsi que le rendement.

Les contacts sont généralement réalisés par sérigraphie. Les doigts de sérigraphie possèdent une largeur minimale de $100 \mu\text{m}$ et une épaisseur de $10 \mu\text{m}$ à $30 \mu\text{m}$ permettant de conduire une forte densité de courant. Pour les cellules photovoltaïques à haut rendement, la pulvérisation cathodique ou l'évaporation sous vide sont utilisées.

2.12.2 Couche anti-reflet

La quantité de photons pénétrant la cellule photovoltaïque dépend de la réflectivité de sa surface. La réflectivité caractérise la quantité de photons réfléchi par la surface, soit une perte du rayonnement incident. Pour minimiser la réflexion de la lumière en surface, cette dernière est recouverte d'une couche anti-réfléchissante (Anti-Reflective Coatings **CAR**). Le rôle de la couche anti-réfléchissante est de réduire la réflectivité de la cellule au niveau de la face avant. Sans couches anti-réfléchissantes, la cellule solaire agit comme un miroir et reflète jusqu'à 33% de la lumière incidente sur la cellule. Cette couche 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. Différentes couches anti réfléchissantes sont utilisées en photovoltaïque, elles peuvent être isolantes comme le TiO_2 , SiO_2 , ZnS , MgF_2 et SiNx ou conductrice comme le ZnO ou l'ITO.

La réflectivité dépend de l'indice de réfraction du matériau de l'épaisseur de la couche déposée, de l'angle d'incidence et de l'état de polarisation du rayon incident. Si l'épaisseur de la couche diélectrique est égale à :

$$d_{\text{CAR}} = \frac{(2N + 1) \cdot \lambda}{4n_{\text{CAR}}} \quad \text{avec } N = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (2.34)$$

On obtiendra l'annulation des faisceaux réfléchis à l'interface air/ **CAR** et **CAR** /semi-conducteur. Pour les cellules photovoltaïques à haut rendement, une double **CAR** est utilisée avec deux diélectriques différents.

2.12.3 Texturation de surface

La texturation du silicium est utilisée pour diminuer la réflectivité de la surface de la cellule. Cette opération vise à développer en surface un relief micrométrique, généralement de forme pyramidale.

La figure 2.15 présente le principe de réflexions multiples propre à la texturation. Le relief de la surface entraîne une baisse de la réflexion en face avant: un rayon arrivant à incidence normale (par rapport au plan de la cellule) sur une pyramide sera réfléchi sur la face d'une pyramide adjacente, cette double réflexion sur les pyramides diminue le coefficient de réflexion totale, qui ne vaut plus R mais R^2 . D'autre part, un rayon d'incidence normale sera transmis dans la cellule avec un angle de réfraction θ différent de 0° . Le trajet de ce rayon dans le silicium sera donc augmenté d'un facteur $1/\sin\theta$ par rapport au cas d'une surface plane et perpendiculaire à l'éclairement, ce qui aura pour effet d'augmenter la part de photons absorbés par le matériau. Pour finir, la texturation de la surface entraîne un piégeage plus important de la lumière pénétrant dans la cellule. Sur la face arrière de la cellule, il existe un angle d'incidence critique θ_c à partir duquel le rayon est totalement réfléchi et prolonge son trajet dans le semi-conducteur, augmentant là aussi l'absorption des photons. En appliquant la loi de Descartes, on trouve que cet angle vaut 17° dans le cas du silicium dans l'air.

2.12.4 BSF

Un **BSF** (Back Surface Field) est une couche fortement dopée sur la face arrière de la cellule. Cette zone a le même type de dopage que celui de la base, conduisant à une structure $P - P^+$. Ce dernier consiste à créer une barrière de potentiel sur la face arrière de la cellule pour assurer une passivation. La barrière de potentiel induite par la différence du niveau de dopage entre la base et le **BSF** tend à confiner les porteurs minoritaires dans la base. Donc le but du champ arrière est de diminuer la vitesse de recombinaison.

2.13 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons rappelé quelques notions de base relatives au rayonnement solaire, tels que le spectre solaire, l'air masse et les mécanismes de leurs interaction avec les semi-conducteurs pour produire une conversion photovoltaïque.

Nous avons décrit la cellule solaire, ses différents constituants, ses différents paramètres électriques (rendement, facteur de forme, le courant de court circuit, ...) et les expressions de base qui gouvernent tous les phénomènes physiques internes permettant la génération du photo-courant.

Nous avons aussi présenté son circuit équivalent, ainsi que ses différents montages constituants le panneau solaire.

Chapitre 3 :

Concept théorique des modèles physiques

3.1 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.

3.2 Equations fondamentales dans les semi-conducteurs

Des années de recherche dans la physique des dispositifs à la base des semi-conducteurs ont conduit à la réalisation d'un modèle mathématique [58]. 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 la 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 dû être réalisée afin de les appliquer à une grille d'éléments finis utilisés pour représenter le domaine de simulation.

3.2.1 Equation de Poisson

L'équation de Poisson s'exprime par :

$$\text{div}(\varepsilon \nabla \psi) = - \rho \quad (3.1)$$

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 donné par la relation :

$$\vec{E} = - \overrightarrow{\text{grad}} (\psi) \quad (3.2)$$

3.2.2 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 :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \text{div} \vec{J}_n + G_n - R_n \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q} \text{div} \vec{J}_p + G_p - R_p \quad (3.4)$$

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.

3.2.3 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 [59] (modèle isothermique de transport). Dans ce modèle, les densités de courants sont exprimées en fonction des quasi-niveaux de Fermi par les expressions :

$$\vec{J}_n = -q\mu_n n \nabla \phi_n \quad (3.5)$$

$$\vec{J}_p = -q\mu_p p \nabla \phi_p \quad (3.6)$$

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:

$$n = n_{ie} \exp \left[\frac{q(\psi - \phi_n)}{kT_L} \right] \quad (3.7)$$

$$p = n_{ie} \exp \left[\frac{q(\psi - \phi_p)}{kT_L} \right] \quad (3.8)$$

Avec n_{ie} la densité effective intrinsèque.

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

$$\vec{J}_n = qD_n \nabla n - qn \mu_n \nabla \psi - \mu_n n (kT_L \nabla (\ln n_{ie})) \quad (3.9)$$

$$\vec{J}_p = -qD_p \nabla p - qp \mu_p \nabla \psi + \mu_p p (kT_L \nabla (\ln n_{ie})) \quad (3.10)$$

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

$$D_n = \frac{kT}{q} \mu_n \quad (3.11)$$

$$D_p = \frac{kT}{q} \mu_p \quad (3.12)$$

a) 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 :

$$\vec{F} = -D \cdot \vec{\nabla}C \quad (3.13)$$

Le facteur de proportionnalité D s'appelle coefficient de diffusion. En appliquant la relation (3.13) pour les électrons ($C = n$, $D = D_n$) et les trous ($C = p$, $D = D_p$) nous trouvons les densités des courants de diffusion :

$$\vec{J}_{n,diff} = -q\vec{F}_n = qD_n \nabla n \quad (3.14)$$

$$\vec{J}_{p,diff} = q\vec{F}_p = -qD_p \nabla p \quad (3.15)$$

qui représente en pratique le premier terme des équations (3.9) et (3.10).

Notons que le troisième terme des équations (3.9) et (3.10) est aussi un courant de diffusion. Mais il est dû au gradient des densités effectives d'états n_{ie} .

b) 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 génère un déplacement moyen avec une vitesse donnée par :

$$\vec{v}_n = -\mu_n \vec{E} \quad \text{pour les électrons} \quad (3.16)$$

$$\vec{v}_p = \mu_p \vec{E} \quad \text{pour le trous} \quad (3.17)$$

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 :

$$\vec{J}_{n.drift} = -qn\vec{v}_n \quad (3.18)$$

$$\vec{J}_{p.drift} = qn\vec{v}_p \quad (3.19)$$

Ainsi le courant de drift est représenté dans le second terme des équations (3.9) et (3.10).

3.3 Génération optique

La génération introduite dans les équations de continuité (3.3) et (3.4) 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 (**figure 3.1**).

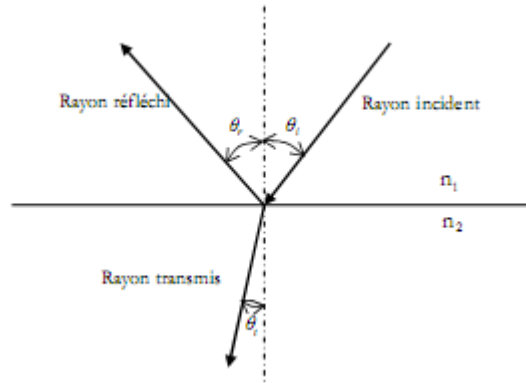


Figure 3.1 Les angles d'incidence, de réflexion et de transmission d'un rayon incident de lumière.

Les coefficients de réflexion R , et de transmission T , sont calculés ainsi :

$$R = \left(\frac{E_r}{E_i} \right)^2 \quad (3.20)$$

$$T = \left(\frac{E_t}{E_i} \right)^2 \frac{n_2 \cos \theta_t}{n_1 \cos \theta_i} \quad (3.21)$$

où E_i est l'intensité du rayon incident sous l'angle d'incidence θ_i par rapport à la normale à la surface d'incidence, E_r est l'intensité du rayon réfléchi, E_t est l'intensité du rayon transmis, n_1 représente l'indice de réfraction du milieu dans lequel se trouve la source de lumière et n_2 représente l'indice de réfraction du semi-conducteur. En fonction de la polarisation de la lumière, nous avons pour E_r et E_t les expressions suivantes:

$$\begin{cases} E_r = \frac{n_2 \cos \theta_i - n_1 \cos \theta_t}{n_1 \cos \theta_t + n_2 \cos \theta_i} E_i \\ E_t = \frac{2n_1 \cos \theta_i}{n_1 \cos \theta_t + n_2 \cos \theta_i} E_i \end{cases} \quad \text{polarisation parallèle} \quad (3.22)$$

$$\begin{cases} E_r = \frac{n_1 \cos \theta_i - n_2 \cos \theta_t}{n_1 \cos \theta_i + n_2 \cos \theta_t} E_i \\ E_t = \frac{2n_1 \cos \theta_i}{n_1 \cos \theta_i + n_2 \cos \theta_t} E_i \end{cases} \quad \text{polarisation perpendiculaire} \quad (3.23)$$

Notons aussi la relation suivante entre le coefficient d'extinction et l'indice de réfraction :

$$N = n + ik \quad (3.24)$$

où N représente l'indice optique complexe, k est le coefficient d'extinction du matériau traduisant l'absorption du rayonnement par le matériau, n est l'indice de réfraction. C'est le rapport entre la vitesse de propagation de la lumière dans le vide et la vitesse dans le milieu étudié. Le coefficient d'extinction k est lié au coefficient d'absorption α , pour chaque longueur d'onde λ , par la relation :

$$\alpha = \frac{4\pi}{\lambda} k \quad (3.25)$$

La **figure 3.2** représente l'évolution de l'indice de réfraction n et le coefficient d'extinction k du silicium en fonction de la longueur d'onde.

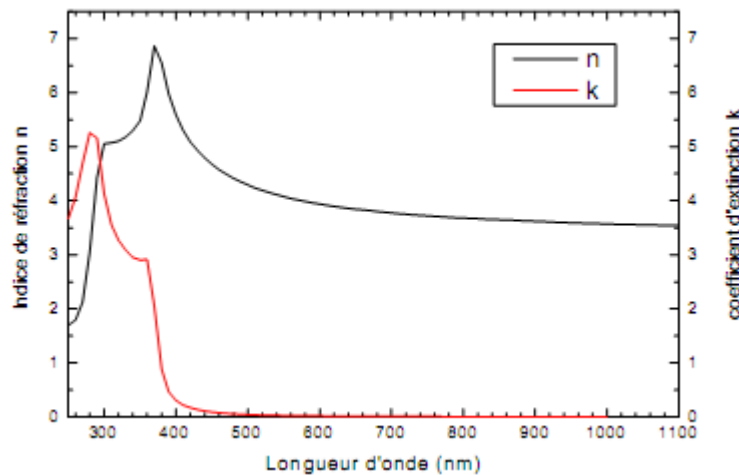


Figure 3.2 L'évolution de l'indice de réfraction n et le coefficient d'extinction k du silicium en fonction de la longueur d'onde [60].

On constate dans la **figure 3.2** que le coefficient d'extinction devient négligeable pour des longueurs d'ondes supérieures à 400nm. Dans ce cas, on peut alors considérer que l'indice de réfraction seulement.

La déviation de l'onde entre un milieu d'indice n_1 et un milieu d'indice n_2 est calculé selon les lois de Snell-Descartes :

$$\theta_r = \theta_i \quad \text{et} \quad n_1 \sin \theta_i = n_2 \sin \theta_t \quad (3.26)$$

θ_i est l'angle d'incidence (et de réflexion), θ_t est l'angle de réfraction.

Cette équation caractérise le chemin optique de l'onde transmise dans le deuxième milieu, pour le quel on définit le coefficient de transmission T . Le coefficient de transmission est le rapport entre les intensités transmise et incidente, il est compris entre 0 et 1 . De manière analogue, la part de l'onde réfléchi est définie par le coefficient de réflexion R . On a donc à l'interface :

$$R + T = 1 \quad (3.27)$$

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

$$G = \eta_0 \frac{P\lambda}{hc} \alpha e^{-\alpha y} \quad (3.28)$$

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.

Cette loi exponentielle d'absorption sera utilisée pour calculer le taux de génération optique. Mais cette méthode a quelques désavantages, par exemple les pertes optiques dues au piégeage de la lumière par diffusion et transmission ne sont pas prises en compte. Ils existent d'autres méthodes qui peuvent calculer la génération optique correctement. Ainsi avec la formule (3.25) s'achève la présentation de la physique de semi-conducteurs utilisé pour réaliser nos simulations.

3.4 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 [61]:

$$\tau = \frac{\Delta n}{U} \quad (3.29)$$

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.

3.4.1 Recombinaison SRH (Schokley-Read-Hall)

Le processus de recombinaison Schokley-Read-Hall est schématisé sur la **figure 3.3**. Il fut pour la première fois explicité par Schokley, Read [61] et Hall [62]. 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 :

$$R_{SRH} = \frac{pn - n_{ie}^2}{\tau_{p0} \left[n + n_{ie} \exp\left(\frac{E_t - E_i}{kT_L}\right) \right] + \tau_{n0} \left[p + n_{ie} \exp\left(\frac{-(E_t - E_i)}{kT_L}\right) \right]} \quad (3.30)$$

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.

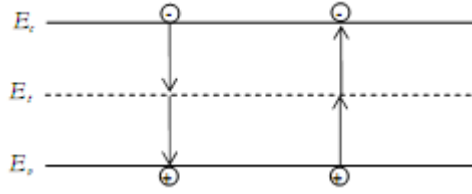


Figure 3.3 Mécanisme de recombinaison Schokley-Read-Hall (SRH).

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 3.1**. 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 3.1 Paramètres par défaut du modèle Schokley-Read-Hall dans Silvaco.

- ❖ La dépendance de la durée de vie du modèle SRH avec le dopage est donnée par les relations [63] :

$$\tau_n = \frac{TAUN0}{1 + N/(NSRHN)} \quad (3.31)$$

$$\tau_p = \frac{TAUN0}{1 + N/(NSRHP)} \quad (3.32)$$

On parle alors du modèle **CONSRH** qui est activé par le paramètre **CONSRH** de la commande **MODELS**, les paramètres **TAUN0**, **TAUP0**, **NSRHN** et **NSRHP** peuvent être définis par la commande **MATERIAL**. Le **tableau 3.2** représente leurs valeurs par défaut :

$$R_{SRH} = \frac{pn - n_{ie}^2}{\tau_p \left[n + n_{ie} \exp\left(\frac{E_t - E_i}{kT_L}\right) \right] + \tau_n \left[p + n_{ie} \exp\left(\frac{-(E_t - E_i)}{kT_L}\right) \right]} \quad (3.33)$$

Paramètre (unité)	($TAUN0 \leftrightarrow \tau_{n0}$) (s)	($TAUPO \leftrightarrow \tau_{p0}$) (s)	($NSRHN$) (cm^{-3})	($NSRHN$) (cm^{-3})
Défaut	1.0×10^{-7}	1.0×10^{-7}	5.0×10^{16}	5.0×10^{16}

Tableau 3.2 Paramètres par défaut du modèles CONSRH dans Silvaco [63].

- ❖ La dépendance de la durée de vie du modèle SRH avec la température est donnée par les deux relations de Klaassen [64]:

$$\tau_{n0}^{-1} = (\tau_{ksrhn}^{-1} + C_{ksrhn} \cdot n) \left(\frac{300}{T_L} \right)^{G_{ksrhn}} \quad (3.34)$$

$$\tau_{p0}^{-1} = (\tau_{ksrhp}^{-1} + C_{ksrhp} \cdot n) \left(\frac{300}{T_L} \right)^{G_{ksrhp}} \quad (3.35)$$

Où n est la concentration d'impureté totale, les autres paramètres $KSRHTN$, $KSRHTP$, $KSRHCN$, $KSRHCP$, $KSRHGN$ et $KSRHGP$ des relations (3.34) et (3.35) peuvent être définis par la commande **MATERIAL**, leurs valeurs par défaut sont donnés dans le **tableau 3.3**.

Paramètre (unité)	$\tau_{ksrhn} \leftrightarrow$ $KSRHTN$ (s)	$\tau_{ksrhp} \leftrightarrow$ $KSRHTP$ (s)	$C_{ksrhn} \leftrightarrow$ $KSRHCN$ (cm^3/s)	$C_{ksrhp} \leftrightarrow$ $KSRHCP$ (cm^3/s)	$G_{ksrhn} \leftrightarrow$ $KSRHGN$	$G_{ksrhp} \leftrightarrow$ $KSRHGP$
Défaut	2.5×10^{-3}	2.5×10^{-3}	3.0×10^{-13}	11.76×10^{-13}	1.77	0.57

Tableau 3.3 Paramètres par défaut des équations (3.34) et (3.35) dans Silvaco.

3.4.2 Recombinaison Auger

Le processus de recombinaison Auger est représenté sur la **figure 3.4**. 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, électron 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 [65]:

$$R_{Auger} = C_{Aug.n}(pn^2 - nn_{ie}^2) + C_{Aug.p}(np^2 - pn_{ie}^2) \quad (3.36)$$

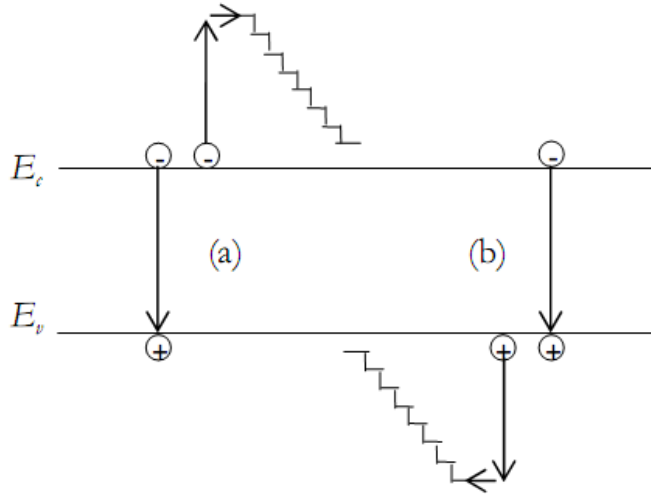


Figure 3.4 Mécanisme de recombinaison Auger. L'excès d'énergie issu de la recombinaison peut être transféré à un électron (a) ou à un trou (b).

Où $C_{Aug.n}$ et $C_{Aug.p}$ sont les coefficients Auger pour les électrons et les trous. Les valeurs par défaut de ces coefficients sont données dans le **tableau 3.4**. Ils peuvent être définis aussi par l'utilisateur par le paramètre **AUGER** de la commande **MODELS**.

Paramètre (unité)	(AUGN ↔ $C_{Aug.n}$) (cm^6/s)	(AUGP ↔ $C_{Aug.p}$) (cm^6/s)
Défaut	8.3×10^{-32}	1.8×10^{-31}

Tableau 3.4 Paramètres par défaut du modèle de recombinaison standard AUGER dans Silvaco.

❖ La dépendance du modèle Auger en fonction de la température et du niveau de dopage [66] est donnée par la relation suivante :

$$R_{Auger} = C_n(pn^2 - nn_{ie}^2) + C_p(np^2 - pn_{ie}^2) \quad (3.37)$$

Avec

$$C_n = \left(A_{Aug,n} + B_{Aug,n} \frac{T}{300} + C_{Aug,n} \left(\frac{T}{300} \right)^2 \right) \left(1 + H_{Aug,n} \exp \left(-\frac{n}{N_{0,n}} \right) \right) \quad (3.38)$$

$$C_p = \left(A_{Aug,p} + B_{Aug,p} \frac{T}{300} + C_{Aug,p} \left(\frac{T}{300} \right)^2 \right) \left(1 + H_{Aug,p} \exp \left(-\frac{p}{N_{0,p}} \right) \right) \quad (3.39)$$

Les paramètres des relations (3.38) et (3.39) sont définis par défaut dans les tableaux 3.5 et 3.6:

Paramètre (unité)	$A_{Aug,n}$ (cm^6/s)	$B_{Aug,n}$ (cm^6/s)	$C_{Aug,n}$ (cm^6/s)	$H_{Aug,n}$	$N_{0,n}$ (cm^{-3})
Défaut	6.7×10^{-32}	2.45×10^{-31}	-2.2×10^{-32}	3.4667	1.0×10^{18}

Tableau 3.5 Paramètres par défaut des équations 3.38 et 3.39 dans Silvaco.

Paramètre (unité)	$A_{Aug,p}$ (cm^6/s)	$B_{Aug,p}$ (cm^6/s)	$C_{Aug,p}$ (cm^6/s)	$H_{Aug,p}$	$N_{0,p}$ (cm^{-3})
Défaut	7.2×10^{-32}	4.5×10^{-33}	2.63×10^{-32}	8.25688	1.1×10^{18}

Tableau 3.6 Paramètres par défaut des équations (3.38) et (3.39) dans Silvaco.

Ce mode de recombinaison va donc prédominer pour les forts niveaux d'injection (cas des cellules solaire à concentration) ou pour les dopages importants dépassant $10^{17} cm^{-3}$ [67] (cas des émetteurs fortement dopés). En effet, comme illustre la figure 3.5, le mécanisme de recombinaison Auger est proportionnel au 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 à la zone de champ de surface arrière (p^+). Aux faibles niveaux de dopage (inférieur à $10^{16} cm^{-3}$), la durée de vie est limitée par la recombinaison SRH et elle varie linéairement avec l'inverse du niveau de dopage.

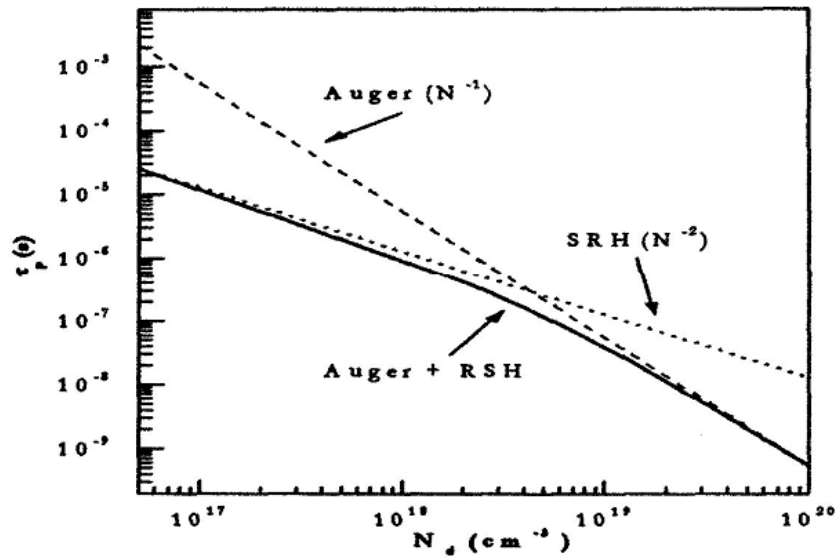


Figure 3.5 Influence du dopage sur les durées de vie Auger et SRH dans le volume du Silicium [68].

3.4.3 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 photogénération). Le mécanisme de recombinaison radiative est un processus dominant dans les semiconducteurs 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.

3.4.4 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 3.6**. 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 :

$$R_{surf} = \frac{pn - n_i^2}{\tau_p^{eff} \left[n + n_{ie} \exp\left(\frac{E_t - E_i}{kT_L}\right) \right] + \tau_n^{eff} \left[n + n_{ie} \exp\left(\frac{-(E_t - E_i)}{kT_L}\right) \right]} \quad (3.40)$$

Où :

$$\frac{1}{\tau_n^{eff}} = \frac{1}{\tau_n^i} + \frac{d_i}{A_i} S_n \quad (3.41)$$

$$\frac{1}{\tau_p^{eff}} = \frac{1}{\tau_p^i} + \frac{d_i}{A_i} S_p \quad (3.42)$$

τ_n^{eff} 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, $S_n = S_p = 0 \text{ cm/s}$.

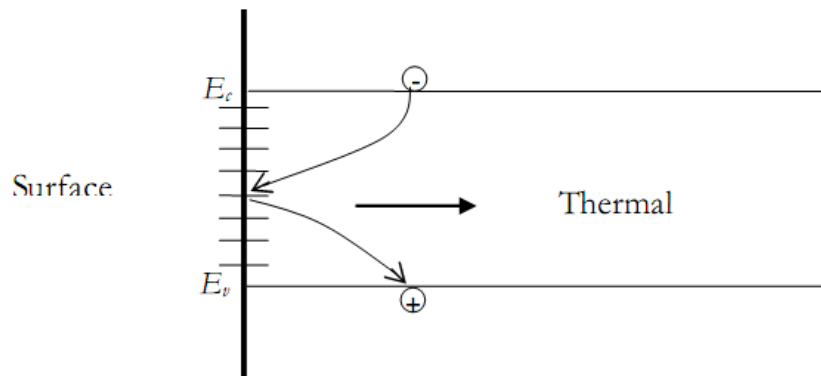


Figure 3.6 Mécanisme de recombinaison en surface.

Pour des surfaces fortement dopées, le mécanisme de recombinaison Auger domine la vitesse de recombinaison en surface. Un modèle développé par Cuevas et al [69] permet de déterminer la vitesse de recombinaison effective (figure 3.7).

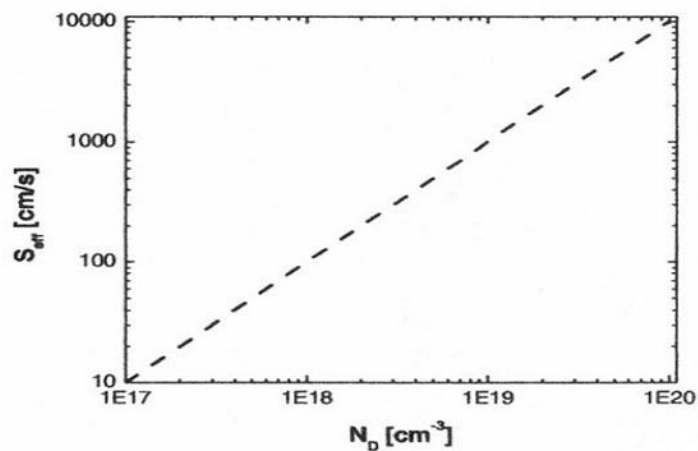


Figure 3.7 Vitesse de recombinaison effective de surface en fonction du niveau de dopage [69].

3.5 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.

3.5.1 Modèle de mobilité « Caughey et Thomas »

Sous fort champ électrique (par exemple dans la zone de charge d'espace de la jonction ($P - N$)) 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 [70] implémentée dans SILVACO met en évidence la dépendance de la mobilité en fonction d'un fort champ électrique.

Les expressions de la mobilité des électrons et des trous sont données par :

$$\mu_n(E) = \mu_{n0} \left[\frac{1}{1 + \left(\frac{\mu_{n0} E}{v_{sat.n}} \right)^{\beta.n}} \right]^{1/\beta.n} \quad (3.43)$$

$$\mu_p(E) = \mu_{p0} \left[\frac{1}{1 + \left(\frac{\mu_{p0} E}{v_{sat.p}} \right)^{\beta.p}} \right]^{1/\beta.p} \quad (3.44)$$

Où E est le champ électrique parallèle ; $v_{sat.n}$ et $v_{sat.p}$ sont les vitesses de saturation des électrons et des trous ; $\beta.n$ et $\beta.p$ sont les coefficients de l'exposant.

❖ Les vitesses de saturation sont calculées par défaut à partir des modèles qui dépendent de la température [71]. Elles sont données par :

$$v_{sat.n} = \frac{a_{fld.n}}{1 + \theta_{fld.n} \exp\left(\frac{T_L}{T_{fld.n}}\right)} \quad (3.45)$$

$$v_{sat.p} = \frac{a_{fld.p}}{1 + \theta_{fld.p} \exp\left(\frac{T_L}{T_{fld.p}}\right)} \quad (3.46)$$

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

Paramètre (unité)	$\beta.n$	$\beta.p$	$a_{fld.n}$ (cm/s)	$a_{fld.p}$ (cm/s)	$\theta_{fld.n}$	$\theta_{fld.p}$	$T_{fld.n}$ (K)	$T_{fld.p}$ (K)
Défaut	2.0	1.0	2.4×10^7	2.4×10^7	0.8	0.8	600	600

Tableau 3.7 Paramètres utilisés par défaut dans Silvaco pour le modèle de mobilité qui dépend du champ électrique.

- ❖ les mobilités des électrons et des trous dans un faible champ électrique μ_{n0} et μ_{p0} , dépendants du dopage et de la température, sont données par les relations (3.47) et (3.48), C'est le modèle analytique de mobilité à faible champ électrique [63];

$$\mu_{n0} = MU1N.CAUG. \left(\frac{T_L}{300K} \right)^{ALPHAN.CAUG} + \frac{MU2N.CAUG. \left(\frac{T_L}{300K} \right)^{BETAN.CAUG} - MU1N.CAUG. \left(\frac{T_L}{300K} \right)^{ALPHAN.CAUG}}{1 + \left(\frac{T_L}{300K} \right)^{GAMMAN.CAUG} \cdot \left(\frac{N}{NCRITN.CAUG} \right)^{DELTAN.CAUG}} \quad (3.47)$$

$$\mu_{p0} = MU1P.CAUG. \left(\frac{T_L}{300K} \right)^{ALPHAP.CAUG} + \frac{MU2P.CAUG. \left(\frac{T_L}{300K} \right)^{BETAP.CAUG} - MU1P.CAUG. \left(\frac{T_L}{300K} \right)^{ALPHAP.CAUG}}{1 + \left(\frac{T_L}{300K} \right)^{GAMMAP.CAUG} \cdot \left(\frac{N}{NCRITP.CAUG} \right)^{DELTAP.CAUG}} \quad (3.48)$$

Où N est la concentration exprimé en cm^{-3} et T_L est la température en Kelvin.

Ce modèle est activé en spécifiant les deux paramètres suivant **CONMOB** et **ANALYTIC** dans la commande **MODELS**. Les paramètres de ce modèle sont déclarés dans la commande **MOBILITY**. Leurs paramètres utilisés par défaut pour le silicium dans Silvaco sont indiqués dans les tableaux 3.8, 3.9 et 3.10.

Paramètre (unité)	MU1N.CAUG $cm^2/(V.s)$	MU1P.CAUG $cm^2/(V.s)$	MU2N.CAUG $cm^2/(V.s)$	MU2P.CAUG $cm^2/(V.s)$	ALPHAN.CAUG	ALPHAP.CAUG
Défaut	55.24	49.7	1429.23	479.37	0.0	0.0

Tableau 3.8 Paramètres utilisés par défaut dans Atlas pour le modèle de mobilité dépendant du dopage et de la température [63].

Paramètre (unité)	BETAN.CAUG	BETAP.CAUG	GAMMAN.CAUG	GAMMAP.CAUG
Défaut	-2.3	-2.2	-3.8	-3.7

Tableau 3.9 Paramètres utilisés par défaut dans Atlas pour le modèle de mobilité dépendant du dopage et de la température [63].

Paramètre (unité)	DELTAN.CAUG	DELTAP.CAUG	NCRITN.CAUG cm^{-3}	NCRITP.CAUG cm^{-3}
Défaut	0.73	0.70	1.072×10^{17}	1.606×10^{17}

Tableau 3.10 Paramètres utilisés par défaut des équations (3.47) et (3.48) dans Atlas pour le modèle de mobilité dépendant du dopage et de la température [63].

3.5.2 Modèle de mobilité « Massetti »

Dans un semi-conducteur dopé, 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 Massetti [72].

Les expressions de la mobilité des électrons et des trous sont données par :

$$\mu_n = \mu_{min1.n} \exp\left(\frac{-P_{c.n}}{N}\right) + \frac{\mu_{max.n} - \mu_{min2.n}}{1 + \left(\frac{N}{C_{r.n}}\right)^{a.n}} - \frac{\mu_{1.n}}{1 + \left(\frac{C_{s.n}}{N}\right)^{\beta.n}} \quad (3.49)$$

$$\mu_p = \mu_{min1.p} \exp\left(\frac{-P_{c.p}}{N}\right) + \frac{\mu_{max.p} - \mu_{min2.p}}{1 + \left(\frac{N}{C_{r.p}}\right)^{a.p}} - \frac{\mu_{1.p}}{1 + \left(\frac{C_{s.p}}{N}\right)^{\beta.p}} \quad (3.50)$$

Où N est la concentration totale des impuretés ionisées ; $\mu_{max.n}$ et $\mu_{max.p}$ 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 ; $a.n$, $\beta.n$, $a.p$, $\beta.p$ sont des coefficients de l'exposant.

Les tableaux 3.11 et 3.12 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).

$\mu_{min1.n}$ $cm^2/(V.s)$	$\mu_{min2.n}$ $cm^2/(V.s)$	$\mu_{max.n}$ $cm^2/(V.s)$	$\mu_{1.n}$ $cm^2/(V.s)$	$P_{c.n}$ cm^{-3}	$C_{r.n}$ cm^{-3}	$C_{s.n}$ cm^{-3}	$a.n$	$\beta.n$
68.5	68.5	1414	56.1	0.0	9.2×10^{16}	3.41×10^{20}	0.711	1.98

Tableau 3.11 Paramètres par défaut dans Silvaco pour le modèle de mobilité (Masetti) des électrons en introduisant le phosphore dans le silicium.

$\mu_{min1.p}$ $cm^2/(V.s)$	$\mu_{min2.p}$ $cm^2/(V.s)$	$\mu_{max.p}$ $cm^2/(V.s)$	$\mu_{1.p}$ $cm^2/(V.s)$	$P_{c.p}$ cm^{-3}	$C_{r.p}$ cm^{-3}	$C_{s.p}$ cm^{-3}	$a.p$	$\beta.p$
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 3.12 Paramètres utilisés par défaut dans Silvaco pour le modèle de (Masetti) des trous en introduisant le bore dans le silicium.

3.5.3 Modèle de mobilité « Canali »

Le modèle de Canali a été implémenté en fixant les valeurs de $\beta.n$ et $\beta.p$ dans le modèle de Caughey-Thomas [73]. Les expressions sont données par :

$$\beta.n = \beta_{0.n} \left(\frac{T_L}{300} \right)^{\beta_{exp.n}} \quad (3.51)$$

$$\beta.p = \beta_{0.p} \left(\frac{T_L}{300} \right)^{\beta_{exp.p}} \quad (3.52)$$

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

Le **tableau 3.13** indique les paramètres utilisés par défaut dans SILVACO pour le modèle de Canali.

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

Tableau 3.13 Paramètres utilisés défaut par défaut dans Silvaco pour le modèle de Canali.

3.6 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 [74] [75]:

1. Les limites des bandes de valence et de conduction développent des queues et pénètrent dans la bande interdite.
2. Si la concentration des impuretés donneurs 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 [76] est donnée par :

$$\Delta E_g(N) = \begin{cases} -E_{bgn} \left[\log \left(\frac{N}{N_{bgn}} \right) \right]^2 & \text{si } N \geq N_{bgn} \\ 0 & \text{si } N < N_{bgn} \end{cases} \quad (3.53)$$

Et la formule de Del-Alamo [76,77] est donnée par :

$$\Delta E_g(N) = \begin{cases} -E_{bgn} \left[\log \left(\frac{N}{N_{bgn}} \right) \right] & \text{si } N \geq N_{bgn} \\ 0 & \text{si } N < N_{bgn} \end{cases} \quad (3.54)$$

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} .

Le **tableau 3.14** représente les paramètres utilisés par défaut des modèles de Bennett-Wilson et Del-Alamo pour le silicium.

Modèle	E_{bgn}	N_{bgn}
Bennett-Wilson	6.84×10^{-3}	3.162×10^{18}
Del-Alamo	1.87×10^{-2}	7.0×10^{17}

Tableau 3.14 Paramètres utilisés par défaut dans Silvaco pour les modèles de Bennett-Wilson et Del-Alamo.

3.7 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.

Chapitre 4 :

Le simulateur Atlas TCAD Silvaco

4.1 Introduction

SILVACO (Silicon Valley Corporation) est une société Américaine, ayant son siège à Santa Clara en Californie. Elle est un des principaux fournisseurs de chaînes professionnelles de logiciels de simulation par éléments finis et de conception assistée par ordinateur pour les technologies de l'électronique TCAD (Technology Computer Aided Design). Ces outils sont employés par les compagnies de microélectronique dans le domaine de la recherche, du développement et de la conception de dispositifs.

Historiquement la compagnie a été fondée en 1984 par Dr. Ivan Pesic pour répondre aux besoins des designers de circuits intégrés (IC, integrated circuits) analogiques pour des modèles SPICE (Simulation Program with Integrated Circuit Emphasis) de plus en plus précises et linéaires.

L'entrée de SILVACO dans la technologie **TCAD** a eu lieu en 1989, et elle a été basée sur une recherche du Département des Dispositifs Physiques de l'Université de Stanford, ainsi apparaissent dans SILVACO « Athena » comme simulateur des processus et « Atlas » comme simulateur des dispositifs (2D et 3D).

SILVACO n'a pas été conçu pour répondre à un seul composant semi-conducteur. En incluant des modèles plus généraux de la physique des semi-conducteurs, il permet des simulations plus étendues en balayant toute une gamme de composants électroniques.

4.2 Présentation d'Atlas

La capacité à simuler avec précision un dispositif semi-conducteur est cruciale pour l'industrie et milieu de recherche. L'outil de simulation ATLAS est spécialement conçu pour la modélisation 2D et 3D de composants basés sur la physique des semi conducteurs, en incluant les propriétés électriques, optiques et thermiques. Il possède une bibliothèque regroupant des matériaux prédéfinis comme il permet à l'utilisateur de définir d'autres matériaux propre à leur choix.

Il est capable de prédire les caractéristiques électriques de la plupart des composants semi-conducteurs en régime (DC), (AC), transitoire ou fréquentiel. En plus du comportement électrique "externe", il fournit des informations sur la distribution interne de variables telles que les concentrations des porteurs, les lignes de courant, le champ électrique ou le potentiel, et des données importantes pour la conception et l'optimisation des procédés technologiques. Ceci est réalisé en résolvant numériquement l'équation de Poisson et les équations de continuité des

électrons et des trous en deux dimensions en un nombre fini de points formant le maillage de la structure définie par l'utilisateur ou par le programme.

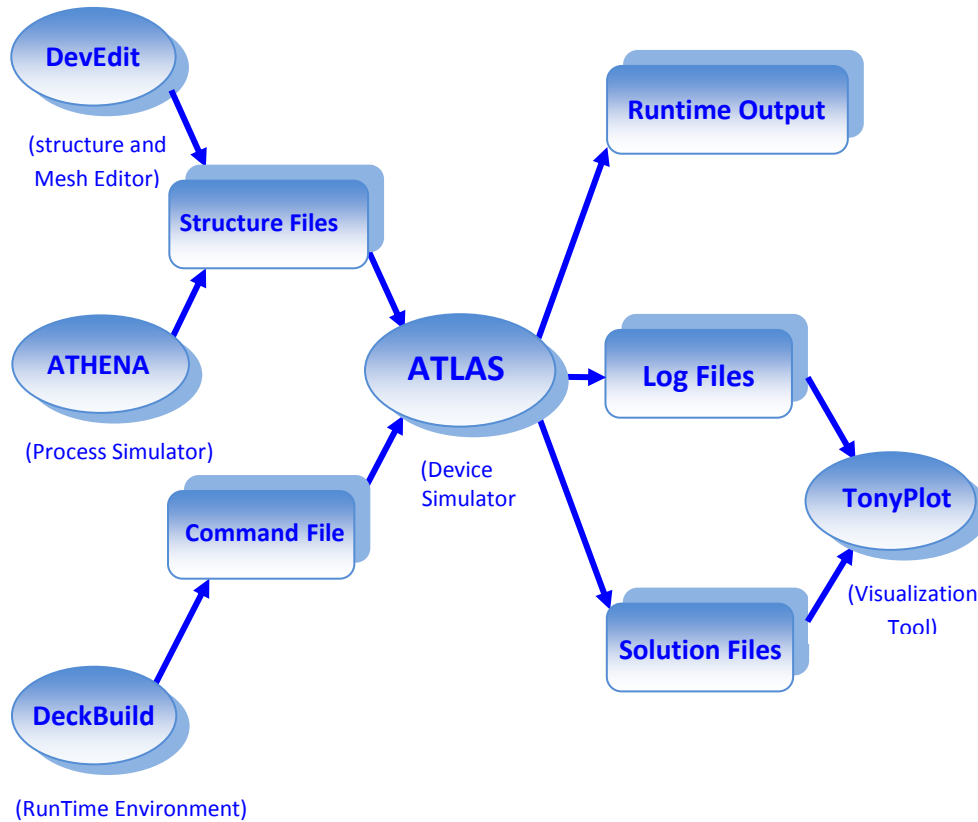


Figure 4.1 Entrées et sorties d'Atlas [63].

Le schéma de la **Figure 4.1** représente les différents types d'informations qui circulent en entrée et en sortie « d'Atlas ». La plupart des simulations réalisées sous « Atlas » utilisent deux fichiers d'entrée. Le premier fichier est un fichier texte contenant les commandes pour que Atlas s'exécute (représenté par « Fichier de commande »). Le second fichier est un « Fichier de structure » contenant la structure du dispositif qui va être simulée définie dans « Athena » ou « DevEdit ». A la sortie « d'Atlas », nous avons trois types de fichiers. Le premier de ces fichiers est la sortie « Runtime » qui donne la progression, les erreurs et les messages d'avertissement pendant la simulation. Le deuxième type de fichier est le fichier « log » qui stocke toutes les valeurs de tensions et des courants provenant de l'analyse du dispositif simulé (c'est le fichier du comportement électrique).

Le troisième fichier de sortie est le « Fichier de solution », ce fichier stocke les données 2D ou 3D concernant les valeurs des variables solutions en un point donné du dispositif

(c'est le fichier physique, il contient la structure dans un état particulier). Les deux derniers fichiers sont traités par l'outil de visualisation « TonyPlot ».

4.3 Ordres de commandes d'Atlas

Après la présentation de l'outil de simulation « d'Atlas » de SILVACO TCAD, sa composition interne et son fonctionnement nous allons maintenant présenter l'ordre des commandes propres à la logique de programmation « d'Atlas ». Ainsi il existe cinq groupes de commandes, ces groupes doivent être organisés correctement (**Figure 4.2**). Si l'ordre n'est pas respecté, un message d'erreur apparaît et le programme ne s'exécute pas d'une façon correcte. Par exemple, si les paramètres ou les modèles de matériaux ne sont pas placés dans l'ordre idoine, le simulateur ne les prend pas en compte.

Groupe		Commandes
1. Spécification de la structure	—————	MESH REGION ELECTRODE DOPING
2. Spécification des modèles des matériaux	—————	MATERIAL MODELS CONTACT INTERFACE
3. Sélection de la méthode	—————	METHOD
4. Spécification des solutions	—————	LOG SOLVE LOAD SAVE
5. Analyse des résultats	—————	EXTRACT TONYPLOT

Figure 4.2 Ordre des groupes des commandes d'Atlas (Les commandes fondamentales afférentes) [63].

Les commandes fondamentales sont :

- **MESH** : cette commande produit un maillage ou lit un maillage qui a été défini auparavant. L'élément de maille utilisé est le triangle.
- **REGION** : c'est une instruction qui définit une région dans une structure.
- **ELECTRODE** : indique l'endroit et les noms des électrodes dans une structure.

- **DOPING** : indique le type et le profil de dopage.
- **MATERIAL** : associe des paramètres physiques aux matériaux utilisés dans la simulation par exemple : affinité électronique, énergie de gap, la fonction de la densité des états, les vitesses de saturation, les durées de vie des porteurs minoritaires, etc (Il faut faire attention parce que le logiciel a des paramètres de matériau définis par défaut pour les semi-conducteurs standards)
- **MODELS** : Cette instruction permet de faire appel aux modèles physiques existants dans le logiciel, nous pouvons citer comme exemples les modèles de recombinaison Shockley Read Hall (SRH), Auger et les modèles concernant les statistiques des porteurs de Boltzmann, Fermi, etc ...
- **CONTACT** : indique les attributs physiques d'une électrode : anode, cathode, drain, etc ...
- **INTERFACE** : indique les paramètres d'interface aux frontières de semi-conducteur/isolant, comme exemple, la vitesse de recombinaison en surface et la densité de charge à l'interface.
- **METHOD** : place les méthodes numériques à employer pour résoudre les équations et les paramètres liés à ces algorithmes. Les méthodes numériques qui peuvent être spécifiées par cette instruction incluent des méthodes telles que celles de Gummel et de Newton.
- **LOG** : permet à toutes les caractéristiques finales de simulation d'être sauvées dans un fichier (ouvre un fichier de type log (log en minuscule veut dire le type de fichier, LOG en majuscule veut dire la commande dans le programme)). N'importe quel type de donnée, qu'elle soit C.C., transitoire ou C.A., générée par la commande SOLVE est sauvée après la commande LOG (donc les informations sauvées sont de type électrique et elles sont, par exemple, en fonction de la tension de polarisation ou de la source de lumière). Si dans le programme il y a plusieurs commandes LOG, chaque fois le fichier log qui a été ouvert avant est fermé et un nouveau fichier log est ouvert.
- **SOLVE** : ordonne à Atlas d'exécuter une solution pour un ou plusieurs points de polarisation.
- **LOAD** : charge des solutions précédentes à partir de fichiers en tant que conditions initiales à d'autres points de polarisation.
- **SAVE** : sauve toutes les informations d'un point nœud du maillage dans un fichier de sortie (les fichiers de sortie sont de type structure). Les informations sauvées correspondent à un état électrique bien précis.
- **EXTRACT** : les commandes de ce type sont utilisées pour extraire les valeurs bien précises des paramètres des deux types des fichiers log ou solution.
- **TONYPLOT** : démarre le programme « TonyPlot » de post processus graphique des données. Elle permet de présenter les solutions trouvées pendant la simulation sous forme de graphe.

Une autre commande importante est **BEAM**, sa position est au niveau 4 des groupes de commande. BEAM indique un signal d'entrée optique sous forme d'un faisceau de lumière (mono ou multi-spectrale) collimatée. Le faisceau ainsi déclaré est allumé et utilisé par la commande SOLVE, dans ce cas le module **Luminous** est activé. Donc BEAM est utilisé pour simuler des courants sous lumière ou des réponses spectrales .

4.4 Spécification de la structure

Silvaco Atlas reçoit les fichiers d'entrée qui contient les programmes de simulation de DeckBuilt. Atlas est appelé à exécuter ces derniers par la commande suivante : **go atlas**
Le format des commandes d'Atlas est le suivant [63]:

< STATEMENT> <PARAMETER>=<VALUE>

Exemple : DOPING UNIFORM N.TYPE CONCENTRATION=1.0^e16 REGION=1 \
OUTFILE=my.dop

La commande est DOPING, les paramètres sont UNIFORM, N.TYPE, REGION, OUTFILE, CONCENTRATION. Il existe quatre types de paramètres: réel, entier, caractère et logique. L'anti slash (\) indique la continuité de la commande dans la ligne suivante. Le paramètre UNIFORM est logique, il prend une valeur par défaut lorsqu'aucune valeur ne lui est attribué. Il faut consulter le manuel de Silvaco Atlas pour identifier les valeurs par défaut assignées aux paramètres spécifiés.

La spécification de la structure est obtenue par identification du maillage, des régions, des électrodes et du dopage.

4.4.1 Mesh

Le maillage adopté dans notre travail est bidimensionnel. Par conséquent on définit seulement les paramètres x et y. Le maillage est une série de lignes horizontales et verticales espacées entre elles. La **Figure 4.3**, indique un maillage d'une structure.

Le format général pour définir le maillage est :

X.MESH LOCATION=<VALUE> SPACING=<VALUE>

Y.MESH LOCATION=<VALUE> SPACING=<VALUE>

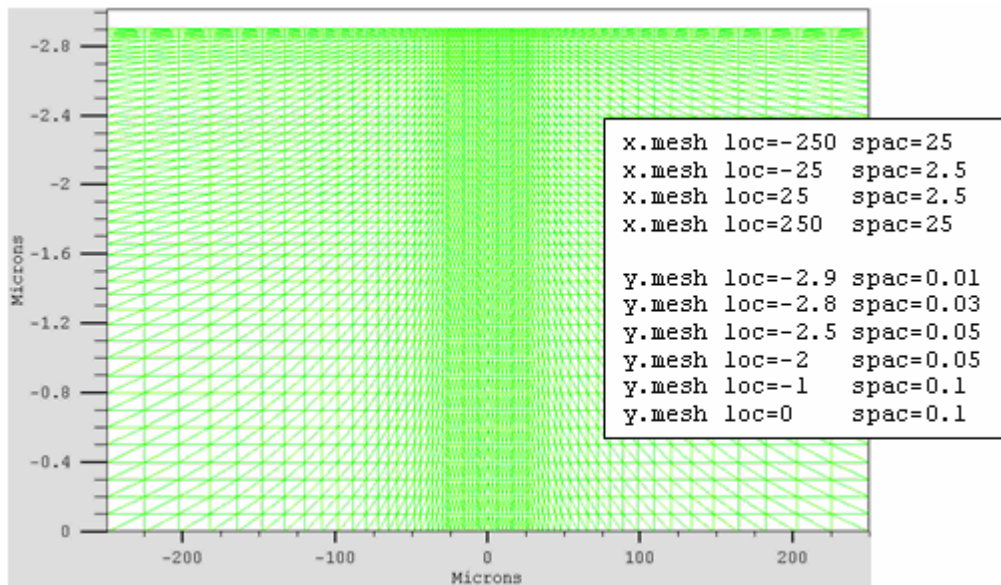


Figure 4.3 Définition du maillage avec Atlas [78].

Par exemple, x.mesh à $-250 \mu\text{m}$ a un espacement de $25 \mu\text{m}$, Il est relativement grossier. Il devient fin entre -25 et $25 \mu\text{m}$ avec un espacement de $2.5 \mu\text{m}$. y.mesh est défini d'une façon similaire. Par exemple pour y.mesh de $-2.9 \mu\text{m}$ l'espacement est de $0.01 \mu\text{m}$, puis pour y.mesh de $-2.8 \mu\text{m}$ l'espacement change à $0.03 \mu\text{m}$. Le maillage est grossier (épais) quand y.mesh prend la valeur $-1 \mu\text{m}$ avec un espacement de $0.1 \mu\text{m}$.

Un maillage grossier ou fin détermine la précision de la simulation. Le maillage grossier produit une simulation rapide avec des résultats moins précis. Le maillage fin produit une simulation lente avec des résultats plus précis. Les zones qui ont un maillage fin ont un grand intérêt dans la simulation.

4.4.2 Region

Après avoir déterminé le maillage, il est maintenant nécessaire de définir les régions. Le format pour définir les régions est comme suit :

REGION number=<integer> <material_type> <position parameters>

La Figure 4.4 montre les commandes utilisées pour identifier les régions. On distingue bien six régions, les limites de chaque région sont explicitement identifiées dans les axes x et y . Il reste à attribuer pour chaque région un matériau.

Sur la **Figure 4.5** on peut voir les commandes utilisées pour définir le matériau utilisé pour chaque région. On utilise le code des couleurs pour identifier les matériaux (chaque matériau lui correspond une couleur). Les limites de chaque région sont marquées par des lignes verticales et horizontales.

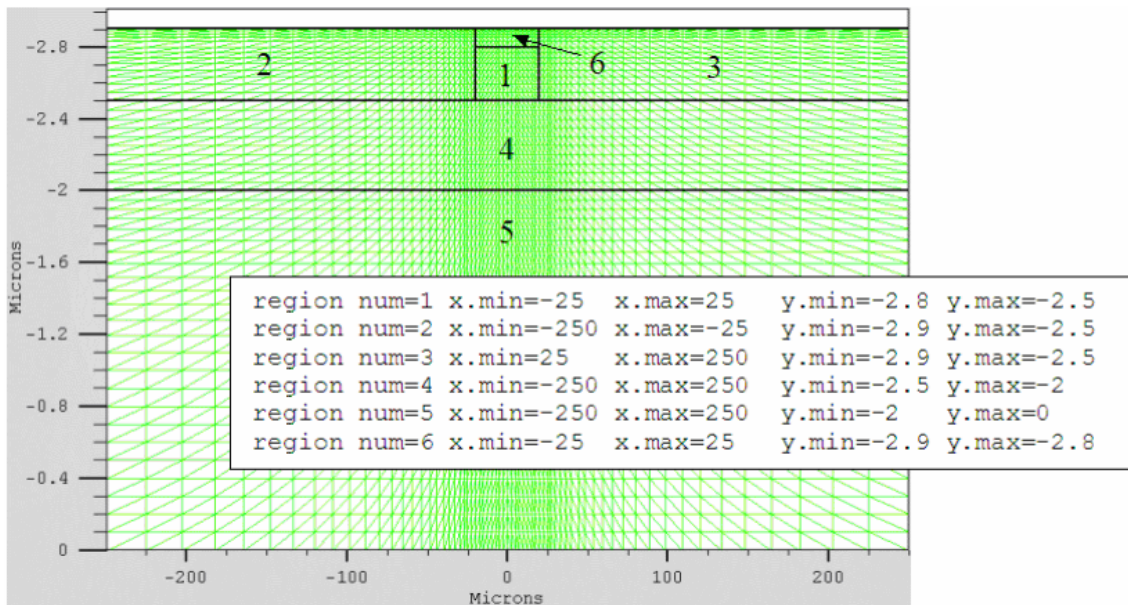


Figure 4.4 Définition des régions avec Atlas [78].

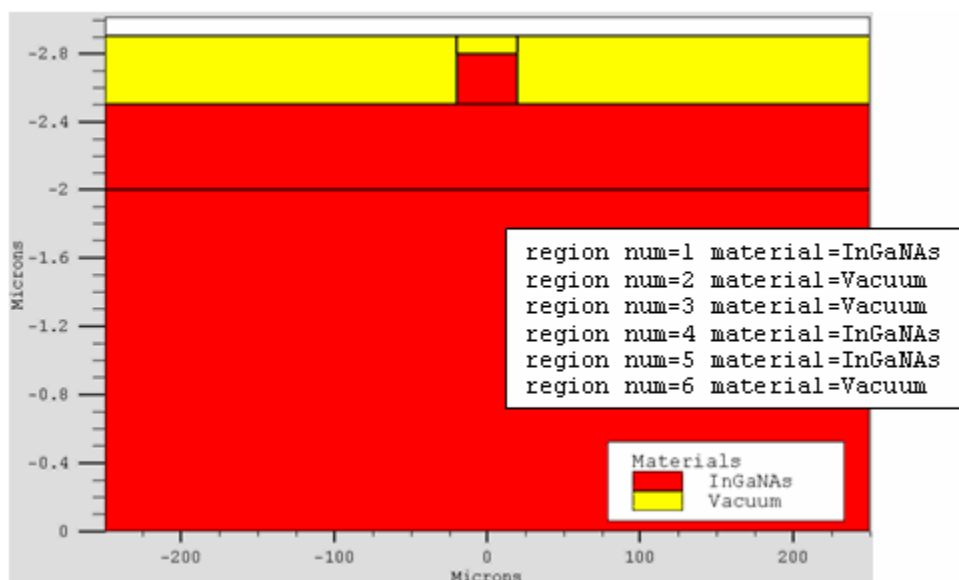


Figure 4.5 Attribution de matériaux pour les régions avec Atlas [78].

4.4.3 Electrodes

La prochaine spécification de la structure correspond aux électrodes (**Figure 4.6**). Typiquement dans notre simulation, il n'ya que deux électrodes, l'anode et la cathode. Le nombre d'électrodes qu'on peut définir avec Silvaco Atlas peut aller jusqu'à **50**. Le format pour définir les régions est le suivant :

ELECTRODE NAME=<electrode name> <position parameters>

Sur la figure la commande « Electrode » est utilisée pour définir l'anode et la cathode. Le matériau attribué à la cathode est l'or dont les dimensions sur les axes x et y correspondent à la région **6** définie précédemment. Entre-temps, l'anode est définie est définie au fond de la cellule tout au long de sa largeur à $y = 0$.

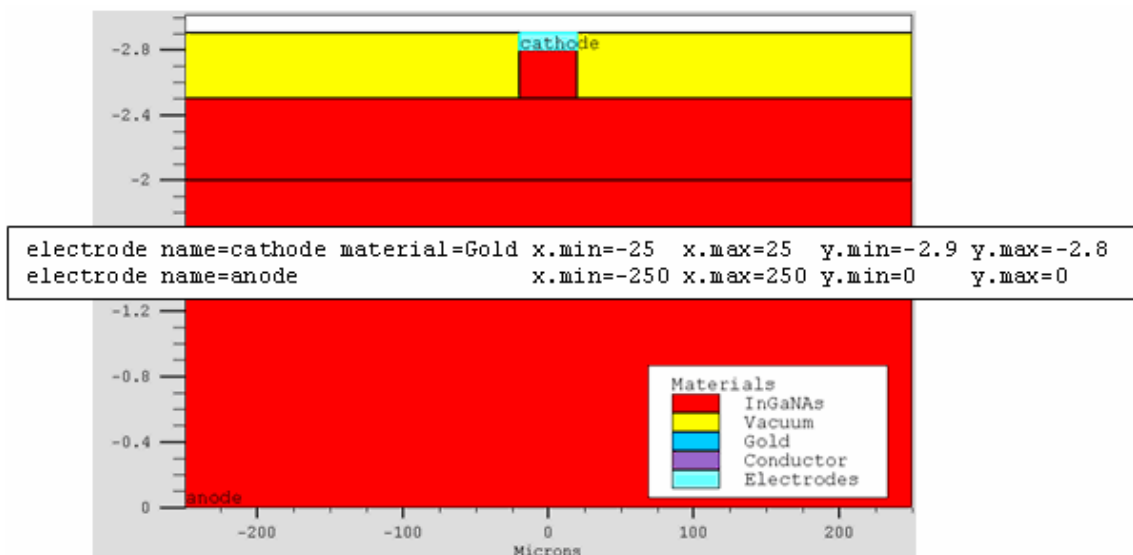


Figure 4.6 Définition des électrodes avec Atlas [78].

4.4.4 Doping

La dernière spécification de la structure est le dopage. Le format pour définir le dopage est le suivant :

DOPING<distribution type> <dopant_type> <position parameters>

La **Figure 4.7** montre les types et les niveaux de dopages utilisés dans notre structure. Le dopage peut être du type **N** ou du type **P**, la distribution peut être uniforme ou gaussienne.

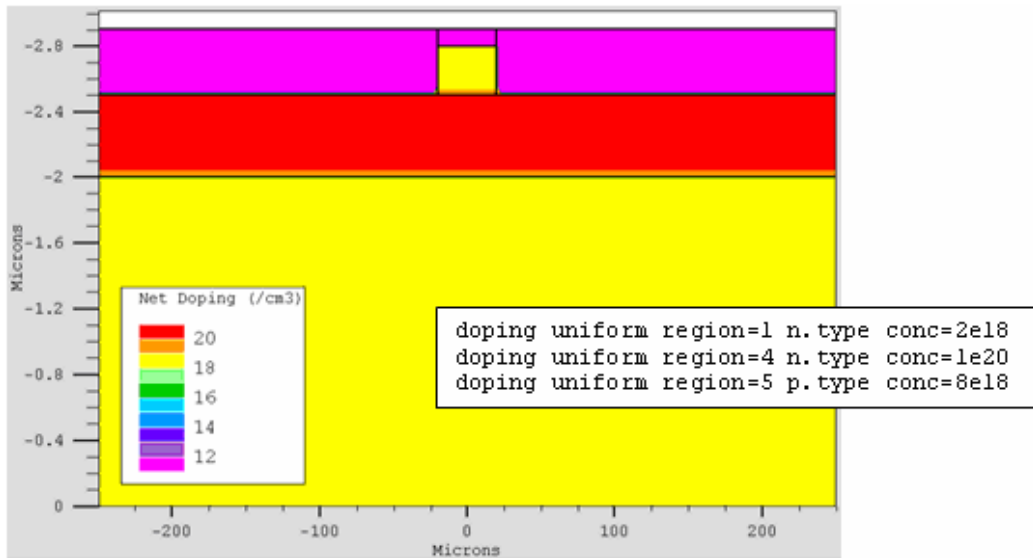


Figure 4.7 Types et niveau de dopage avec Atlas [78].

4.5 Spécification des modèles des matériaux

Après avoir défini la spécification de la structure, l'étape prochaine est la spécification des modèles des matériaux qui est divisé en : matériau, modèles, contact et interface.

4.5.1 Matériau

Le format d'Atlas pour définir le matériau est le suivant :

MATERIAL <localization> <material_définition>

On donne ci-dessous trois exemples pour la commande Material:

MATERIAL MATERIAL=Silicon EG300=1.1 MUN=1200

MATERIAL REGION=4 TAUN0=3e-7 TAUP0=2e-5

MATERIAL NAME=base NC300=4e18

Dans tous les exemples, lorsque MATERIAL apparaît le premier, il est considéré comme commande. Lorsque MATERIAL apparaît une seconde fois dans le premier exemple, il est considéré comme un paramètre de localisation. Dans les deuxième et troisième exemples, les paramètres de localisation sont region et name, respectivement.

Divers autres paramètres peuvent être définis comme commande MATERIAL. Des exemples de ces paramètres sont le gap à la température ambiante (**EG300**), la mobilité d'électrons (**MUN**), la durée de vie de recombinaison des électrons (**TAUN0**) et des trous (**TAUP0**), densité des états dans la bande de conduction à température ambiante (**NC300**), entre autres.

4.5.2 Models

Les modèles physiques se répartissent en cinq catégories: la mobilité, recombinaison, statistiques des transporteurs, l'ionisation d'impact, et de tunnels. La syntaxe de la commande Model est la suivante:

MODELS <model flag> <general parameter> <model dependent parameters>

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 la concentration dépendante. **FLDMOB** est le modèle de dépendance du champ électrique. **SRH** est le modèle de Shockley-Read-Hall.

4.5.3 Beam

Lorsque l'illumination est importante pour un dispositif (comme dans les cellules solaires), il y'a la possibilité d'utiliser un certain nombre de sources de lumière et d'ajuster leurs localisation, orientation et intensité.

Le spectre de la lumière peut être décrit dans tous les détails nécessaires. Polarisation, réflectivité et lancer le tracé de rayons sont aussi parmi les caractéristiques du simulateur.

4.5.4 Contact

Contact détermine les attributs de l'électrode. La syntaxe de contact est comme suit:

CONTACT NUMBER=<n> |NAME=<ename>|ALL

Ce qui suit est un exemple de la commande Contact.

CONTACT NAME=anode current

4.6 Sélection de la méthode numérique

Après la spécification du modèle des matériaux, le choix de la méthode numérique doit être spécifié. La seule commande qui s'applique pour la sélection de la méthode numérique est Method.

Il existe plusieurs méthodes numériques pour calculer des solutions aux problèmes des dispositifs à semiconducteur. Trois types de techniques de solution sont utilisées dans le simulateur Silvaco Atlas:

- Découplée (Gummel)
- Entièrement couplé (NEWTON)
- BLOC

La méthode Gummel résout pour chaque inconnue en gardant tous les autres inconnus constants. Le processus est répété jusqu'à ce qu'il y est une solution stable. La méthode de Newton résout toutes les inconnues simultanément. La méthode BLOC résout quelques équations avec la méthode Gummel et les autres avec La méthode NEWTON.

Le Procédé Gummel est utilisé pour un système d'équations qui sont faiblement couplées et lorsqu'il ya convergence linéaire. Procédé NEWTON est utilisé lorsque les équations sont fortement couplés avec convergence quadratique. L'exemple suivant montre L'utilisation de la commande Method.

METHOD GUMMEL NEWTON

Dans cet exemple, les équations sont résolues par la méthode Gummel. si la convergence ne sera pas atteint, alors les équations doivent être résolu en utilisant la La méthode de Newton.

4.7 Spécification des solutions

Après avoir terminé la sélection de la méthode numérique, la prochaine étape est la spécification de solution. La spécification de solution se décompose des commandes suivantes log, solve, load, et save.

4.7.1 Log

LOG enregistre toutes les caractéristiques du terminal dans un fichier. Toute donnée de type DC, transitoire, ou AC générée par la commande SOLVE après une commande LOG est enregistré.

La commande suivante montre un exemple de la commande LOG:

LOG OUTFILE=myoutputfile.log

L'exemple enregistre les informations de courant-tension dans le fichier myoutputfile.log.

4.7.2 Solve

La commande SOLVE suit l'instruction LOG. SOLVE effectue une Solution pour un ou plusieurs points de polarisation. Ce qui suit est un exemple de la commande SOLVE.

**SOLVE B1=10 B3=5 BEAM=1 SS.PHOT SS.LIGHT=0.01 **

MULT.F FREQUENCY=1e3 FSTEP=10 NFSTEP=6

B1 et B3 spécifiés la puissance du spot optique associé avec les faisceaux optiques numéro **1** et **3**, respectivement. Le numéro du faisceau est un entier compris entre **1** et **10**.

BEAM est le numéro du faisceau optique lors de l'analyse de photogénération AC. SS.PHOT est le petit signal d'analyse AC, SS.LIGHT est l'intensité de la partie de petit signal du faisceau optique lors de l'analyse du signal de photogénération AC, MULT.F est la fréquence à être multiplié par FSTEP, NFSTEPS est le nombre de fois que la fréquence est incrémenté par FSTEP.

4.7.3 Load et save

La commande LOAD entre les solutions précédentes à partir de fichiers comme estimation initiale à d'autres points de polarisation. L'instruction SAVE entre toutes les informations d'un point de nœud dans un fichier de sortie.

Ce qui suit sont des exemples des instructions LOAD et SAVE.

SAVE OUTF=SOL.STR

Dans ce cas, les informations sont enregistrées dans le fichier SOL.STR après une commande SOLVE. Puis, dans une simulation différente, SOL.STR peut être chargé comme suit:

LOAD INFILE=SOL.STR

4.8 Analyse des résultats

Une fois qu'une solution a été trouvée pour un problème de dispositif semi-conducteur, les informations peuvent être affichées graphiquement avec l'instruction TONYPLOT. En outre, les paramètres du dispositif peuvent être extraits avec la commande EXTRACT, comme le montre la **Figure 4.8**.

Dans l'exemple ci-dessous, l'instruction EXTRACT obtient la caractéristique courant/tension d'une cellule solaire. Ces informations sont enregistrées dans le fichier IVcurve.dat. Ensuite, TonyPlot trace le graphe reliant les informations contenues dans le fichier IVcurve.dat. La **Figure 4.13** montre la courbe de l'échantillon IV tracée par TonyPlot.

```
EXTRACT NAME="IV" curve(V."anode", I."cathode") /  
OUTFILE="IVcurve.dat"  
TONYPLOT IVcurve.dat
```

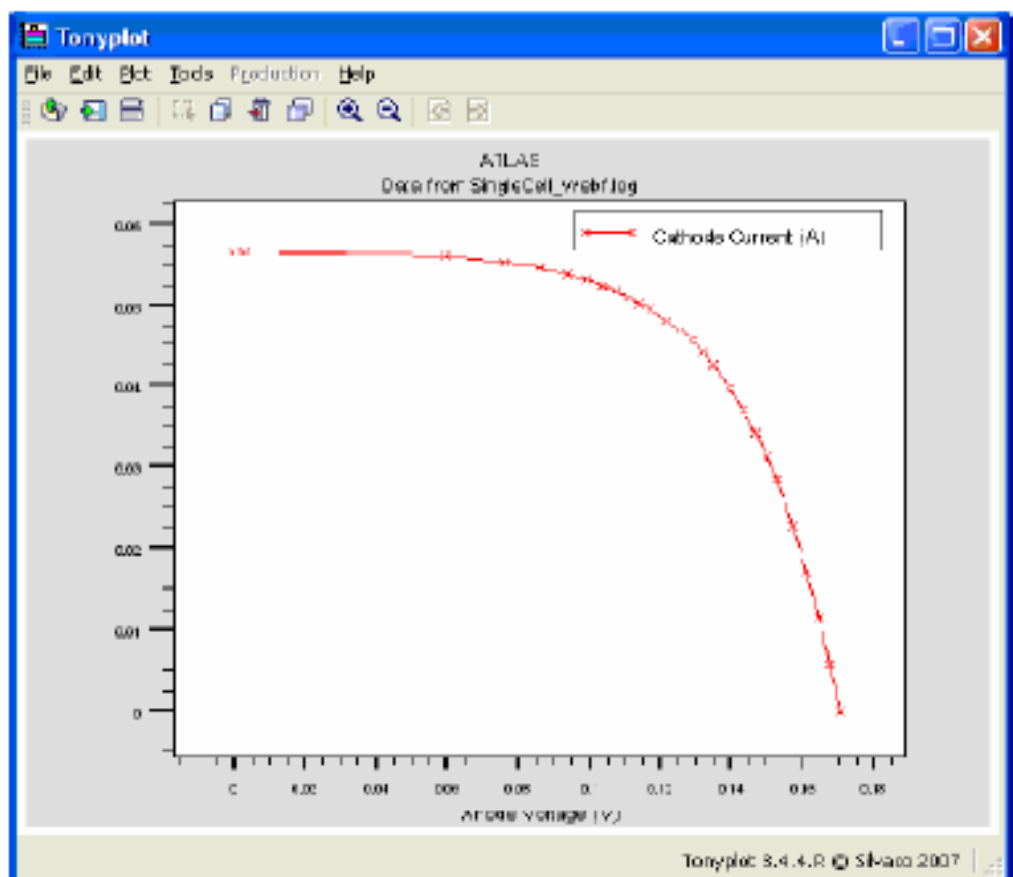


Figure 4.8 Courbe de l'échantillon IV [78].

4.9 Organigramme de simulation

En vue d'intensifier la compréhension, à contribuer à développer davantage de part et d'autre et pour éviter toutes répétitions et confusion inutiles, l'organigramme de la **Figure 4.9** permet de présenter le programme de simulation d'une cellule solaire qui contient des sections principales structurées.

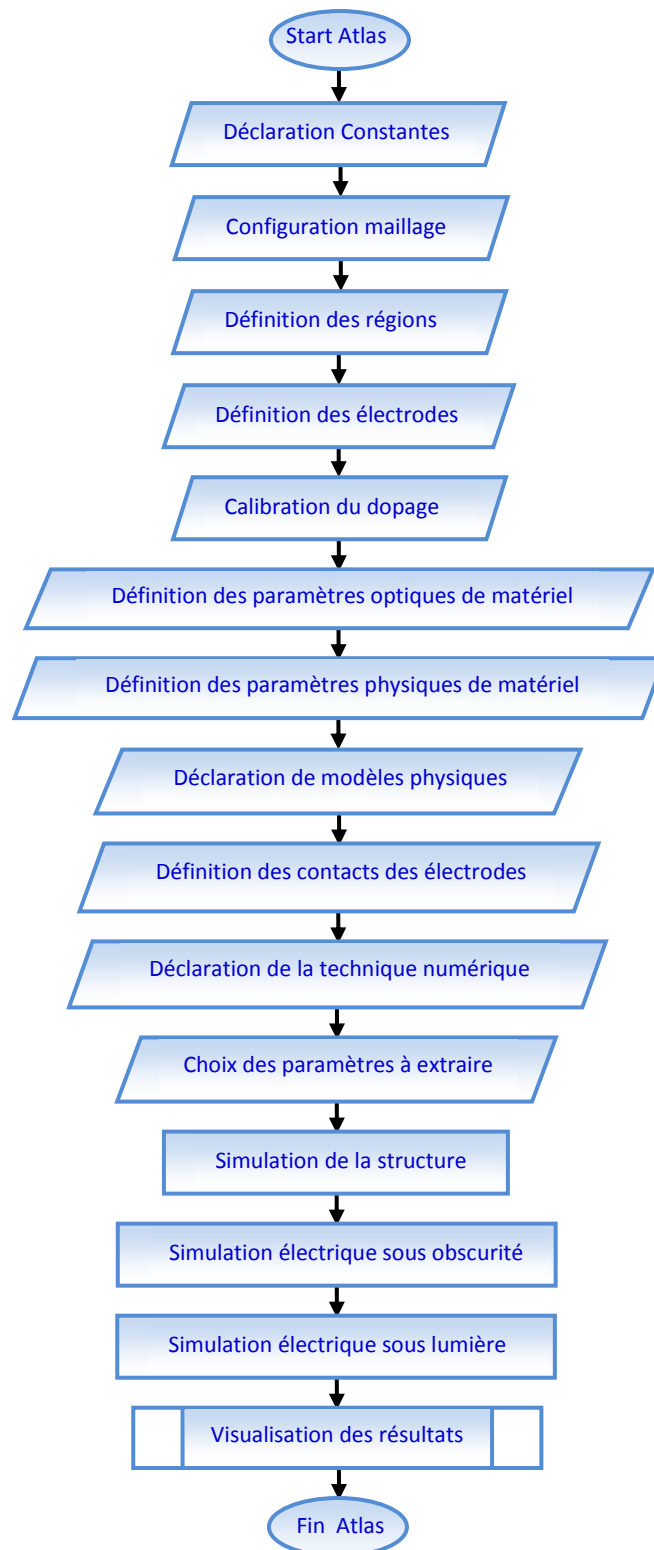


Figure 4.9 Organigramme du programme de simulation [79].

4.10 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons développé la présentation du logiciel de simulation des caractéristiques électriques «Atlas» de la société SILVACO, que nous allons utiliser principalement pour modéliser et optimiser la cellule solaire en InGaN.

Un organigramme contenant les principales sections structurées du programme de simulation d'une cellule solaire est donné en fin de ce chapitre.

Chapitre 5 :

Résultats de simulation

5.1 Introduction

En général, la modélisation analytique basée sur l'utilisation d'équations pour estimer le comportement réel des cellules solaires, nécessite une description détaillée du dispositif à simuler et des matériaux qui sont utilisés dans sa construction. La sélection du type de matériau approprié et de sa composition ainsi que ses propriétés électriques et physiques sont très importants et influent directement sur le rendement des cellules.

D'après la littérature existante, les matériaux les plus souvent utilisés sont les semi-conducteurs simples Si et Ge et les composés binaires GaAs et InP. En addition à ceux-là, de nombreux composés ternaires et quaternaires sont également utilisés dans la plupart des cas. Ceux-ci sont des alliages de trois ou quatre éléments Al, As, Be, Cd, Ga, Hg, In, N, P, Pb, S, Sb, Sc, Se, Te, Zn et d'autres. Le grand nombre de ces combinaisons fournit aux chercheurs de dispositifs électroniques une précieuse abondance de choix.

Cependant, les propriétés électriques et physiques de chaque matériau ne peuvent pas être calculées théoriquement avec une précision suffisante. Au lieu de cela, ils doivent être mesurés par des expériences précises et coûteuses. Par conséquent, l'abondance des matériaux mentionné plus haut, crée une immense tâche pour les physiciens. Les semi-conducteurs simples et binaire GaAs ont été étudiés de façon exhaustive. Cependant, pour le reste des composés binaires, seulement leurs principales et plus importantes propriétés sont publiées. Pour les composés ternaires et quaternaires, très peu de leurs propriétés est disponible. Dans la plupart du temps, la seule solution est fournie par interpolation des propriétés de leurs composants binaires.

Silvaco dispose d'une bibliothèque des propriétés de nombreux matériaux utilisés dans les dispositifs électroniques. Cependant, dans un effort pour pousser le rendement des cellules solaires à des niveaux supérieurs, les chercheurs ont tendance à utiliser de nombreux matériaux exotiques. Pour eux, la bibliothèque Silvaco est en développement et souvent incomplète.

5.2 Simulation sous SILVACO/Atlas

5.2.1 Description de la structure

Notre structure de référence est une cellule solaire mono jonction à base d'InGaN d'épaisseur totale $d=400$ nm [80], de largeur 500 μm , composée d'une couche P (Emetteur-Accepteur) d'épaisseur d_E dopée à une concentration N_a et d'une couche N (Base-Donneur) d'épaisseur d_B dopée à une concentration N_d . Pour la collecte du courant nous avons positionné des électrodes en haut et en bas de la structure, faisant la largeur de la cellule.

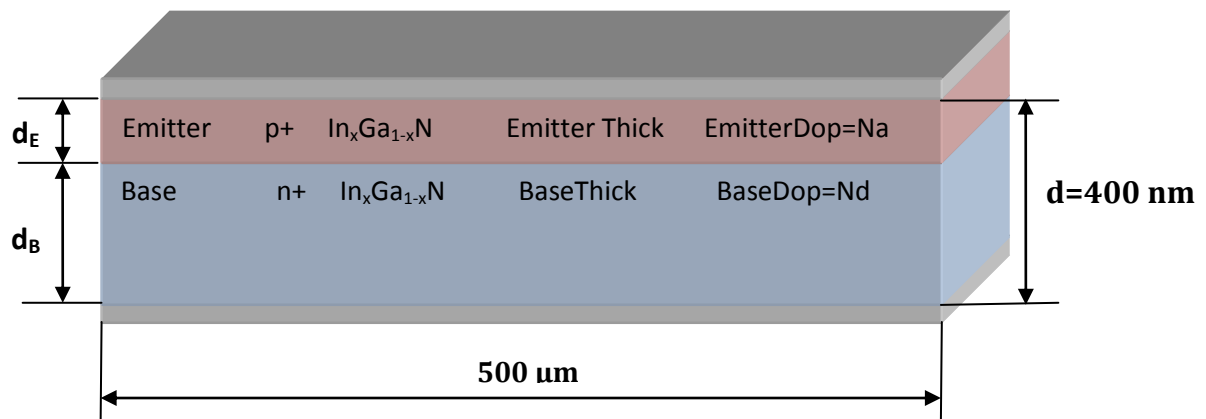


Figure 5.1 Structure de la cellule à simuler sous SILVACO/Atlas.

5.2.2 Paramètres de simulation

L'InGaN, matériau utilisé dans notre travail est défini à partir de ses paramètres tirés de la littérature [81], leurs valeurs sont rassemblées dans le tableau 5.1.

Paramètres	Expressions	Valeurs
Bande interdite E_g (eV)	$E_g = 0.74x + 3.4(1-x) - 1.43(1-x)x$	1.32
Permittivité	$\epsilon_r = 14.6x + 10.4(1-x)$	13.13
Affinité électronique χ (eV)	$\chi = 4.1 + 0.7(3.4 - E_g)$	5.56
Densité d'états des électrons N_c ($\times 10^{18} \text{cm}^{-3}$)	$N_c = 0.9x + 2.3(1-x)$	1.39
Densité d'états des trous N_v ($\times 10^{18} \text{cm}^{-3}$)	$N_v = 5.3x + 1.8(1-x)$	4.075
Durée de vie des électrons et des trous τ_{n0} et τ_{p0} (ns)	$\tau_{n0} = \tau_{p0}$	6.5
Vitesse de recombinaison en surface S_n et S_p (cm/s)	$S_n = S_p$	1000

Tableau 5.1 Paramètres de simulation à 300 K pour une concentration de 65% de l'InN [81].

- Les paramètres optiques n et k de l' $\text{In}_{0.65}\text{Ga}_{0.35}\text{N}$ varient pour chaque longueur d'onde, ils sont supposés similaires à ceux du GaN en raison de leur manque enregistré dans la littérature.

Atlas peut recevoir cette entrée, séparément pour chaque matériau, à partir d'un fichier texte contenant un triplet formé de la longueur d'onde λ , indice de réfraction n et le coefficient d'extinction k , regroupé dans cet ordre après un nombre désignant la quantité d'échantillons. Les valeurs inexistantes sont automatiquement interpolées.

5.2.3 Modèles physiques utilisés dans la simulation

a) Mobilité

Pour notre étude, on a utilisé le modèle de Caughey-Thomas (voir chapitre 3), la mobilité dépendante de la concentration des porteurs définie par l'expression :

$$\mu_i(N) = \mu_{min,i} + \frac{\mu_{max,i} - \mu_{min,i}}{1 + \left(\frac{N}{N_{g,i}}\right)^{\gamma_i}} \quad (5.1)$$

- 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 [$s.d$].

Les valeurs de ces différents paramètres sont regroupées dans le **tableau 5.2** :

Porteur	Paramètre	Valeur
Electrons	$\mu_{min,e} [\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}]$	55
	$\mu_{max,e} [\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}]$	1000
	$\gamma [s.d]$	1
	$N_{g,e} [\text{cm}^{-3}]$	2×10^{17}
Trous	$\mu_{min,h} [\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}]$	3
	$\mu_{max,h} [\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}]$	170
	$\gamma [s.d]$	2
	$N_{g,h} [\text{cm}^{-3}]$	3×10^{17}

Tableau 5.2 Paramètres utilisés dans le calcul de la mobilité des porteurs en fonction de la concentration de dopage [80<].

b) Recombinaison

Afin de modéliser les pertes dans la structure, nous prenons en compte les recombinaisons de Shockley-Read-Hall (SRH) (voir chapitre 3), définies par l'expression :

$$R_{SRH} = \frac{pn - n_{ie}^2}{\tau_p \left[n + n_{ie} \exp\left(\frac{E_{trap}}{kT_L}\right) \right] + \tau_n \left[p + n_{ie} \exp\left(\frac{-E_{trap}}{kT_L}\right) \right]} \quad (5.2)$$

Avec :

- n et p les concentrations d'électrons et de trous, respectivement [cm^{-3}].
- n_{ie} la concentration intrinsèque d'électrons [cm^{-3}].
- τ_n et τ_p les temps de vie des électrons et des trous, dépendant de la densité de défauts [s].
- E_{trap} la différence d'énergie entre la position énergétique du défaut et le niveau d Fermi intrinsèque [eV].
- k la constante de Boltzmann [$eV \cdot K^{-1}$].
- T_L la température [K].

Puisque la densité de défauts et les dopages sont importants dans nos matériaux, nous avons défini les temps de vie des électrons et des trous en fonction de la concentration de dopants :

$$\tau_n = \frac{\tau_n^0}{1 + (N_{total}/N_n^{SRH})} \quad (5.3)$$

$$\tau_p = \frac{\tau_p^0}{1 + (N_{total}/N_p^{SRH})} \quad (5.4)$$

Avec :

- τ_n^0 et τ_p^0 les temps de vie des électrons et des trous indépendant de la densité de défauts, défini dans le matériau [s].
- N_{total} la concentration totale de défauts et dopage [cm^{-3}].
- N_n^{SRH} et N_p^{SRH} les concentrations de défauts recombinants pour les électrons et les trous, respectivement, par défaut égaux à [$5.0 \times 10^{16} cm^{-3}$].

5.2.4 Procédure

La simulation par SILVACO est basée sur la résolution numérique des trois équations fondamentales de transport de charges dans les semi-conducteurs qui sont respectivement l'équation de Poisson et les équations de continuité et de transport pour les électrons et les trous.

Après la définition du maillage de la structure étudiée, des matériaux et des modèles, le simulateur évalue numériquement la résolution de ces équations à chaque nœud du maillage et détermine la caractéristique courant-tension sous les conditions standards d'éclairement (**AM1.5G**) entre **0.32 à 1.32 nm** à **300 K**.

Afin d'optimiser les performances de notre cellule pour une concentration de **65%** d'In dans L'InGaN, nous avons calculé les paramètres technologiques (dopage et épaisseur) pour chacune de ses régions. Ces derniers doivent assurer les meilleures caractéristiques de sortie. Pour cela, nous avons adopté la procédure suivante :

Nous sommes fixés pour but de retrouver, pour chaque région de la cellule, les paramètres technologiques donnant les meilleures caractéristiques de sortie. Pour cela, nous avons fait varier le dopage et l'épaisseur de ces régions et nous avons choisis les paramètres qui donnent les meilleurs résultats.

a) L'influence du dopage

Pour une épaisseur totale de **400 nm** de la cellule, nous avons calculé les rendements de la cellule pour différentes valeurs de la concentration du dopage N_a de l'émetteur (couche **P**) allant de $1.0 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$ à $1.0 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$ et des valeurs du rapport N_a/N_d de **0.1**, **0.2**, **0.5** et **1**. Les résultats sont reportés dans la **figure 5.4**.

Les **figures 5.2**, **5.3** illustrent l'influence du dopage N_a de l'émetteur sur le courant de court-circuit et sur la tension à circuit ouvert de la cellule.

On rappelle que le rendement d'une cellule solaire est relié à la densité du courant de court circuit I_{cc} , la tension en circuit ouvert V_{co} et le facteur de forme **FF** par la relation [Eq. (2.10)] :

$$\eta = \frac{P_m}{P_{in}} = \frac{FF \cdot V_{co} \cdot I_{cc}}{P_{in}}$$

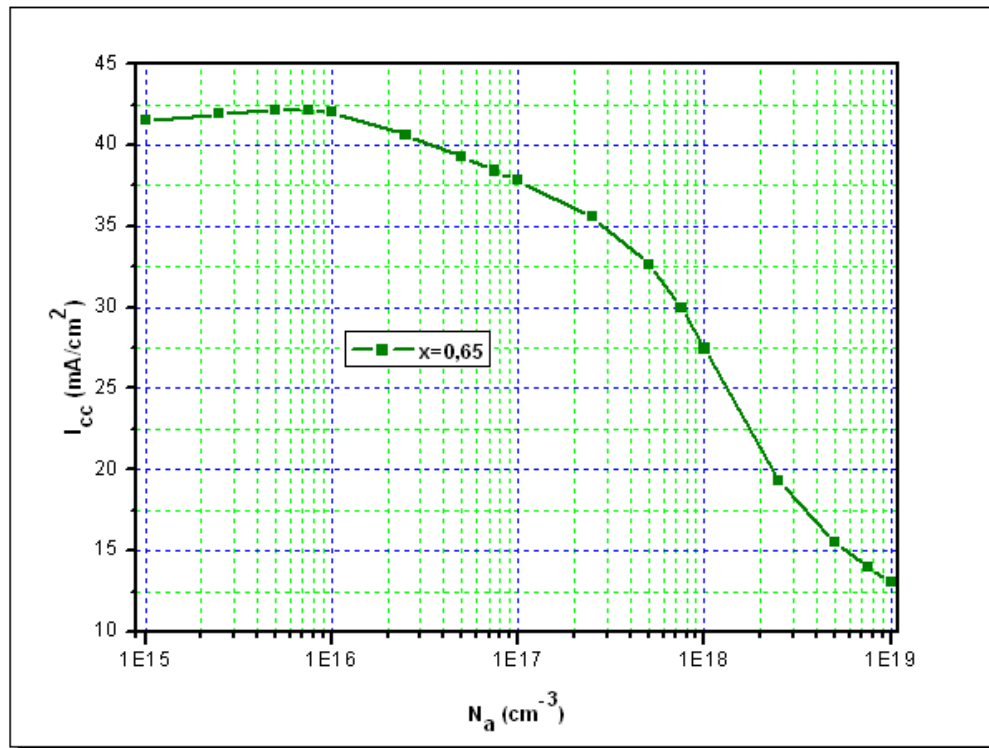


Figure 5.2 Influence du dopage de l'émetteur N_a sur le courant de court circuit I_{cc} ($N_a=N_d$).

- D'après la **figure 5.2**, la densité du courant de court circuit I_{cc} augmente avec la diminution de la concentration du dopage N_a ($N_a = N_d$).

La diminution de N_a entraîne une augmentation de la mobilité des porteurs μ [voir l'Eq. (5.1)], qui provoque l'augmentation du coefficient de diffusion des porteurs D [Eq. (1.10)] et c'est ainsi que la longueur de diffusion augmente [Eq. (1.9)], conduisant à une meilleure collecte des porteurs de charges libres générés par la lumière.

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

$$D = \frac{kT}{q} \mu$$

$$L = \sqrt{D\tau}$$

- Cependant, V_{co} décroît avec la décroissance de la concentration du dopage N_a ($N_a = N_d$), comme le montre la **figure 5.3**.

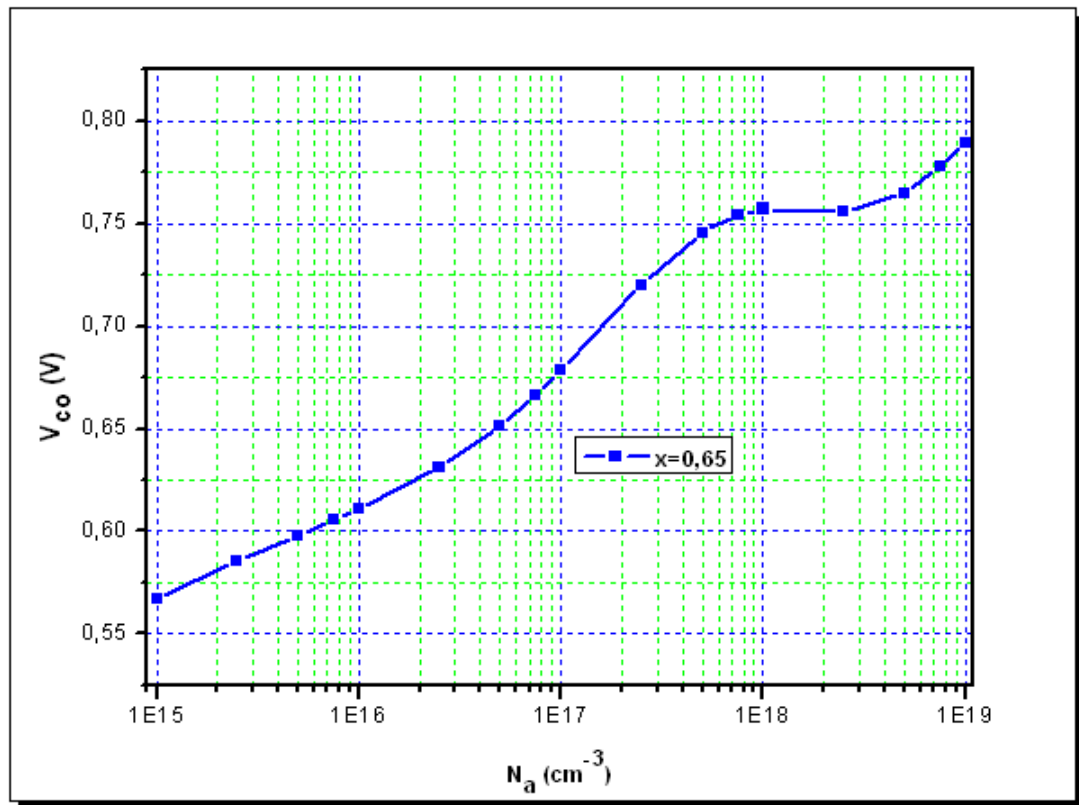


Figure 5.3 Influence du dopage de l'émetteur sur la tension à circuit ouvert ($N_a=N_d$).

La tension à circuit ouvert V_{co} est donnée par la relation [Eq. (2.8)]:

$$V_{co} = \frac{K.T}{q} \log \left(\frac{I_{ph}}{I_s} + 1 \right)$$

Avec

$$I_s = qn_i^2 \left(\frac{D_n}{L_n N_a} + \frac{D_p}{L_p N_d} \right) \tag{5.5}$$

D'après les équations (2.8) et (5.5) on peut constater que la tension V_{co} décroît avec la diminution de N_a .

- De la même façon les rendements en fonction de N_a avec différents rapports N_a/N_d sont étudiés. Le rendement, comme l'indique la figure 5.4 subi une légère augmentation puis diminue pour les valeurs croissante de la concentration de dopage N_a en passant par un maximum $\eta=21.70\%$ à $N_a = 1.0 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ pour un rapport $N_a/N_d = 1$, alors N_d est aussi égale à $1.0 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$.

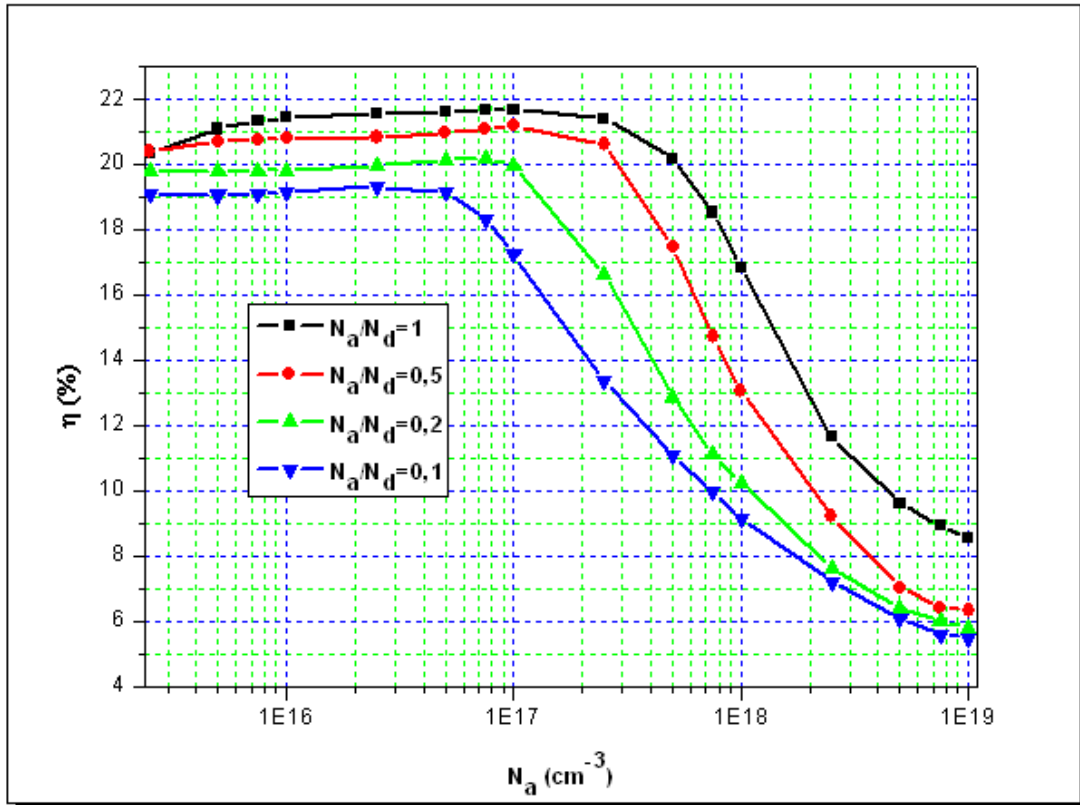


Figure 5.4 Influence du dopage de l'émetteur sur le Rendement.

b) Influence de l'épaisseur de l'émetteur d_E

Avec une concentration du dopage de $1,0 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ et une épaisseur totale de la cellule de **400nm**, le rendement η et la densité de courant de court circuit I_{cc} correspondants sont calculés en faisant varier l'épaisseur d_E de l'émetteur (couche P) de **10nm** à **350nm**. Les figures 5.5 et 5.6 illustrent ces deux paramètres en fonction de l'épaisseur d_E . On constate que η et I_{cc} ont des valeurs crêtes pour une même épaisseur $d_E=60\text{nm}$.

D'une part, la densité du courant I_{cc} croit lorsque l'épaisseur de la couche P décroît en raison de l'amélioration du rendement de collecte résultant de la diminution de la distance entre la surface et la zone de charge d'espace.

D'autre part, le rendement de collecte de la zone de charge d'espace est affaibli lorsqu'elle sera trop près de la surface où intervient l'effet de la recombinaison en surface alors I_{cc} décroît.

En conséquence, lorsque l'épaisseur de l'émetteur augmente, le rendement et la densité de courant augmentent d'abord puis diminuent à la fois. La courbe de la figure 5.5 montre que le meilleur rendement est obtenu avec **60nm** d'épaisseur de l'émetteur.

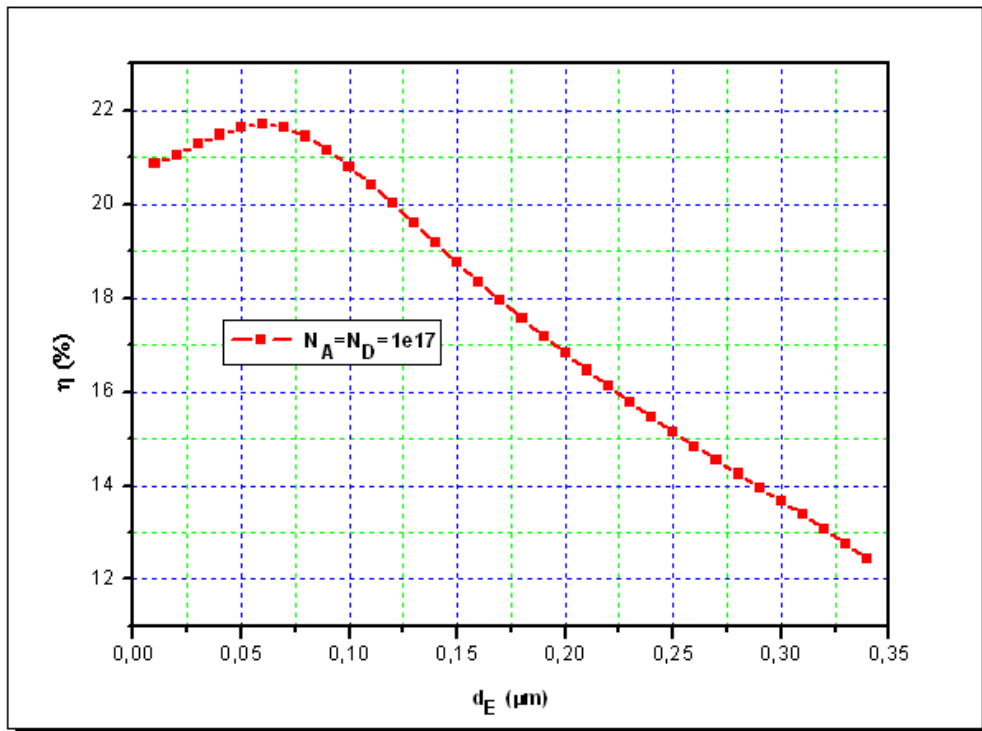


Figure 5.5 Influence de l'épaisseur de l'émetteur sur le rendement de la cellule.

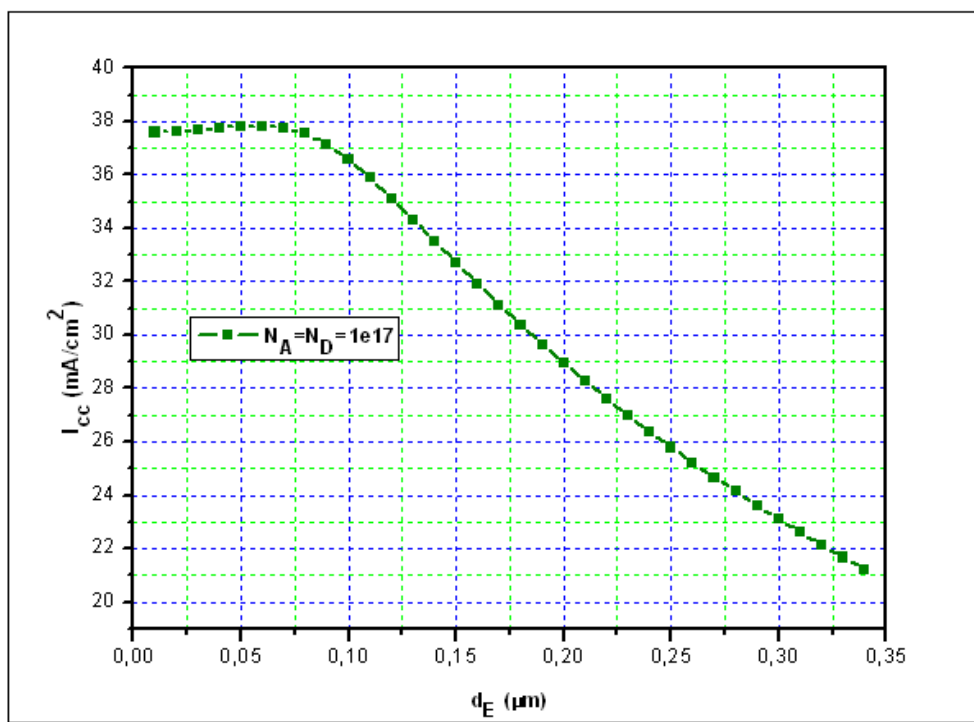


Figure 5.6 Influence de l'épaisseur de l'émetteur sur le courant de court circuit.

c) Performances optimales de la cellule $\text{In}_{0.65}\text{Ga}_{0.35}\text{N}$

Pour des concentrations de dopage des deux couches de $1.0 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$, une épaisseur de **60nm** de l'émetteur et **340nm** d'épaisseur de la base, les valeurs optimales des paramètres de la cellule $\text{In}_{0.65}\text{Ga}_{0.35}\text{N}$ dont la caractéristique $I(V)$ est représentée sur la figure 5.7 sont $\eta = 21.70 \%$, $I_{cc} = 37.82 \text{ mA/cm}^2$, $V_{co} = 0.678 \text{ V}$ et $FF = 76.2 \%$.

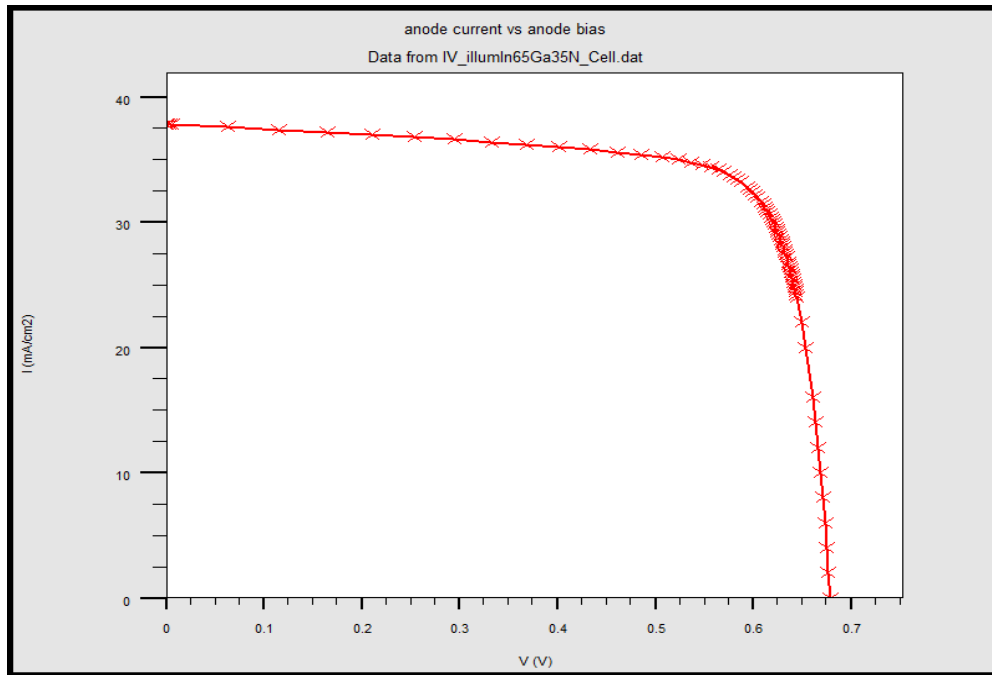


Figure 5.7 Caractéristique $I(V)$ de la cellule $\text{In}_{0.65}\text{Ga}_{0.35}\text{N}$.

d) Influence de la longueur de diffusion sur les performances de la cellule

La longueur de diffusion est un paramètre extrêmement influent sur le rendement des cellules solaires, pour cela nous avons retenus les paramètres technologiques calculés ci-dessus et nous avons varié la longueur de diffusion de **200nm** à **2400nm**. Les figures 5.8, 5.9, 5.10 montrent que l'augmentation de la longueur de diffusion permet une amélioration remarquable des trois paramètres de la cellule, elle a un effet direct sur l'amélioration du photocourant et par conséquent sur le rendement de conversion de la cellule solaire qui croient entre **35.2 mA/cm²** à **37.85 mA/cm²** et de **16%** à **21.84%** et se saturent respectivement. En effet, la longueur de diffusion est corrélée avec la durée de vie des porteurs minoritaires, ainsi quand la longueur de diffusion augmente la durée de vie

augmente aussi d'où vient notre choix de la durée de vie des porteurs minoritaires fixée à 6.5 ns.

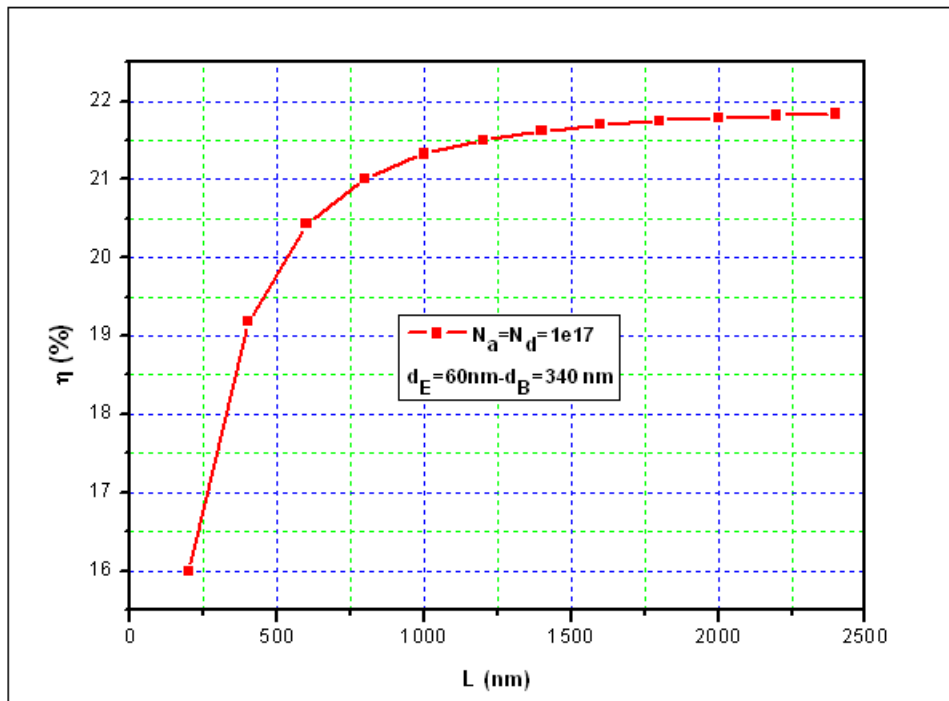


Figure 5.8 Influence de la longueur de diffusion sur le rendement.

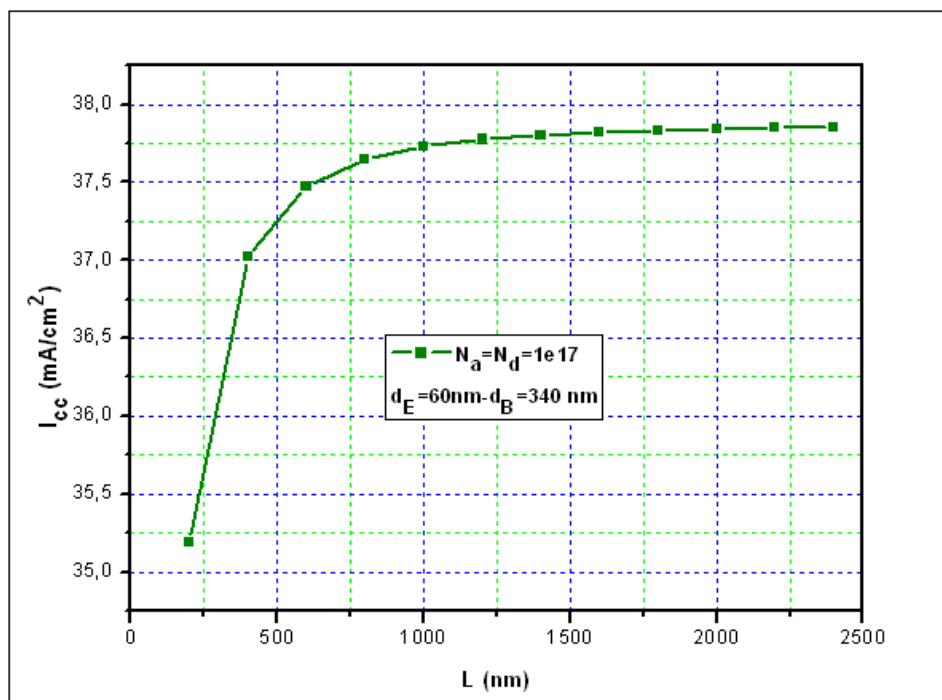


Figure 5.9 Influence de la longueur de diffusion sur le courant de court circuit.

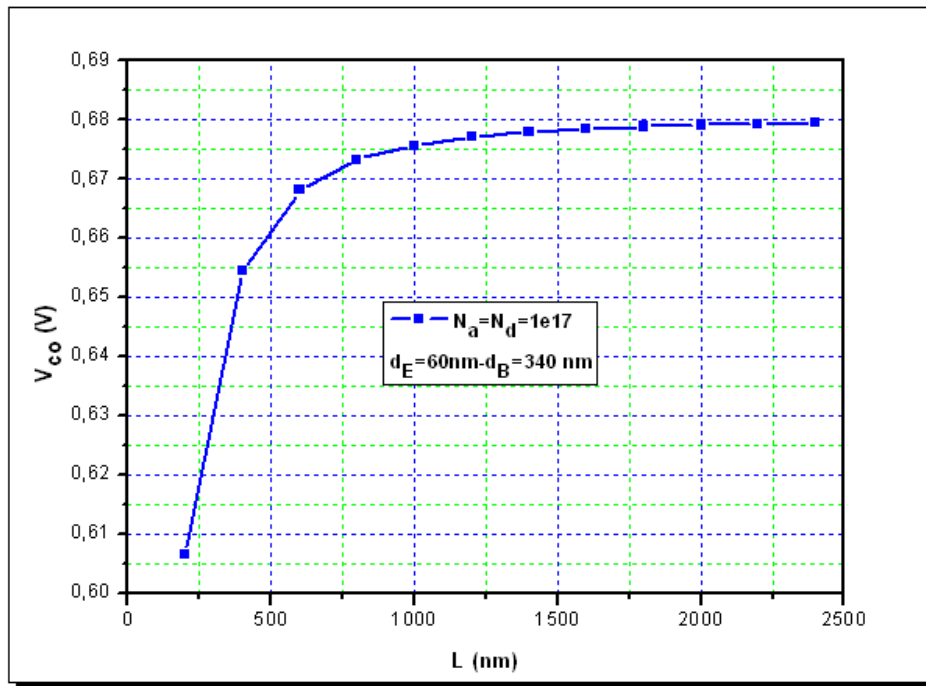


Figure 5.10 Influence de la longueur de diffusion sur la tension à circuit ouvert.

e) Effet de la couche BSF sur les performances de la cellule

L'effet de la couche BSF en InGa_N, sur les paramètres de la cellule solaire a été étudié en faisant varier l'épaisseur d_{BSF} de cette dernière de **10nm** à **100nm** pour des concentrations de dopage N_{BSF} de 5×10^{18} , 1×10^{19} , 5×10^{19} , 1×10^{20} , 5×10^{20} , $1 \times 10^{21} \text{cm}^{-3}$, ainsi nous avons obtenus les résultats représentés par les **figures 5.11, 5.12, 5.13** qui montrent bien l'importance de l'ajout du champ BSF. Ce dernier influe d'une manière remarquable sur les caractéristiques et les performances électriques de la cellule solaire. Il y a une amélioration des valeurs du courant de court circuit et le rendement de conversion avec des grandeurs acceptables, la tension à circuit ouvert est pratiquement in affectée. Ce champ électrique (BSF), réalisé par l'implantation d'une jonction n^+-n , à la surface arrière de la cellule solaire, crée une barrière de potentiel induite par la différence de niveau de dopage entre la base et le BSF qui tend à confiner les porteurs minoritaires dans la base qui vont être repoussés vers la zone de charge d'espace. Ceux-ci sont donc tenus à l'écart de la face arrière caractérisée par une vitesse de recombinaison très élevée. L'épaisseur choisie pour cette couche est de **60nm** pour un dopage de $5 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$ donnant $\eta=26.52\%$, $I_{cc}=43.92 \text{mA/cm}^2$, $V_{co}=0.684 \text{V}$ et $FF=79.3 \%$.

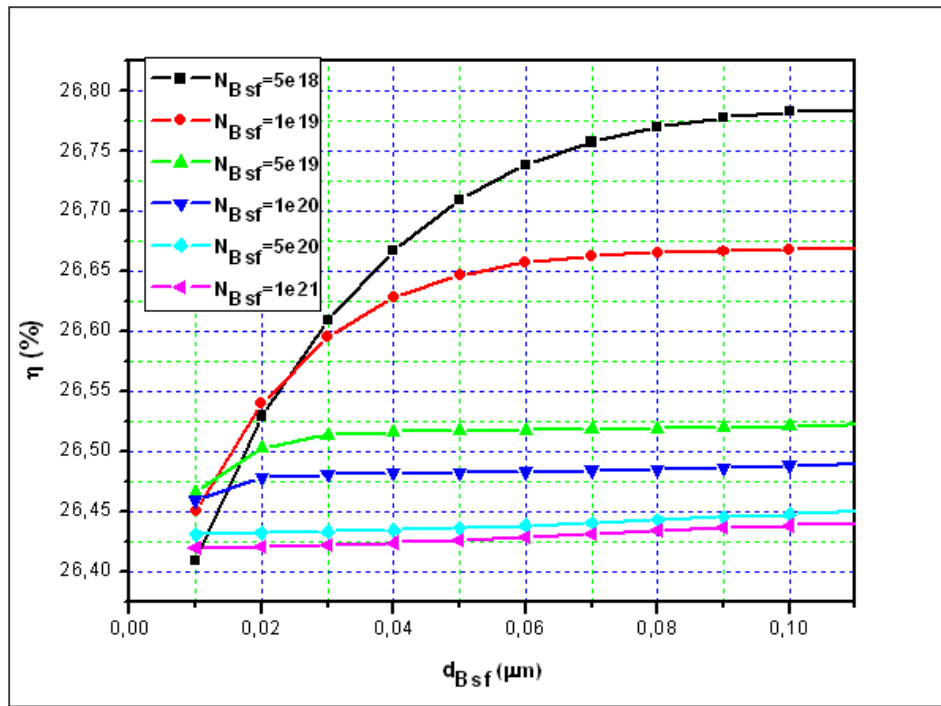


Figure 5.11 Effet de la couche Bsf sur le rendement.

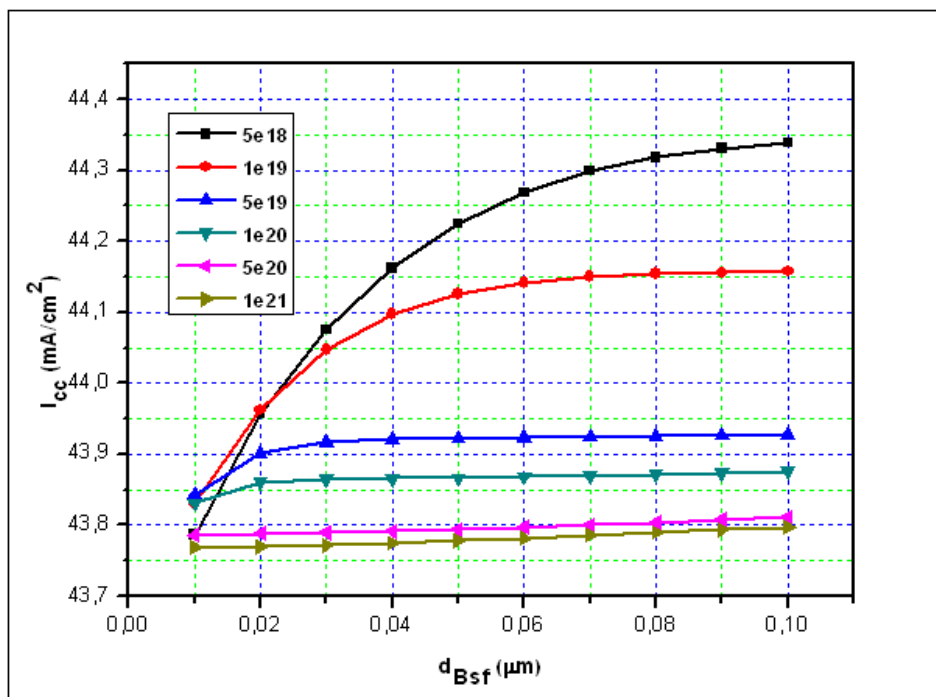


Figure 5.12 Effet de la couche Bsf sur le courant de court circuit.

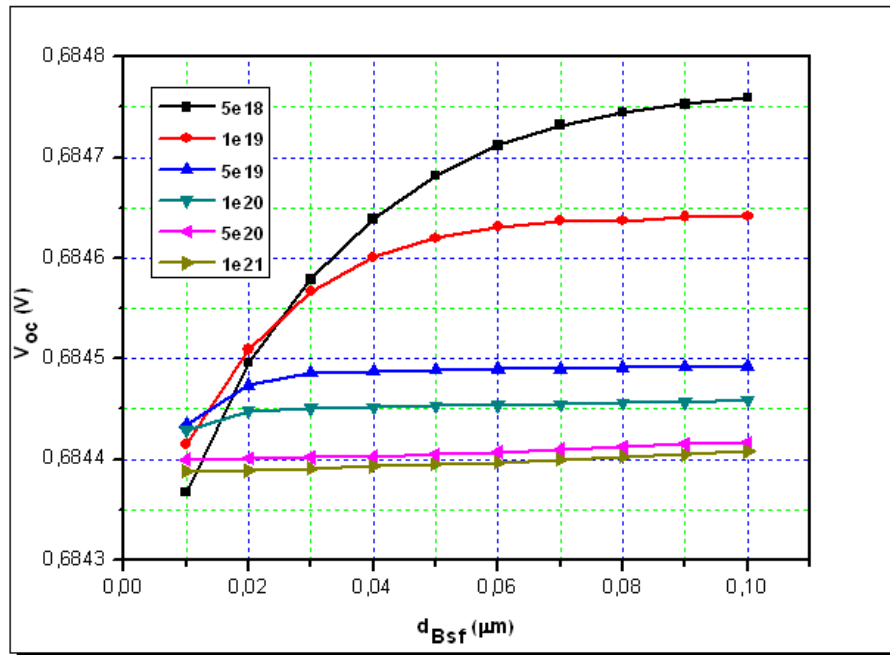


Figure 5.13 Effet de la couche Bsf sur la tension à circuit ouvert.

f) Effet de la couche Fenêtre sur les performances de la cellule

Sur les figures 5.14, 5.15 et 5.16 sont représentés le rendement, le courant de court circuit et la tension à circuit ouvert en fonction de l'épaisseur et la concentration du dopage de la couche fenêtre de type N, à base d'InGaN déposée sur l'émetteur, calculés par simulation en faisant varier l'épaisseur d_F de celle-ci de 10nm à 100nm pour différentes valeurs de la concentration du dopage $N_F = 2.5 \times 10^{18}$, 5×10^{18} , 7.5×10^{18} , 1×10^{19} , 2.5×10^{19} , $1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$.

D'une part, le rendement η et le courant de court circuit I_{cc} subissent une diminution de [(31.15% et 44.07 mA/cm² pour $d_F = 10\text{nm}$ à 24.75% et 35.02 mA/cm² pour $d_F = 100\text{nm}$) pour $N_F = 2.5 \times 10^{18}$] et de [(31.65% et 43.96 mA/cm² pour $d_F = 10\text{nm}$ à 20.50% et 29.27 mA/cm² pour $d_F = 100\text{nm}$) pour $N_F = 1 \times 10^{20}$].

D'autre part, du point de vue dopage et à une épaisseur $d_F = 10\text{nm}$, le rendement η et le courant de court circuit I_{cc} subissent une légère augmentation lorsque le dopage N_F augmente de 2.5×10^{18} à 2.5×10^{19} , puis une légère diminution pour le reste des valeurs de N_F entre 5×10^{19} et 1×10^{20} , leurs valeurs optimales sont 31.66% et 44.027 mA/cm² respectivement, obtenues pour $d_F = 10\text{nm}$ et $N_F = 2.5 \times 10^{19}$.

Il est à noter que la tension à circuit ouvert n'est pas influencé ni par l'augmentation de l'épaisseur, ni par l'augmentation du dopage.

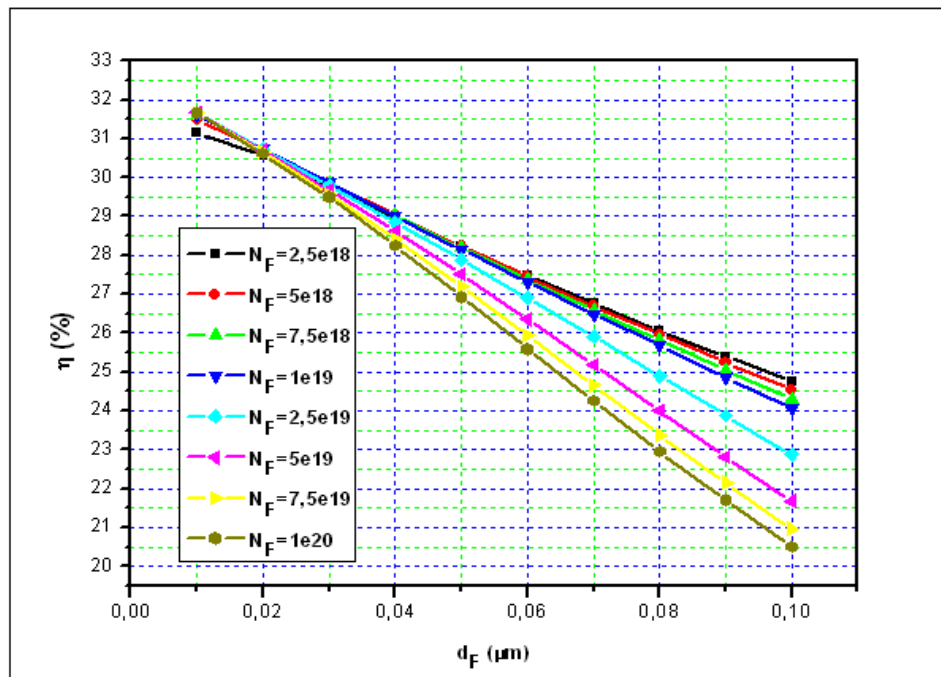


Figure 5.14 Effet de la couche fenêtre sur le rendement.

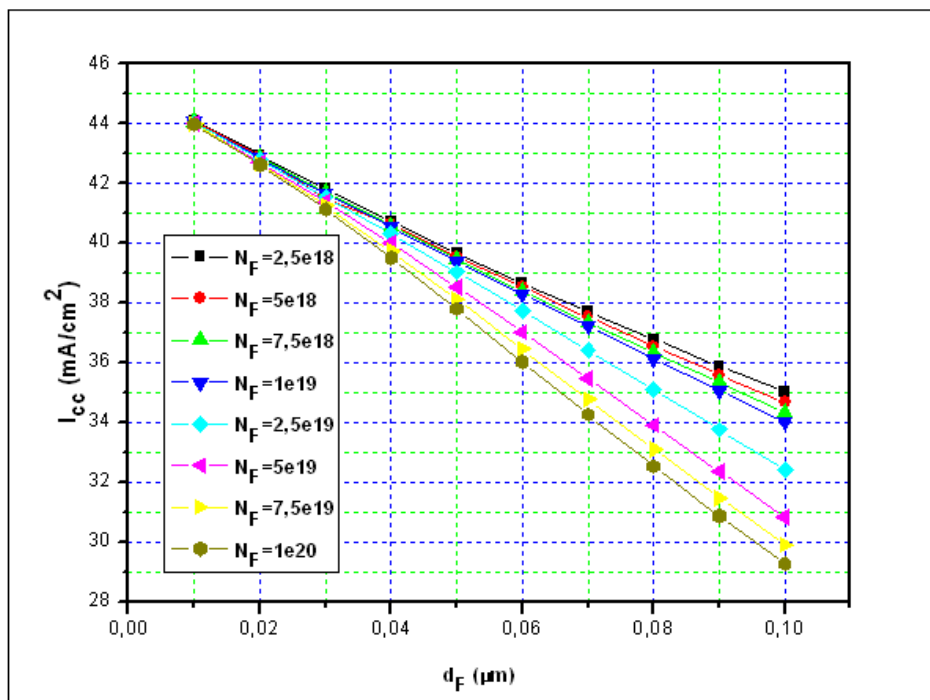


Figure 5.15 Effet de la couche fenêtre sur le courant de court circuit.

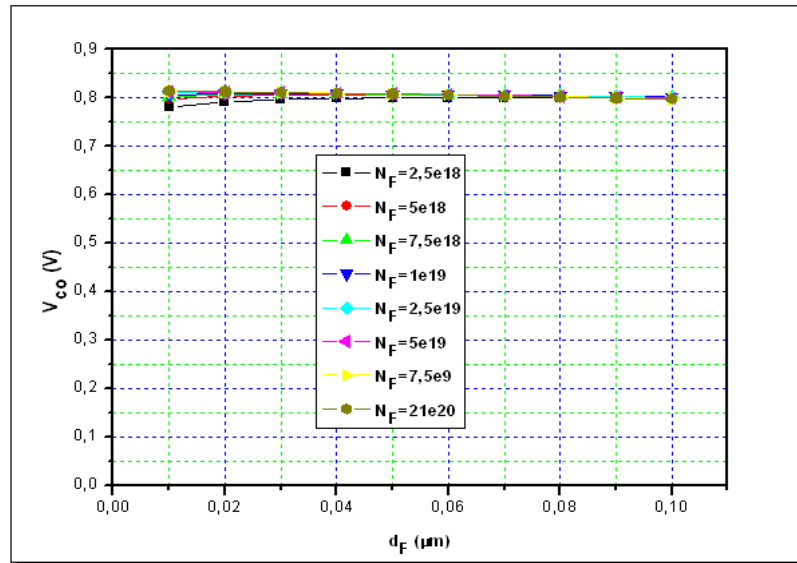


Figure 5.16 Effet de la couche fenêtre sur la tension à circuit ouvert.

g) Comparaison entre la cellule solaire de référence et celles avec BSF et Fenêtre

Afin de visualiser l'importance de l'ajout des couches BSF et fenêtre dans notre cellule de référence, on a fait une étude comparative entre les trois cellules (cellule de référence, cellule avec BSF et cellule avec BSF et couche fenêtre). Sur la **figure 5.16**, est représentée la caractéristique **I(V)** pour ces trois cellules.

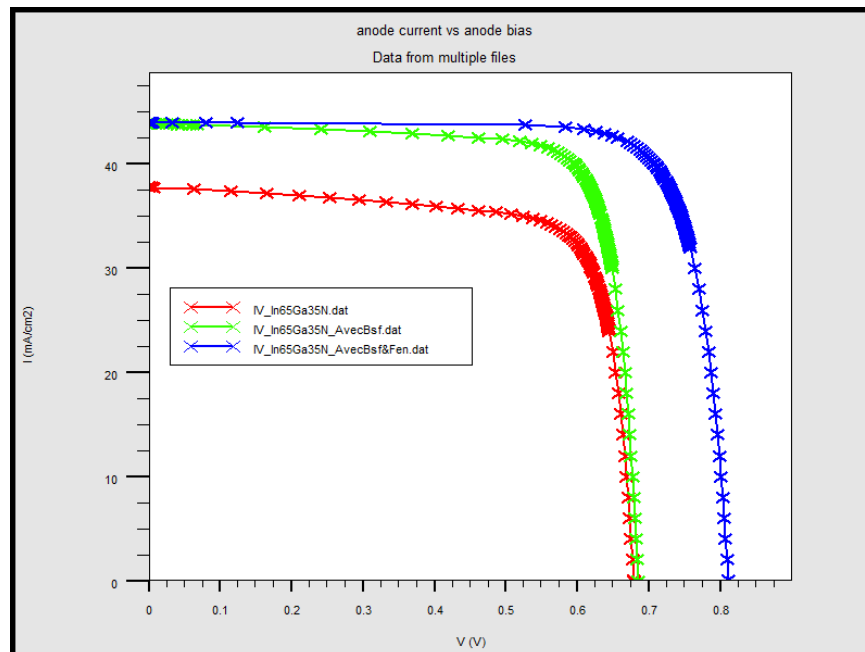


Figure 5.17 Caractéristiques I(V) des trois cellules.

On remarque qu'il y'a une amélioration de la caractéristique **I(V)** par l'ajout des couches BSF et Fenêtre.

Les grandeurs photovoltaïques des trois cellules sont regroupées dans le tableau comparatif **tableau 5.3**. D'après ce tableau, on remarque que les grandeurs photovoltaïques des cellules solaires **avec BSF** et **avec BSF et Fenêtre** sont nettement meilleures que celles de référence. L'amélioration est enregistrée surtout dans le courant de court circuit et le rendement de conversion pour la cellule avec BSF et dans la tension à circuit ouvert et le rendement pour la cellule avec BSF et Fenêtre. Avec l'utilisation d'une couche BSF, on augmente le courant de court circuit de **37.82 mA/cm²** à **43.92mA/cm²** et le rendement de **21.70%** à **26.52%**, l'introduction de la couche Fenêtre ramène la tension à circuit ouvert à une valeur de **0.811V** et le rendement de conversion à **31.66%**. Le facteur de forme est aussi amélioré de **76.2%** à **79.75%**.

	I _{cc} (mA/cm ²)	V _{co} (V)	FF (%)	η (%)
Cellule de référence	37.82	0.678	76.20	21.70
Cellule avec BSF	43.92	0.684	79.30	26.51
Cellule avec BSF et Fenêtre	44.02	0.810	79.75	31.66

Tableau 5.3 Paramètres photovoltaïques des trois cellules.

h) Comparaison avec des travaux similaires

Des travaux similaires ont été effectués par Zhang.X et J.Li [80], X.Shen et S.Lin [81]. Leurs résultats sont groupés dans le **tableau 5.4**.

Zhang.X et J.Li ont simulé une cellule solaire en In_{0.65}Ga_{0.35}N monojonction en utilisant le logiciel AMPS-1D (Analysis of Microelectronic and Photonic Structure), ils ont trouvé les performances suivantes $\eta = 20.284\%$, $V_{co} = 0.834 V$, $I_{cc} = 29.613 mA/cm^2$ et $FF = 82.2\%$ pour des dopages de $N_a=N_d = 5 \times 10^{17} cm^{-3}$ et d'épaisseurs $d_B=130nm$, $d_B=270nm$. X.Shen et S.Lin ont utilisé le même logiciel pour déterminer le rendement de conversion des cellules mono, double et triple jonction, ils ont trouvé un rendement = 24.95% , $V_{co} = 0.96 V$, $I_{cc} = 29.58 mA/cm^2$ et $FF = 88\%$ pour la même cellule et les mêmes paramètres technologiques susmentionnés.

	I _{cc} (mA/cm ²)	V _{co} (V)	FF (%)	η (%)
Zhang.X et J.Li [80]	29.613	0.834	82.20	20.284
X.Shen et S.Lin [81]	29.58	0.96	88.00	24.95
Notre travail	37.82	0.678	76.20	21.70

Tableau 5.4 Comparaison avec des travaux similaires.

5.3 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons optimisé les performances d'une cellule solaire en InGaN ($x=0,65$). Nous avons choisi une cellule monojonction de référence ensuite nous avons changé les paramètres technologiques (dopage et épaisseur) pour chacune de ses régions, donnant les meilleures performances. Nous avons obtenu, pour les paramètres technologiques optimaux des deux couches (l'émetteur et la base) suivants :

$d_E=60\text{nm}$, $d_B=340\text{nm}$, $N_a=N_d=1 \times 10^{17}\text{cm}^{-3}$ les meilleures performances suivantes $I_{cc} = 37.82\text{ mA/cm}^2$, $V_{co} = 0.678\text{ V}$, $FF = 76.2\%$ et $\eta = 21.70\%$ qui est de l'ordre de grandeur des rendements de la cellule solaire en $\text{In}_{0.65}\text{Ga}_{0.35}\text{N}$ (**20.284% et 24.95%**) obtenus par Zhang.X [80] et X.Shen et S.Lin [81] respectivement (voir **tableau 5.4** ci-dessus).

Ensuite, nous avons étudié l'influence de la longueur de diffusion sur la cellule, par cette étude nous avons confirmé notre choix de **6.5ns** pour la durée de vie des porteurs minoritaires.

Nous avons également étudié l'effet de la couche BSF et de la couche fenêtre, On a trouvé que la meilleure structure doit avoir une couche BSF mince ($d_{BSF}=60\text{nm}$), fortement dopé $N_{BSF}=5 \times 10^{19}\text{cm}^{-3}$ pour abaisser la valeur effective de la vitesse de recombinaison à la surface arrière et une couche fenêtre d'épaisseur réduite à un centième de microns ($d_F=0.01\mu\text{m}$) dopée à $N_F=2.5 \times 10^{19}\text{cm}^{-3}$. Le meilleur rendement obtenu est de **31.66%**.

Par la suite nous avons fait une étude comparative entre la cellule de référence et celles avec BSF seule et avec BSF et Fenêtre cela nous a permis de voir nettement sur quel paramètre influe chaque couche.

Conclusion générale

Conclusion générale

La production d'électricité photovoltaïque est largement dominée par le silicium avec 95 % des panneaux photovoltaïques installés. Cependant, ces panneaux souffrent d'un faible rendement moyen, environ 13 %. C'est pourquoi de nombreuses recherches se tournent sur l'augmentation de l'efficacité des panneaux photovoltaïques et sur des matériaux alternatifs possédant un meilleur rendement.

Parmi les nouveaux matériaux considérés prometteurs pour le photovoltaïque, l'alliage InGaN étudié intensément depuis plus d'une dizaine d'années. Il fut étudié dans un premier temps pour des applications de diodes électroluminescentes (LED) et de capteurs UV. Depuis le début des années 2000, il est étudié pour le photovoltaïque grâce à son large, direct et modulable gap d'énergie interdite pouvant couvrir le spectre solaire de l'infrarouge à l'ultraviolet.

Ce travail nous a permis de mieux appréhender les propriétés de ce matériau et de participer à l'optimisation d'une cellule solaire à base d'InGaN pour une concentration d'indium de 65%. Nous avons étudié principalement l'influence de l'épaisseur et du dopage des différentes couches (émetteur, base, BSF et fenêtre) sur les performances de la cellule.

Dans une première étape, nous avons optimisé les performances d'une cellule solaire $\text{In}_{0.65}\text{Ga}_{0.35}\text{N}$ monojonction en faisant varier l'épaisseur et le dopage de ses deux couches. Cette optimisation a abouti aux résultats suivants : pour $d_E=60\text{nm}$, $d_B=340\text{nm}$, $N_a=N_d=1 \times 10^{17}\text{cm}^{-3}$, les paramètres optimales sont $I_{cc} = 37.82\text{mA/cm}^2$, $V_{co} = 0.678\text{V}$, $FF = 76.2\%$ et $\eta = 21.70\%$ qui est proche à ceux trouvés dans la littérature.

L'ajout d'une couche BSF sur la face arrière de notre cellule, nous a permis d'apporter une amélioration remarquable du courant de court circuit I_{cc} et du rendement η qui ont atteint 43.92mA/cm^2 et 26.52% respectivement pour une épaisseur $d_{BSF}=60\text{nm}$ et un dopage $N_{BSF}=5 \times 10^{19}\text{cm}^{-3}$.

On a enregistré une amélioration de la tension en circuit ouvert V_{co} et du rendement de conversion η , lors de l'introduction d'une couche fenêtre d'épaisseur $d_F = 10\text{nm}$ dopée à $N_F = 2.5 \times 10^{19}$ sur la face avant de la cellule qui sont ramenés à **0.811V** et **31.66%** respectivement.

Donc, nous avons pu déterminer les paramètres critiques de la cellule et optimiser ses différents paramètres technologiques. Ainsi nous avons obtenu les meilleures performances suivantes : $I_{cc} = 44.02 \text{ mA/cm}^2$, $V_{co} = 0.810 \text{ V}$ et $FF = 79.75 \%$ et $\eta = 31.66 \%$ pour une cellule ayant les paramètres technologiques suivants : $d_E = 60\text{nm}$, $d_B = 340\text{nm}$, $d_{BSF} = 60\text{nm}$, $d_F = 10\text{nm}$, $N_E = N_B = 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, $N_{BSF} = 5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ et $N_F = 2.5 \times 10^{19}$.

Ce travail ouvre la voie à de nouvelles perspectives dans le domaine du photovoltaïque. On propose d'étudier l'effet de la concentration d'indium sur les performances de la cellule. Il semble nécessaire d'étudier également la jonction tunnel, pour aboutir à l'étude des cellules multi-jonctions à base d'InGaN. De telles structures simplifieront ainsi les procédés de fabrication des cellules, diminueront ainsi les coûts tout en produisant de hauts rendements de conversion photovoltaïque.

Bibliographie

- [01] P.PAPET " Nouveaux concepts pour la réalisation de cellules photovoltaïques à contacts interdigités sur substrats mince en silicium cristallin ". These de doctorat, l'Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 2007. (s.d.).
- [02] www.iea.org/textbase/nppdf/free/2009/key_stats_2009.pdf. (s.d.).
- [03] H.REEVES , " Mal de Terre ", science ouverte, éditions du seuil, mars 2003. (s.d.).
- [04] OBSERV'ER, " Baromètre du Solaire Photovoltaïque ", Système Solaires, Avril 2004, N° 160, pp.68-83. (s.d.).
- [05] 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. (s.d.).
- [06] BALDOMERO Garcia, "*Indium gallium nitride multijunction solar cell simulation using Silvaco Atlas*", Master's Thesis. Naval Post Graduate School, Monterey, California: 2007.
- [07] *Tableau périodique des éléments*, <http://Biblio.alloprof.qc.ca/Pages/Anonymes/DisplayFiches.aspx?ID=6016=150412>, consulté le 15/04/2012.
- [08] R.Castagné et al, "*Circuits intégrés en arsenure de Gallium. Physique, technologie et règles de conception*", Masson et CINET ENST Paris, 1989.
- [09] S.Laval, "*Physique des semi-conducteurs III-V*", Ecole d'été d'optoélectronique, 2002.
- [10] Wu, J., et al. *Small band gap bowing in In_{1-x}Ga_xN alloys*. *Applied Physics Letters*. 2002, Vol. 80, 4741.
- [11] Morkoç, H. *Handbook of Nitride Semiconductors and Devices*. Weinheim : WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2008. Vol. 1. 978-3-527-40837-5.
- [12] Yam, F.K. and Hassan, Z. *InGaN : An overview of the growth kinetics, physical properties and emission mechanisms*. *Superlattices and Microstructures*. 2008, Vol. 43, 1.
- [13] N.Grandjean, J.Massies. Les nitrures d'éléments III: des semiconducteurs singuliers? CRHEA, www.CNRS.fr/publications/imagesdephysique/couv-pdf/IdP01.../07.pdf. (s.d.).
- [14] Bernardini, F., Fiorentini, V. and Vanderbilt, D. *Spontaneous polarization and piezoelectric Communications*. 11, 1972, 617.
- [15] Liu, L. and Edgar, J.H. *Substrates for gallium nitride epitaxy*. *Materials Science and Engineering R*. 2002, Vol. 37, 61.
- [16] A. Dussaigne, "*Diodes électroluminescentes blanches monolithiques*", thèse de doctorat, Université de Nice-Sophia Antipolis, 2005.
- [17] Wright, A.F. and Nelson, J.S. *Explicit treatment of the gallium 3d electrons in GaN using the plane-wave pseudopotential method*. *Physical Review B*. 1994, Vol. 50, 2159.
- [18] Hahn: "*New developments for high power LEDs*", In Forum LED, Lyon France, 2009.

- [19] Bernardini, F., Fiorentini, V. and Vanderbilt, D. Spontaneous polarization and piezoelectric constants of III-V nitrides. *Physical Review B*. 1997, Vol. 56, R10024.
- [20] Shimada, K., Sota, T. and Suzuki, K. First-principles study on electronic and elastic properties of BN, AlN, and GaN. *Journal of Applied Physics*. 1998, Vol. 84, 4951.
- [21] V.GORGE, "Caractérisation de matériaux et test de composants des cellules solaires à base des nitrures des éléments III-V", Thèse de doctorat, université paris-sud 11, 2012. (s.d.).
- [22] Pousse, A., Atkins, P. and Jones, L. Chimie : molécules, matière, métamorphoses. 3ème édition. Paris : DeBoeck Université, 1998. p. 255 à 257. (s.d.).
- [23] 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*. 2011, Vol. 84, 195105. (s.d.).
- [24] Vegard, L. *Z. Phys.* 1921, Vol. 5, 17. (s.d.).
- [25] Denton, A.R. and Ashcroft, N.W. Vegard's Law. *Physical Review A*. 1991, Vol. 43, 3161. (s.d.).
- [26] Katsikini, M., et al. Raman study of Mg, Si, O, and N implanted GaN. *Journal of Applied Physics*. 2003, Vol. 94, 4389. (s.d.).
- [27] Axon, H.J. and Hume-Rothery, W. *Proc. R. Soc. London A*. 1948, Vol. 1, A193. (s.d.).
- [28] Wu, J. When group-III nitrides go infrared: New properties and perspectives. *Journal of Applied Physics*. 2009, Vol. 106, 011101. (s.d.).
- [29] Wu, J., et al. Universal bandgap bowing in group-III nitride alloys. *Solid State Communications*. 2003, Vol. 127, 411. (s.d.).
- [30] Monemar, B. Fundamental energy gap of GaN from photoluminescence excitation spectra. *Physical Review B*. 1974, Vol. 10, 676. (s.d.).
- [31] Wu, J., et al. Temperature dependence of the fundamental band gap of InN. *Journal of Applied Physics*. 2003, Vol. 94, 4457. (s.d.).
- [32] Vurgaftman, I. and Meyer, J.R. Band parameters for nitrogen-containing semiconductors. *Journal of Applied Physics*. 2003, Vol. 94, 3675. (s.d.).
- [33] Bougrov, V., et al. *Properties of Advanced Semiconductor Materials GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe*. New York : John Wiley & Sons, Inc., 2001. (s.d.).
- [34] Donmez, O., et al. High carrier concentration induced effects on the bowing parameter and the temperature dependence of the band gap of $GaxIn_{1-x}N$. *Journal of Applied Physics*. 2011, Vol. 110, 103506. (s.d.).
- [35] Schaff, W.J., et al. 868, s.l. : *Physica Status Solidi B*, 2008, Vol. 245. (s.d.).
- [36] Duan, X.M. and Stampft, C. 115207, s.l. : *Physical Review B*, 2008, Vol. 77. (s.d.).
- [37] Yildiz, A., et al. Structural, electrical and optical characterization of InGaN layers grown by MOVPE. *Chinese Physics B*. 2009, Vol. 18, 4007. (s.d.).

- [38] Neugebauer, J. and Van de Walle, C.G. Atomic geometry and electronic structure of native defects in GaN. *Physical Review B*. 1994, Vol. 50, 8067. (s.d.).
- [39] Gorczyca, I., Svane, A. and Christensen, N.E. Theory of point defects in GaN, AlN, and BN: Relaxation and pressure effects. *Physical Review B*. 1999, Vol. 60, 8147. (s.d.).
- [40] Stampfl, C., et al. Native defects and impurities in InN: First principles studies using the local density density Review B. 2000, Vol. 61, 7846. (s.d.).
- [41] Chernyak, L., et al. Electron beam induced current measurements of minority carrier diffusion lengths in gallium nitride. *Applied Physics Letters*. 1996, Vol. 69, 2531. (s.d.).
- [42] Ioffe Physico-Technical Institute. GaN - Gallium nitride. Electronic archive. New Semiconductor Materials. Characteristics and Properties. [Online] [Cited: 11 16, 2011.] <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/GaN/index.html>. (s.d.).
- [43] Ioffe Physico-Technical Institute. InN - Indium Nitride. New Semiconductor Materials. Characteristics and properties. [Online] [Cited: 12 13, 2011.] <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/InN/index.html>. (s.d.).
- [44] Optical constants of GaN (Gallium nitride). *RefractiveIndex.Info*. [Online] 2011. [Cited: 12 23, 2011.] <http://refractiveindex.info/?group=CRYSTALS&material=GaN>. (s.d.).
- [45] Anani, M., et al. In_xGa_{1-x}N refractive index calculations. *Microelectronics Journal*. 2007, Vol. 38, 262. (s.d.).
- [46] Muth, J.F., et al. Absorption coefficient, energy gap, exciton binding energy, and recombination lifetime of GaN obtained from transmission measurements. *Applied Physics Letters*. 1997, Vol. 71, 2572. (s.d.).
- [47] Trainor, J.W. and Rose, K. 821, s.l. : *Journal of Electronic Materials*, 1974, Vol. 3. (s.d.).
- [48] *L'effet photovoltaïque*, <http://www.energieplus-le-site.be/energieplus/page-16679.htm>, consulté le 15/04/2012.
- [49] Faruk Kurker, " *Microfabrication based design and simulation of hétérojonction solar cell*", MSc Thesis. INAS, çukurova university, ADANA, 2010.
- [50] *Color wavelength table*, www.usbyte.com/common/approximate_wavelength.htm, 02/05/2007, consulté le 15/04/2012.
- [51] P. Michalopoulos, " *Anovel approach for the development and optimisation of state-of-the-art photovoltaic devices using Silvaco*", Master's thesis, Naval Postgraduate School, Monterey, California, 2002.
- [52] H. Mathieu, " *Physique des semiconducteurs et des composants électroniques*", 2ème édition, Masson 1990.
- [53] S. M. SZE, *Physics of semiconductor Devices*, John Wiley & Sons, 1981.
- [54] Sylvain BRIGAND, " *Les principes de l'énergie solaire photovoltaïque*", complément technique Mars/Avril 2008, www.editionsdumoniteur.com, consulté le 12/11/2011.

- [55] J.Royer, T.Djiako, E.Schiller, B.Sada Sy, " *Le pompage photovoltaïque: Manuel de cours à l'intention des ingénieurs et des techniciens*", IEPF/université d'OTTAWA/EIER/CREPA,1998, www.iepf.org.
- [56] Y. Sayade, " *Détermination de la longueur de diffusion des porteurs de charges minoritaires dans le silicium cristallin par interaction lumière matière*", Thèse de Doctorat, INSA Lyon, 2009.
- [57] S. Djeroud, " *Caractérisation morphologique et optoélectronique des cellules solaires (α -Si:H)*", Mémoire de magistère, Université Oran, 2010.
- [58] PINTO M.R, Conor S. Rafferty and Robert W. Dutton, "PSCES2 - Poisson and continuity equation solver", *Stanford Electronics Laboratory Technical Report, Stanford University, September 1984*.
- [59] SELBERHERR, S. Analysis and simulation of semi conductor devices. Wien, New York: Springer-Verlag, 1984. (s.d.).
- [60] CRISTIANE HONSBURG, STUARTBOWDE. Photovoltaic devices, systems and applications, (PVCROM). Sydney, Univ of New South Wales, 1999. (s.d.).
- [61] SHOCKLEY.W, READ.W.T, "Statistics of the recombinations of holes and electrons". Physical Review, 1952, vol. 87, no5, p. 835-842. (s.d.).
- [62] HALL. R.N., "Electron Hole Recombination in Germanium", Physical Review, 1952, vol. 87, no2, p.387. (s.d.).
- [63] *Atlas user's manual, Silvaco international, 2004*.
- [64] KLAASSEN, D.B.M, A unified mobility model for device simulation- II. Température dependence of carrier mobility and life time, Solid-State Elect, 1992, Vol. 35, N°7 p.961-967. (s.d.).
- [65] DZIEWIOR J and W. SCHMID, Auger coefficient for highly doped and highly excited silicon, Appl Phys Lett, 1977, Vol 31, p 346-348. (s.d.).
- [66] HULDT, L., N. G. NILSSON AND K.G.SVANTESSON, "The temperature dependence of band to-band Auger recombination in silicon, Appl. Phys. Lett., 1979, Vol. 35 p. 776-777. (s.d.).
- [67] KERR.M.J, CUEVAS.A, "General parameterisation of Auger recombination in crystalline silicon", 2002, Vol.91, p.2473-2480. (s.d.).
- [68] 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. (s.d.).
- [69] 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. (s.d.).
- [70] CAUGHEY, D.M., AND R.E. THOMAS. "Carrier Mobilities in Silicon Empirically Related to Doping and Field." Proc. IEEE 55, (1967): 2192-2193. (s.d.).
- [71] 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. (s.d.).

- [72] 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. (s.d.).
- [73] 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. (s.d.).
- [74] 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. (s.d.).
- [75] 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. (s.d.).
- [76] 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. (s.d.).
- [77] 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. (s.d.).
- [78] A. D. Bates, " *Novel optimisation techniques for multijunction solar cell design using Atlas*", Master's Thesis, Naval Postgraduate school, Monterey, California, 2004.
- [79] R. NEGRU, " *Conception et modélisation de pixels de photodétection -photodiodes PIN- en vue de leurs utilisation comme détecteurs de particules*", Thèse de Docorat, Ecole Polytechnique, Plaiseau France, 2008.
- [80] Zhang.X et J.Li, "Simulation of In_{0.65}Ga_{0.35} single-junction solar cell", j of phys.D:Appl.Phys.40,7335-7338 (2007). (s.d.).
- [81] X.Shen, S.Lin, " Simulation of the InGaN-based tandem solar cell", Photovoltaic cell and module Technologies II, proc. of SPIE Vol.7045,70450, 2008. (s.d.).