REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE DJILLALI LIABES DE SIDI BEL ABBES

FACULTE DE GENIE ELECTRIQUE
DEPARTEMENT D'ELECTRONIQUE

Thèse

Présentée par : KHETTOU Abderrahim

Pour l'obtention du Diplôme de Doctorat LMD en Electronique

Spécialité: Nanostructures intégrées dans les dispositifs électroniques et optoélectroniques.

Thème

Simulation et optimisation des paramètres d'une cellule solaire Schottky à base des matériaux III/V nitrurés

Soutenu publiquement le / / 2021 devant les membres du jury :

Mme BENAMARA Zineb	**Professeur U.D.L (S.B.A)**	**Présidente**
Mr CHELLALI Mohammed	**Professeur U.D.L (S.B.A)**	**Directeur de thèse**
Mr MANSOURI Seddik	**Professeur U.D.L (S.B.A)**	**Co-Directeur de thèse**
Mme MAZARI Halima	**Professeur U.D.L (S.B.A)**	**Examinatrice**
Mr RABEHI Abdelaziz	**MCA C.U (Tismessilt)**	**Examinateur**
Melle AMEUR Kheira	**MCA U.D.L (S.B.A)**	**Examinatrice**

Année universitaire 2020-2021

Remerciements

Remerciements

Je remercie ALLAH le tout puissant de m'avoir donné le courage, la volonté et la patience de mener à terme ce présent travail.

Le travail présenté dans cette thèse a été réalisé au Laboratoire de Microélectronique Appliquée (AMEL) de l'Université Djillali Liabès de Sidi Bel-Abbés.

En premier lieu, je tiens à remercier Madame BENAMARA Zineb professeur à l'Université Djillali Liabes de Sidi Bel Abbés et directrice du laboratoire de Microélectronique Appliquée (AMEL) d'avoir accepté de présider le jury de cette thèse de doctorat Je tiens à lui exprimer ma profonde gratitude et mes sincères remerciements.

Je tiens à remercier mes directeurs de thèse Monsieur CHELLALI Mohammed et Monsieur MANSOURI Seddik, Professeurs à l'université Djillali Liabès de Sidi Bel-Abbès, de m'avoir permis d'effectuer cette thèse. Je les remercie pour leur disponibilité tout au long de ce travail, pour leurs conseils et suggestions avisés sans lesquels ce travail n'aurait pas abouti, ainsi que pour tous leurs efforts pour que ce travail se fasse dans les meilleures conditions. Je veux qu'ils trouvent ici l'expression de toute ma gratitude.

Je remercie vivement Monsieur RABEHI Abdelaziz, Docteur à l'université de Tissemsilt, qui m'a fait un grand honneur en acceptant de juger le travail de cette thèse.

Mes vifs remerciements vont également à Madame MAZARI Halima, Professeur à l'Université de Djillali Liabès de Sidi Bel-Abbès, d'avoir accepté d'être membre du jury de cette thèse.

Je tiens à remercier Mademoiselle AMEUR Kheira, Docteur à l'université Djillali Liabès de Sidi Bel-Abbès d'avoir accepté d'être membre du jury de cette thèse.

Enfin, je tiens à remercier tous les membres du laboratoire de Micro-Electronique Appliquée AMEL, tous mes amis (es) et tous mes collègues de travail.

Sommaire

Sommaire

Introduction générale …….. 01

Chapitre I : Les propriétés de base des composés III-V …… 07

I.1 Introduction …… 07

I.2 Définition des semi-conducteurs III-V …….. 07

I.3. L'intérêt des nitrures d'éléments III en optoélectronique …… 08

I.4 Description de nitrure d'Indium-Gallium …… 08

I.5 Caractéristiques structurales …… 11

1.6 Propriétés électroniques …… 18

1.7. Propriétés optiques …… 23

1.8 Propriétés thermiques …… 28

1.9 Applications InGaN …… 29

I.10 Hétéro-épitaxie des nitrures d'éléments III …… 30

I.11 Le dopage résiduel dans les nitrures …….. 38

I.12 Le dopage ……... 38

I.13 L'effet de la réalisation du Contact ohmique sur la couche p- InGaN ……... 38

I.14 Ségrégation d'Indium ……... 40

I.15 Conclusion …… 43

Chapitre II: Concepts généraux des cellules solaires …… 49

II.1 Historique ……... 49

II.2 Masse d'air …… 50

II.3 L'effet photovoltaïque ……... 50

II.4 Interaction rayonnement matière …… 51

II.5 La collecte des porteurs photo-générés …… 53

II.6 Les filières photovoltaïques …….. 54

II.7 Caractéristique physique des cellules solaires …… 59

II.8. InGaN POUR LE PHOTOVOLTAIQUE À HAUT RENDEMENT …….. 65

II.9 APPROCHE EXPÉRIMENTALE ET CONCEPTION DE CELLULES SOLAIRES InGaN ……... 70

II.10 Groupement des cellules solaires ……... 75

II.11 Objectifs de la thèse …… 77

II.12 Conclusion …… 78

Chapitre III Model physique et outil de simulation …… 82

III.1 Généralité sur le Logiciel Silvaco Tcad et modèles utilisés …….. 82

III.2 Modèle dérive-diffusion ……... 82

III.3 Modèles physiques …… 86
III.4 Optique …… 89
III.5 Effet Tunnel …….. 89
III.6 Rétrécissement de la bande interdite (Bandgap-Narrowing) …….. 93
III.7 L'outil de simulation AtlasTM (SILVACOTM) ……... 94
III.8 Sélection de la méthode numérique …… 101
III.9 Spécification des solutions ……... 102
III.10 Analyse des résultats …….. 102
III.11 Conclusion …….. 103
Chapitre IV : Simulation et optimisation ……... 105
IV.1 Cellule solaire sans couche P ……... 105
IV.2 Cellule solaire Schottky ……... 105
IV.3 Description de la structure et des modèles utilisés …… 108
IV.4 La structure Metal/n-InGaN/n-GaN …….. 112
IV.5 Optimisation des paramètres …….. 114
IV.6. Conclusion …… 127
Conclusion générale …….. 134

Introduction générale

Introduction générale

La nécessité de promouvoir un accès universel à une énergie durable fait du domaine de l'énergie un axe de développement majeur autour duquel de nombreuses recherches se concentrent. L'objectif ultime de toutes ces recherches est le développement d'un futur mix énergétique bas-carbone. Actuellement, la consommation mondiale d'énergie est très majoritairement satisfaite par les combustibles fossiles (pétrole, charbon, gaz naturel) polluants en carbone. Ces derniers assurent près de 85% de la consommation mondiale en énergie. Les énergies renouvelables (éolien, photovoltaïque) assurent, quant à eux, environ 3% de la consommation mondiale [1]. Afin de parvenir à une énergie décarbonée, la part des énergies renouvelables dans le mix énergétique devrait considérablement augmenter. D'énormes efforts sont donc actuellement entrepris à l'échelle mondiale pour le développement de ces énergies renouvelables dites également "propres".

Dans le secteur du photovoltaïque, les attentes sont nombreuses : augmentation de l'efficacité de conversion, diminution des coûts de production, diminution de l'impact environnemental, etc. Actuellement, la filière est largement dominée par la technologie silicium cristallin avec près de 93% de la production mondiale en 2016 [2]. Cependant, la production des cellules solaires à base de silicium reste coûteuse et nécessite une importante quantité de matériau. En outre, les cellules en silicium présentent actuellement en laboratoire, un rendement maximal de 25,6% [3], ce qui est très proche de la limite théorique maximale pour une cellule simple jonction [4]. Par conséquent, le besoin grandissant d'énergie photovoltaïque a poussé les travaux de recherche sur l'utilisation d'autres matériaux alternatifs, bien que cela ne signifie nullement l'arrêt des recherches dans la filière silicium. Aujourd'hui, ces recherches, très nombreuses et variées, se focalisent principalement sur les technologies à couches minces. Parmi ces technologies, on trouve notamment, celle à base de matériaux III-V (Matériaux composés d'éléments de la colonne III et de la colonne V du tableau périodique des éléments.) , très prometteuse en termes d'efficacité. Elle détient, de nos jours, les records en rendements avec des cellules solaires à multijonctions [3]. Dans ce travail de thèse, nous nous intéressons à l'alliage de Nitrure de Gallium-Indium(InGaN). Au cours des dernières décennies, les semi-conducteurs III-N ont été largement utilisés en optoélectronique [1-5]. En particulier, le nitrure d'indium et de gallium (InGaN) a été considéré comme l'un des matériaux pivots pour les applications photovoltaïques [6].

Introduction générale

L'$In_xGa_{1-x}N$ a émergé grâce à son énergie de bande interdite qui peut être ajustée par la teneur en Indium. En substance, l'énergie de la bande interdite est comprise entre 0,68 eV pour $x_{In} = 1$ et 3,44 eV pour $x_{In} = 0$ [7-10], ce qui fait de l'InGaN un matériau prometteur pour les cellules solaires [11, 12]. De plus, ses propriétés électriques et optiques telles qu'une tolérance élevée aux rayonnements [13], une mobilité élevée [14] et un coefficient d'absorption élevé [15], font de ce matériau un choix pertinent pour les applications photovoltaïques [16]. Ainsi, pour améliorer l'efficacité solaire, la connaissance des propriétés InGaN est nécessaire. Le défi majeur est d'obtenir une bonne qualité cristalline d'InGaN [6]. Cependant, les chercheurs scientifiques ont rapporté dans [17-19], l'échec de la croissance d'une couche de p-InGaN en raison de la forte densité résiduelle de donneurs [15]. de sorte que, l'application du contact ohmique sur le matériau p-InGaN semble difficile [16]. De plus, il est à noter que le p-n et le p-i-n InGaN sont toujours incapables de dépasser les rendements photovoltaïques des matériaux III-Nitrure et silicium [20].

En conséquence, nous proposons de remplacer la couche p par un contact Schottky (cellule solaire Schottky) pour résoudre ces problèmes critiques. Cette innovation est largement utilisée pour les dispositifs de puissance et les photo-détecteurs à base de nitrure III [14]. Alors qu'il est exceptionnellement nouveau pour la technologie photovoltaïque basée sur InGaN. Il y a eu quelques recherches faisant autorité qui ont rapporté la réalisation de cellules solaires Schottky fonctionnelles [21-24]. Récemment, Sid Ould Saad et al. [25] et Abdoulwahab Adaine et al. [26] ont réalisé les premières simulations numériques complètes vers cette voie. Cependant, ils n'ont pas pris en compte le problème de décalage de large bande [19, 27-29] et le grand décalage de réseau entre l'effet GaN et InGaN [30].

Expérimentalement, la couche d'InGaN devrait avoir une épaisseur supérieure à 400 nm visant à la fois à assurer une absorption importante de photons et un rendement élevé pour les applications solaires [29]. Néanmoins, les couches épaisses d'InGaN impliquent une concentration élevée en indium qui présente une limitation dans le processus expérimental [29]. En effet, la haut composition d'Indium conduit à l'accumulation des porteurs dans la couche active et un large décalage de bande de valence apparaît qui dégrade les performances des cellules [19, 29, 31]. La teneur en Indium est fondamentalement sélectionnée par la sélection d'offset de bande entre GaN et InN (de 0,5eV [32] à 1,1eV [33]. Cette large portée est affirmée expérimentalement et théoriquement, ce qui indique une détermination difficile de la teneur où une collection des porteurs et des caractéristiques *JV* sont influencés [8]. Une technique numérique avancée et différents modèles physiques sont étudiés pour approcher

notre structure de la réalité. Cette étude est axée sur les effets (i) du champ piézoélectrique, (ii) du décalage de réseau et (iii) la recombinaison de porteurs photo-générés dans l'hétéro-interface sur les performances des cellules solaires Schottky. Pour surmonter ces problèmes, plusieurs expérimentateurs ont utilisé la procédure de gradation dans le but de réduire les dislocations, le décalage de maille et les pertes de recombinaison de surface dans les cellules solaires étudiées [34-39].

Dans cette thèse, nous avons exclusivement étudié la cellule solaire Schottky n-InGaN/n-GaN avec l'ajout d'une couche graduelle entre GaN et InGaN, pour améliorer les performances photovoltaïques et améliorer les interfaces. Toutes les simulations de cette étude ont été réalisées à l'aide du logiciel Silvaco-Atlas.

Dans ce contexte l'objectif de la thèse est d'aboutir à la simulation et l'optimisation des cellules solaire Schottky à base d'InGaN et l'amélioration d'interface entre l'absorbeur et la couche fenêtre afin d'obtenir un bon rendement.

Nous avons articulé cette thèse autour de quatre chapitres : le premier chapitre entièrement bibliographique sera divisé en deux parties. Dans un premier temps, nous présenterons les propriétés de base des composés III-V, en particulier le GaN et l'InGaN qui fait l'objet de notre travail. Et par conséquent, dans ce même chapitre, nous détaillerons ces caractéristiques structurales électroniques, optiques, thermiques. Dans un deuxième temps, nous passerons en revue les défis associés à la croissance et à la fabrication des structures basées sur InGaN et discuterons de l'état de l'art. Alors qu'une partie de ce chapitre sera consacrée à l'état de l'art de différents types des structures à base d'InGaN.

Dans le second chapitre nous introduisons les concepts généraux des cellules solaires, l'historique, le principe de fonctionnement, ses paramètres importants et les différentes filières photovoltaïques existantes.

Nous présenterons dans le troisième chapitre une généralité sur le Logiciel Silvaco Tcad et les modèles physiques utilisés pour la modélisation des structures de cellules solaires et la nouvelle approche utilisée pour les optimiser. La mise en œuvre de ces méthodes est ensuite abordée sous l'angle technique.

Le quatrième chapitre est consacré à l'étude des structures de cellules solaires Schottky. Nous présentons l'optimisation de nouvelles structures de cellule et les comparons avec les structures conventionnelles. Une étude réalisée en tenant compte des contraintes technologiques actuelles est présentée dans la dernière partie du chapitre.

Cette thèse est terminée par une conclusion générale où les principaux résultats obtenus sont résumés et par des perspectives à ce travail.

Références :

[1] Florini A. The International Energy Agency in global energy governance. Global Policy. 2011;2:40-50.

[2] Johansson TB, Kelly H, Reddy AK, Williams RH. Renewable fuels and electricity for a growing world economy: defining and achieving the potential. Energy Studies Review. 1992;4.

[3] Green MA, Emery K, Hishikawa Y, Warta W, Dunlop ED, Levi DH, et al. Solar cell efficiency tables (version 49). Progress in photovoltaics: research and applications. 2017;25:3-13.

[4] Shockley W, Queisser HJ. Detailed balance limit of efficiency of p-n junction solar cells. Journal of Applied Physics. 1961;32:510-9.

[5] Vurgaftman I, Meyer Já, Ram-Mohan Lá. Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys. Journal of Applied Physics. 2001;89:5815-75.

[6] Moses PG, Miao M, Yan Q, Van de Walle CG. Hybrid functional investigations of band gaps and band alignments for AlN, GaN, InN, and InGaN. The Journal of chemical physics. 2011;134:084703.

[7] Moses PG, Van de Walle CG. Band bowing and band alignment in InGaN alloys. Applied Physics Letters. 2010;96:021908.

[8] Saidi H, Ridene S. High-efficiency of AlInGaN/Al (In) GaN-delta AlGaN quantum wells for deep-ultraviolet emission. Superlattices and Microstructures. 2016;98:504-14.

[9] Helal H, Benamara Z, Kacha AH, Amrani M, Rabehi A, Akkal B, et al. Comparative study of ionic bombardment and heat treatment on the electrical behavior of Au/GaN/n-GaAs Schottky diodes. Superlattices and Microstructures. 2019;135:106276.

[10] Jeng M-J, Lee Y-L, Chang L-B. Temperature dependences of InxGa1− xN multiple quantum well solar cells. Journal of Physics D: Applied Physics. 2009;42:105101.

[11] Wu J, Walukiewicz W, Yu KM, Ager III J, Haller E, Lu H, et al. Small band gap bowing in In 1− x Ga x N alloys. Applied Physics Letters. 2002;80:4741-3.

[12] Wu J. When group-III nitrides go infrared: New properties and perspectives. Journal of Applied Physics. 2009;106:5.

[13] Zhang X, Wang X, Xiao H, Yang C, Ran J, Wang C, et al. Simulation of In0. 65Ga0. 35 N single-junction solar cell. Journal of Physics D: Applied Physics. 2007;40:7335.

[14] Jani O, Ferguson I, Honsberg C, Kurtz S. Design and characterization of Ga N⁄ In Ga N solar cells. Applied Physics Letters. 2007;91:132117.

[15] Wu J, Walukiewicz W, Yu K, Shan W, Ager Iii J, Haller E, et al. Superior radiation resistance of In 1− x Ga x N alloys: Full-solar-spectrum photovoltaic material system. Journal of Applied Physics. 2003;94:6477-82.

[16] Hamady SOS. Simulation numérique et caractérisation de matériaux semi-conducteurs III-N pour détecteurs ultraviolet et cellules solaires 2017.

[17] Polyakov AY, Pearton S, Frenzer P, Ren F, Liu L, Kim J. Radiation effects in GaN materials and devices. Journal of Materials Chemistry C. 2013;1:877-87.

[18] Polyakov VM, Schwierz F. Low-field electron mobility in wurtzite InN. Applied Physics Letters. 2006;88:032101.

[19] Dahal R, Pantha B, Li J, Lin J, Jiang H. InGaN/GaN multiple quantum well solar cells with long operating wavelengths. Applied Physics Letters. 2009;94:063505.

[20] Bhuiyan AG, Sugita K, Hashimoto A, Yamamoto A. InGaN solar cells: present state of the art and important challenges. IEEE Journal of photovoltaics. 2012;2:276-93.

[21] Brown G, Ager III J, Walukiewicz W, Schaff W, Wu J. Probing and modulating surface electron accumulation in InN by the electrolyte gated Hall effect. Applied Physics Letters. 2008;93:262105.

[22] King P, Veal T, Jefferson P, McConville C, Lu H, Schaff W. Variation of band bending at the surface of Mg-doped InGaN: Evidence of p-type conductivity across the composition range. Physical Review B. 2007;75:115312.

[23] Brown G, Ager III J, Walukiewicz W, Wu J. Finite element simulations of compositionally graded InGaN solar cells. Solar Energy Materials and Solar Cells. 2010;94:478-83.

[24] Toledo NG, Mishra UK. InGaN solar cell requirements for high-efficiency integrated III-nitride/non-III-nitride tandem photovoltaic devices. Journal of Applied Physics. 2012;111:114505.

[25] Jun-Jun X, Dun-Jun C, Bin L, Zi-Li X, Ruo-Lian J, Rong Z, et al. Au/Pt/InGaN/GaN heterostructure schottky prototype solar cell. Chinese Physics Letters. 2009;26:098102.

[26] Mahala P, Behura SK, Dhanavantri C, Ray A, Jani O. Metal/InGaN Schottky junction solar cells: an analytical approach. Applied Physics A. 2015;118:1459-68.

[27] Chern KT, Allen NP, Ciarkowski TA, Laboutin OA, Welser RE, Guido LJ. GaInN/GaN solar cells made without p-type material using oxidized Ni/Au Schottky electrodes. Materials Science in Semiconductor Processing. 2016;55:2-6.

[28] Li Y, Yang W, Tu Z, Liu Z, Yang F, Zhang L, et al. Schottky junction solar cells based on graphene with different numbers of layers. Applied Physics Letters. 2014;104:043903.

[29] Hamady SOS, Adaine A, Fressengeas N. Numerical simulation of InGaN Schottky solar cell. Materials Science in Semiconductor Processing. 2016;41:219-25.

[30] Adaine A, Hamady SOS, Fressengeas N. Simulation study of a new InGaN p-layer free Schottky based solar cell. Superlattices and Microstructures. 2016;96:121-33.

[31] Schubert E, Tu L, Zydzik G, Kopf R, Benvenuti A, Pinto M. Elimination of heterojunction band discontinuities by modulation doping. Applied Physics Letters. 1992;60:466-8.

[32] Miller N, Jones R, Yu K, Ager J, Liliental-Weber Z, Haller E, et al. Low-temperature grown compositionally graded InGaN films. physica status solidi c. 2008;5:1866-9.

[33] Jeng M-J. Simulation of Nonpolar p-GaN/iN/n-GaN Solar Cells. International Journal of Photoenergy. 2012;2012.

[34] Zhao Y, Yan Q, Feezell D, Fujito K, Van de Walle C, Speck J, et al. Optical polarization characteristics of semipolar (303¯1) and (303¯1¯) InGaN/GaN light-emitting diodes. Optics Express. 2013;21:53.

[35] Kushwaha AS, Mahala P, Dhanavantri C. Optimization of p-GaN/InGaN/n-GaN double heterojunction pin solar cell for high efficiency: simulation approach. International Journal of Photoenergy. 2014;2014.

[36] Ernst W. The Large Optics Of Carbon. Advances in Fabrication and Metrology for Optics and Large Optics: International Society for Optics and Photonics; 1989. p. 277-83.

[37] Martin G, Botchkarev A, Rockett A, Morkoc H. Valence-band discontinuities of wurtzite GaN, AlN, and InN heterojunctions measured by x-ray photoemission spectroscopy. Applied Physics Letters. 1996;68:2541-3.

[38] Hossain MA, Islam MR, Hossain M, Hashimoto A, Yamamoto A. Dislocation reduction in heteroepitaxial In x Ga 1-x N using step-graded interlayer for future solar cells. Materials for Renewable and Sustainable Energy. 2014;3:20.

[39] Tersoff J. Dislocations and strain relief in compositionally graded layers. Applied Physics Letters. 1993;62:693-5.

[40] Yuan X, Sekiguchi T, Niitsuma J, Sakuma Y, Ito S, Ri S. Inhomogeneous distribution of dislocations in a SiGe graded layer and its influence on surface morphology and misfit dislocations at the interface of strained Si⁄ Si 0.8 Ge 0.2. Applied Physics Letters. 2005;86:162102.

[41] Zhang Y, Kappers M, Zhu D, Oehler F, Gao F, Humphreys C. The effect of dislocations on the efficiency of InGaN/GaN solar cells. Solar Energy Materials and Solar Cells. 2013;117:279-84.

[42] Sassi G. Theoretical analysis of solar cells based on graded band-gap structures. Journal of Applied Physics. 1983;54:5421-7.

[43] Virshup G, Ford C, Werthen J. A 19% efficient AlGaAs solar cell with graded band gap. Applied Physics Letters. 1985;47:1319-21.

Chapitre I

Les propriétés de base des composés III-V

I.1 Introduction:

Durant ces dernières années, la physique des semi-conducteurs III-V a connu un essor considérable. L'ingénierie de bande interdite s'est montrée fondamentale dans la conception de dispositifs microélectroniques rapides et optoélectroniques. La grande variété des composés réalisables et l'ouverture qu'ils donnent sur la conception des dispositifs sont totalement nouvelles. En effet, ces composés présentent des performances bien supérieures à celles des semi-conducteurs classiques et cela revient à leurs potentialités de couvrir les domaines de l'ultraviolet, du visible et de l'infrarouge. Ainsi la bonne connaissance des propriétés structurales, optiques, électroniques et thermiques est mise à profit pour l'étude des structures quantiques à base des multi-puits quantiques. Dans ce chapitre, nous allons rappeler brièvement, dans une première partie, les propriétés cristallines des semi-conducteurs III-V, en particulier le GaN et l'InGaN à base des quels seront conçues les structures qui font l'objet de notre travail.

Plusieurs propriétés uniques font de ce matériau un bon candidat pour les applications dans le domaine photovoltaïque. Et par conséquent, dans ce même chapitre, nous détaillerons ces caractéristiques structurales électroniques, optiques, thermiques et nous passerons en revue les défis associés à la croissance et à la fabrication des structures basées sur InGaN et discuterons de l'état de l'art. Alors qu'une partie de ce chapitre sera consacrée à l'état de l'art de différents types des structures à base d'InGaN.

I.2 Définition des semi-conducteurs III-V

Les cristaux semi-conducteurs des composés III-V (GaN, InN, BN, InGaN, BGaN, BInGaN, GaAs, GaInAs, GaSb, InAs, InP, InAlAs……) sont des corps composés formés à partir d'un élément de la colonne III et d'un élément de la colonne V de la classification périodique de tableau de Mendeleïev. Le tableau I.1 regroupe un extrait de cette classification (les chiffres en haut et bas représentent respectivement le nombre atomique et la masse atomique). Ainsi de nombreux composés binaires, 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 Galium	32 Ge Germanium	33 As Arsenic	34 Se Sélénium
48 Cd Cadmium	49 In Indium	50 Sn Etain	51 Sb Amimoine	52 Te Teliure
80 Hg Mercure	81 Tl Thallium	82 Pb Plomb	83 Bi Bismuth	84 Po Polonium

Tableau I.1: Tableau périodique partiel des différents matériaux semi-conducteurs. [1]

I.3. L'intérêt des nitrures d'éléments III en optoélectronique :

La réalisation des diodes laser [2], des diodes électroluminescentes (LED) [3], des transistors à haut mobilité électronique [4], et les photo-détecteurs dans la gamme UV [5] ont fait des nitrures du groupe III l'objet de recherches scientifiques et d'intérêt commercial au cours des 20 dernières années.

Le terme «nitrures III» désigne le nitrure d'aluminium (AlN), le nitrure de gallium (GaN), le nitrure d'indium (InN), le nitrure de bore (BN) et leurs alliages. Ces matériaux semi-conducteurs III-V sont activement étudiés parce qu'ils représentent une nouvelle catégorie de matériaux possédant des propriétés uniques : une bande interdite qui peut être modulable par l'ajout de composés, de fortes liaisons interatomiques ou encore une forte conductivité thermique qui les rendent très intéressants pour les domaines de l'optoélectronique de la haute température et de puissance [6]. C'est pour cette raison que nous allons tout particulièrement nous intéresser aux propriétés du ternaire InGaN. Les nitrures III présentent également des propriétés très intéressantes telles que la stabilité chimique, mécanique, thermique, des vitesses de dérive de saturation des porteurs et une dureté de rayonnement élevées, ce qui les rend attractifs pour les applications à haute puissance.

I.4 Description de nitrure d'Indium-Gallium(InGaN) :

I.4.1 Pourquoi en utiliser du nitrure d'indium et de gallium dans le domaine photovoltaïque:

Le nitrure d'indium et de gallium, ou InGaN, devrait être un excellent matériau pour les applications de cellules solaires. Le nitrure d'indium et de gallium (InGaN), est un alliage ternaire entre InN et GaN, est particulièrement intéressant pour l'industrie photovoltaïque. En

effet, InGaN peut théoriquement couvrir toutes les énergies de 0,78 eV à 3,42 eV, correspondant à plus de 70% du spectre AM1.5 (voir Figure I.1) contrairement aux autres semi-conducteurs couramment étudiés qui ne couvrent généralement que le 1/3.

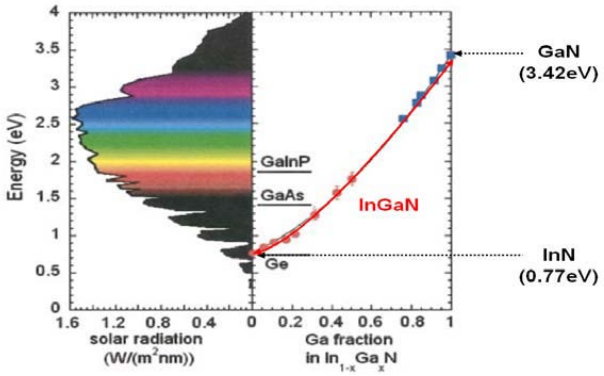


Figure I.1 – Variation du gap de l'alliage $In_{1-x}Ga_xN$ dans la gamme du spectre solaire AM1.5[7]

De plus, les alliages InGaN affichent des coefficients d'absorption dix fois plus élevés que les autres alternatives, ce qui fait de lui le meilleur candidat pour la fabrication de cellules solaires ultra-minces. Malgré le potentiel des alliages InGaN, ils n'ont été proposés que récemment pour les applications photovoltaïques[8],et relativement peu de cellules solaires InGaN fonctionnelles ont été réalisées[9]. Les difficultés liées à la croissance des épilayeurs InGaN monophasés à haute teneur en indium, avec un dopage de type p d'InGaN et des nitrures III en général, et le manque de substrats natifs sont parmi les principaux obstacles qui ont causé le retard dans le développement d'InGaN pour le photovoltaïque.

I.4.2 La croissance de Nitrure-III

La croissance de films de nitrure III de haute qualité est la condition indispensable pour avoir des dispositifs à une haute efficacité. La première couche monocristalline de GaN a été obtenue avec succès en 1969 par Maruska et Tietjen en utilisant la technique d'épitaxie en phase vapeur à l'hydrure (HVPE)[10]. Pour la croissance du GaN en utilisant la méthode HVPE, les éléments utilisés sont le gallium et les sources d'azote comme le chlorure de gallium avec l'ammoniac. Le taux de croissance du GaN dépend linéairement de la pression partielle d'entrée du chlorure de gallium. Le principal avantage de cette technique de croissance est la vitesse de croissance élevée, qui offre la possibilité de fabriquer du GaN monocristallin pour une épitaxie ultérieure des nitrures. Cependant, la surface du film utilisant cette technique de croissance est rugueuse.

L'épitaxie en phase vapeur métal-organique (MOVPE) est une autre technique de croissance de nitrure III couramment utilisée, qui utilise des gaz organiques métalliques (par exemple, le triméthyl gallium) et de l'ammoniac comme réactifs. Le GaN typiquement déposé sur des

substrats de saphir, le grand décalage de réseau entre eux et leurs différences de coefficient thermique conduisent à un film de GaN avec des grains et une surface rugueuse avec une grande densité de défauts dus aux contraintes thermiques. En 1986, Akasaki et Amano ont découvert qu'une fine couche tampon AlN à basse température pouvait améliorer la qualité cristalline du GaN[11]. Cette technique est appelée méthode en «deux étapes». De nos jours, la croissance MOVPE est largement utilisée pour une application commerciale dans les nitrures III. Il a un taux de croissance relativement élevé de ~ 2 µm / h. Le film épitaxial a des interfaces de haute qualité et généralement abruptes à l'échelle atomique. La croissance MOVPE des nitrures III se traduit toujours par une polarité de la face Ga, quelle que soit la couche de nucléation utilisée. Pour la croissance de GaN par MOVPE, la croissance typique se produit à une température de ~ 1150^{o}C, une pression d'azote entre 40 et 100 torr et un rapport V / III de 1000-2000. La croissance MOVPE du film InGaN nécessite des températures de croissance inférieures à 1000°C car la liaison In-N est thermiquement instable pour des températures supérieures à 630°C[12]. Cependant, l'efficacité de craquage de l'ammoniac est faible à des températures inférieures à 1000°C. Afin de compenser ces problèmes, un rapport III / V plus élevé > 5000 est généralement nécessaire avec une température de croissance d'environ 700^{o}C-900^{o}C. Au contraire, la croissance MOVPE d'AlGaN nécessite une température de croissance plus élevée > 1100°C parce que la liaison Al-N commence à se dissocier à environ 1040°C, [12] par conséquent, un rapport V/III inférieur <1000 est suggéré. La croissance de l'alliage quaternaire InAlGaN est assez difficile et l'incorporation d'indium est actuellement assez faible (c'est-à-dire [In] < 5%) en raison des conditions de croissance différentes pour InN par rapport au GaN et AlN.

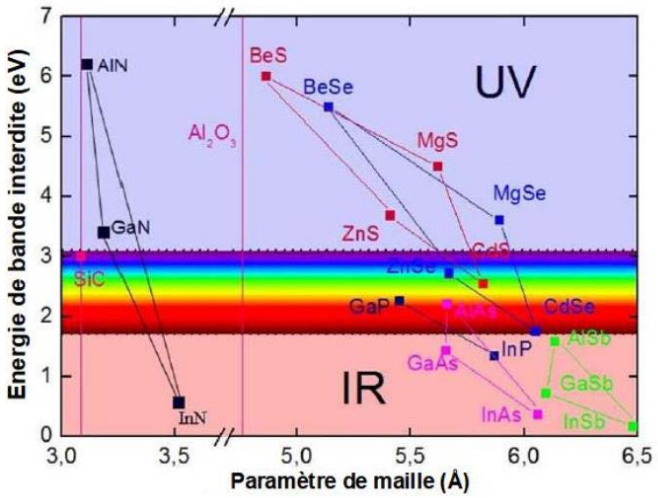
La MBE est une autre technique de croissance couramment utilisée dans les nitrures III. Les sources élémentaires sous forme de gaz ultra-pur sont dirigées vers un substrat chauffé sous un vide ultra-poussé, typiquement dans la gamme de 10-5-10-11 Torr. La température de croissance des nitrures III est généralement comprise entre 800 et 850 ^{o}C. Une température de croissance plus élevée entraînera un taux de croissance plus faible parce que les réactions directe et inverse se produisent en même temps avec des taux différents. Un rapport V / III plus élevé empêchera la dissociation du GaN. Un faible taux de croissance inférieur à 1 µm/h permet une croissance couche par couche. Les épilayeurs présentent des interfaces très abruptes. L'environnement ultravide permet de surveiller en temps réel le taux de croissance, l'épaisseur du film, la composition de l'alliage et la reconstruction des atomes à l'aide de la diffraction d'électrons à haute énergie par réflexion in situ (RHEED)[13]. La croissance MBE des nitrures III produit généralement des films avec une polarité N. Il existe certains

inconvénients de la croissance MBE des nitrures III tels que la nécessité d'un vide ultra-poussé, un taux de croissance plus lent que le MOVPE et la difficulté de traiter plusieurs plaquettes. En raison de ces inconvénients, la MBE n'est pas largement utilisé pour des applications commerciales. Cependant, la MBE est très prometteuse pour la croissance de films InGaN à haute teneur en indium en raison de la température de croissance plus basse.

I.5 Caractéristiques structurales :

I.5.1 Structures des bandes :

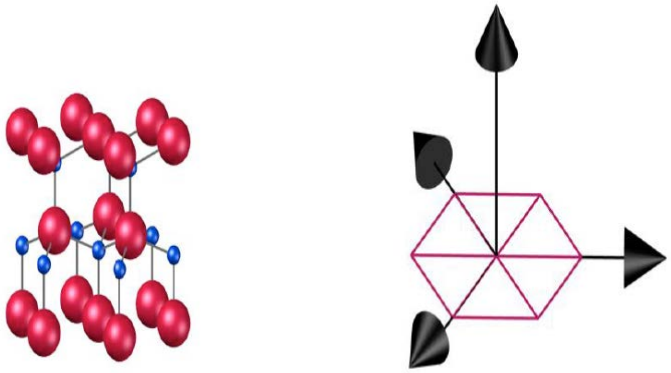
L'étude des structures de bandes d'énergie des semi-conducteurs constitue un axe de recherche très développé dans le domaine physique des matériaux pour la fabrication des dispositifs. Cette recherche approfondie conduit à une bonne compréhension des différentes propriétés électroniques telles que l'énergie de gap, les masses effectives, la discontinuité de bandes d'hétéro-structures. Les nitrures de Galium et d'Indium possèdent un gap direct c'est-à-dire que le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence se trouvent alignés dans l'espace des k au centre de la zone de Brillouin. Comme nous l'avons déjà signalé, l'intérêt majeur des nitrures réside dans son gap direct ce qui fait que la transition entre la bande de conduction et la bande de valence se fait sans changement du vecteur d'onde, ce qui permet en fait l'absorption et l'émission de la lumière d'une manière plus efficace que dans des matériaux à gap indirect comme le silicium. Les énergies de la bande interdite pour les deux binaires GaN et InN sont Eg_{GaN}= 3.39eV et Eg_{InN}= 0.7eV [6].



La Figure I.2 présente l'énergie de la bande interdite de certains semi-conducteurs en fonction des paramètres de maille[6].

I.5.2 La structure cristalline :

Le réseau cristallographique de ces deux matériaux GaN et InN est le plus stable dans une structure cristalline wurtzite, qui est un réseau cristallin hexagonal imbriqué où les éléments Ga ou In forment un réseau hexagonal avec les éléments N. La figure I.3 (a) illustre la structure wurtzite de GaN ou InGaN.



(a) (b)

Figure I.3: Représentation schématique d'un cristal de wurtzite III-nitrure. Les sphères rouges représentent l'élément du groupe III et les sphères bleues représentent l'azote. (b) description du réseau hexagonal et des indices de Miller.

Par convention, les directions et plans du cristal dans la configuration wurtzite sont désignés par le quadruplet *(h, k, i, l)* au lieu des indices de Miller standard (*h, k, l*). Les indices *h, k* et *i* sont dans le plan et à 120° les uns des autres, tandis que l'indice *l* s'étend le long de l'axe *c* du cristal comme le montre la figure I.3 (b). Cela signifie que les indices ne sont pas linéairement indépendants, en fait l'indice *i* supplémentaire est peut être défini en termes de *h* et *k*: $i = -(h + k)$[14]. Il y a deux longueurs qui définissent l'espacement d'équilibre du réseau cristallin et celles-ci sont désignées par les longueurs *a* et *c*. L'espacement du réseau cristallin le long des axes basaux est *a* et l'espacement du réseau le long de l'axe vertical du prisme hexagonal ou plan *c* est *c*[14].

De plus, le cristal wurtzite est symétrique par rapport à la direction [0 0 0 1] (ou axe *c*), mais manque de symétrie d'inversion. En d'autres termes, les orientations [0 0 0 1] et [0 0 0 1] ne sont pas équivalentes. L'asymétrie cristalline conduit les matériaux à être polaires. Cette polarisation est appelée polarisation spontanée, ~ P_{sp}. En fonction de la croissance du cristal, la direction de cette polarisation sera soit à face Ga, pointant à l'opposé de la direction de

croissance comme illustré sur la figure I.3 (a), soit à face N et pointant le long de la direction de croissance[15].

Lorsqu'une contrainte est appliquée au cristal InGaN, il se déforme. Dans le régime élastique, cette déformation peut être approchée par la loi de Hooke. Cela suppose qu'il existe une relation linéaire entre la contrainte (pression) et le désaccord de maille (déformation), et que cela peut être décrit par la rigidité du cristal. En tant que telle, la loi de Hooke peut être représentée en utilisant la notation d'Einstein comme suit:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}\epsilon_{kl} \quad \text{(I.1)}$$

σ_{ij} est le tenseur de contrainte, C_{ijkl} est le tenseur de rigidité et ϵ_{kl} est le vecteur de déformation. Les déformations du cristal entraîneront des changements de polarisation à l'intérieur du cristal, et *vice versa*. Ce phénomène s'appelle l'effet piézoélectrique. Le changement de polarisation piézoélectrique, $P_{pz,\ i}$, peut également être lié au tenseur de déformation ou au tenseur de contrainte à l'aide du tenseur piézoélectrique d_{ij} par l'équation[16]:

$$P_{pz,i} = d_{ijk}.\sigma_{ij} \quad \text{(I.2)}$$

Ainsi la polarisation totale peut être calculée comme la somme de la polarisation spontanée résultant de la structure du réseau cristallin et de la polarisation piézoélectrique résultant d'un déplacement d'équilibre du réseau cristallin:

$$\vec{P} = \vec{P}_{SP} + \vec{P}_{PZ} \quad \text{(I.3)}$$

I.5.3 Polarisation spontanée et piézoélectrique

La dernière caractéristique des nitrures III discutée dans cette section est la polarisation, une caractéristique importante de ces matériaux qui les distingue des autres semi-conducteurs. Les champs induits par polarisation élevée dans les nitrures sont responsables du succès des HEMT InGaN / GaN. Il existe deux types de polarisation, spontanée et piézoélectrique.

a / Polarisation spontanée :

La polarisation spontanée macroscopique dans les solides n'a été comprise que récemment, lorsque la théorie moderne de la polarisation (MTP) a été introduite[17]. L'origine microscopique de la polarisation peut être attribuée au fait que le centre géométrique des charges négatives dans le solide ne coïncide pas avec le centre des charges positives. Dans le cas des nitrures III, c'est le résultat de la non-équivalence de toutes les liaisons métal-azote (Ce n'est pas le cas dans les semi-conducteurs cubiques, où toutes les liaisons sont

équivalentes et le déplacement net des charges est nul. Ceci explique l'absence de polarisation spontanée dans les semi-conducteurs cubiques.). Le vecteur de polarisation spontanée nette P_{sp} coïncide avec la direction [0 0 0 1], c'est-à-dire l'axe de croissance.

Le vecteur P_{sp} pointe du cation (Ga / In / Al / B) vers l'anion le plus proche voisin (N). La direction macroscopique nette dépend du fait que la croissance est à face Ga (voir figure I.4a) ou à face N (voir figure I.4b). Les nitrures obtenus par MBE ou par MOVPE sur saphir présentent une croissance de face Ga, liée à la nitruration du substrat de saphir au début du processus de croissance classique en deux étapes[2]. Ainsi, P_{sp} pointe le long de la direction [0 0 0 1], à l'opposé de la direction de croissance.

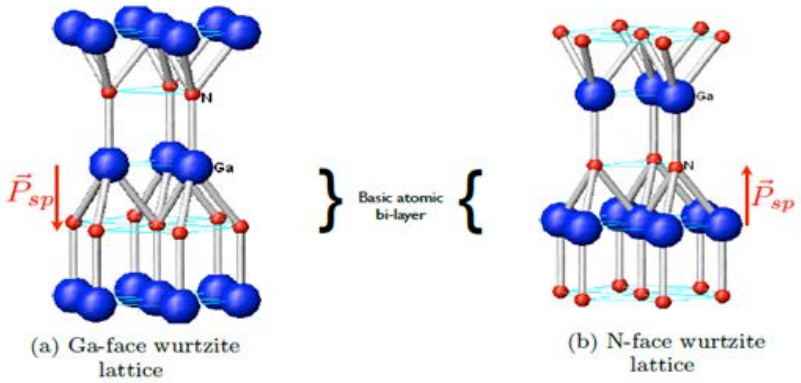


Figure I. 4: Orientations du réseau et vecteurs de polarisation spontanée correspondants.

Bernardini et Fiorentini[18] ont calculé l'amplitude de la P_{sp} dans le cadre du MTP, aussi bien pour les binaires nitrures que pour les ternaires. L'amplitude de P_{sp} pour GaN, AlN et InN est donnée dans le tableau I. 2. Il est à noter que la polarisation spontanée dans AlN est la plus élevée observée dans tous les matériaux de wurtzite connus

Parameter (Unit)	GaN	AlN	InN
P_{sp} (Cm^{-2})	-0.034	-0.09	-0.042

Tableau I. 2: Polarisation spontanée dans les binaires de nitrure III[19, 20].

Ils ont également montré que la polarisation spontanée dans les alliages ternaires et quaternaires de nitrure a une forte composante non linéaire. La non-linéarité peut être modélisée dans une bonne mesure en utilisant une interpolation linéaire avec un terme de correction quadratique analogue à l'inclinaison de la bande interdite [21, 22]:

$$P_{sp}^{ABN} = xP_{sp}^{AN} + (1-x)P_{sp}^{BN} + bx(1-x) \quad \text{(I.4)}$$

Le paramètre de courbure approprié pour InGaN, AlGaN et InAlN est donné dans le tableau I. 3. La polarisation spontanée dans un alliage quaternaire $A_xB_yC_{1-x-y}N$ est obtenue à partir de

$$P_{sp}^{ABCN} = xP_{sp}^{AN} + xP_{sp}^{BN} + (1-x-y)P_{sp}^{CN} + b_{ACN}x(1-x-y) + b_{BCN}y(1-x-y) + b_{ACN}xy + b_{ACN}xy(1-x-y) \quad \text{(I.5)}$$

le dernier terme rend compte de la courbure quaternaire pure, mais peut être négligé dans les quaternaires communs de nitrures III [19].

	InGaN	AlGaN	InAlN
b (Cm^{-2})	0.037	0.021	0.070

Tableau I. 3: Paramètres de flexion pour la polarisation spontanée dans les alliages de nitrure III. [19, 20, 22].

***b* / Polarisation piézoélectrique :**

La polarisation piézoélectrique est due à la déformation mécanique des liaisons covalentes qui est responsable de la séparation du centre géométrique des charges positives et négatives. Le vecteur piézoélectrique P_{pz} est parallèle au vecteur de la déformation, et son amplitude est donnée par

$$P_{pz} = \varepsilon_x e_{31} + \varepsilon_y e_{32} + \varepsilon_z e_{33} \quad \text{(I.6)}$$

où $\varepsilon_x, \varepsilon_y \; et \; \varepsilon_z$ sont les composantes de la déformation dans les directions x, y et z, respectivement, et e_{ij} les coefficients piézoélectriques des nitrures III. Dans les réseaux wurtzite orientés [0 0 0 1]$\varepsilon_x = \varepsilon_y$et e31 = e32, et la déformation hors plan $\varepsilon_z$est liée à la déformation dans le plan$\varepsilon_x$par l'équation 2.6. Ainsi, la polarisation piézoélectrique d'un binaire de nitrure III est donnée par

$$P_{pz} = 2\varepsilon_x(e_{31} - e_{33}\frac{C_{13}}{C_{33}}) \quad \text{(I.7)}$$

Les valeurs des coefficients piézoélectriques de GaN, AlN et InN sont résumées dans le tableau I.4.

Parameter (Unit)	GaN	AlN	InN
e_{31} (Cm^{-2})	-0.338	-0.533	-0.412
e_{33} (Cm^{-2})	0.667	1.505	0.815

Tableau I. 4: Coefficients piézoélectriques dans les binaires de nitrure III. [18, 22]

Bernardini et Fiorentini[21] ont également montré que la méthode appropriée pour calculer la polarisation piézoélectrique des alliages ternaires de nitrure III consiste à calculer d'abord la polarisation des binaires d'extrémité. La polarisation piézoélectrique nette dans le ternaire est obtenue à partir de la somme pondérée des polarisations piézoélectriques des binaires. Si l'on prend $In_xGa_{1-x}N$mis en correspondance avec le réseau GaN comme exemple, la déformation dans le plan est

$$\varepsilon_x = \frac{a^{GaN} - a(x)}{a(x)} \quad \text{(I.8)}$$

Où$a(x)$est le paramètre de réseau relâché d'$In_xGa_{1-x}N$, obtenu à partir de la loi de Vegard (Cette définition est utilisée ici conformément à la dérivation présentée dans la référence [35], malgré le fait qu'il ne soit pas normalisé par rapport au paramètre de réseau du substrat). Cette expression peut être développée comme suit:

$$\varepsilon_x = \frac{x(a^{GaN} - a^{InN})}{xa^{InN} + (1-x)a^{GaN}} \quad \text{(I.9)}$$

En utilisant cette équation, on calcule alors P_{pz} (InN;ε_x) et P_{pz} (GaN;ε_x). Enfin, la polarisation piézoélectrique d'$In_xGa_{1-x}N$, P_{pz} ($In_xGa_{1-x}N$;ε_x) de l'alliage $In_xGa_{1-x}N$ est obtenue à partir de

$$P_{pz}(In_xGa_{1-x}N, \varepsilon_x) = xP_{pz}(InN, \varepsilon_x) + (1-x)P_{pz}(GaN, \varepsilon_x) \quad \text{(I.10)}$$

Aucun paramètre de courbure n'est requis dans ce cas.

***c*/ Effet de la polarisation nette :**

La polarisation nette en nitrures III est donnée par la somme des polarisations spontanée et piézoélectrique:

$$P = P_{sp} + P_{pz} \quad \text{(I.11)}$$

Comme P_{sp} et P_{pz} sont colinéaires dans le cas de nitrures III croisés épitaxialement le long de la direction [0 0 0 1], cette relation est en fait une équation algébrique:

$$P = P_{sp} + P_{pz} \quad \text{(I.12)}$$

Dans un cristal massif, la polarisation microscopique est moyennée partout sauf aux interfaces. Si l'interface est entre deux matériaux pyroélectriques différents, la discontinuité dans le réseau cristallin donne lieu à une charge électrique de feuilleσ_{pol}. Cette charge de feuille peut être liée à la polarisation nette par les équations de continuité du champ de déplacement

$$\sigma_{pol} = \left(P_{sp}^{top} + P_{pz}^{top}\right) - \left(P_{sp}^{bottom} + P_{pz}^{bottom}\right) \quad \text{(I.13)}$$

Cette grandeur peut également être liée à la densité de porteurs de surface N_s observée dans le gaz d'électrons 2D (2DEG) qui se forme à l'interface des HEMT AlGaN / GaN:

$$N_s = \frac{\sigma_{pol}}{q} \quad \text{(I.14)}$$

La modélisation précise des structures multicouches, comme les structures InGaN / GaN semi-massives.

Dans la formulation la plus générale, la force de la polarisation induite on donne un champ électrique le long de [0 0 0 1] dans la couche *j* d'épaisseur *Lj* d'une structure à N-couches par

$$E_j = \frac{\sum_{k=1}^{N} \frac{P_k l_k}{\epsilon_k} - P_j \sum_{k=1}^{N} \frac{l_k}{\epsilon_k}}{\epsilon_j \sum_{k=1}^{N} \frac{l_k}{\epsilon_k}} \quad \text{(I.15)}$$

Cette équation est obtenue à partir de la continuité du déplacement électrique *D* à travers les différentes interfaces. Le champ de déplacement électrostatique est lié à *P* et *E*

$$D = \epsilon E + P = \epsilon E + P_s + P_{pz} \quad \text{(I.16)}$$

Où ϵ est le constant diélectrique statique des matériaux. L'effet de la polarisation nette décrit dans cette section peut modifier considérablement le diagramme de bande et les propriétés de transport des dispositifs à nitrure III. Récemment, il a été montré que le champ électrique induit par polarisation dans les cellules solaires P-I-N InGaN est d'une ampleur similaire à celle du champ électrique induit par le profil de dopage. Dans la conception P-I-N conventionnelle, où la couche de recouvrement p-GaN est au sommet de la structure, les deux champs peuvent même s'annuler. Une conception inversée P-I-N, ou N-I-P, qui utiliserait une couche de recouvrement n-GaN pourrait être plus appropriée [23, 24]. Les modèles décrits précédemment sont pris en compte dans le schéma de calcul numérique proposé par le logiciel Silavco ATLAS de la suite Silvaco TCAD.

I.6 Propriétés électroniques :

I.6.1 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 Végard avec un paramètre de courbure, comme le montre la Figure I.5. La loi de Végard 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. 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. On doit, alors, introduire un paramètre de courbure dans l'expression afin de suivre les données expérimentales. La loi de Végard pour l'alliage InGaN est définie par :

$$Eg_{InGaN} = xE_{gInN} + (1 - x)\, Eg_{GaN} - bx(1 - x) \qquad (I.17)$$

Avec x : est la fraction d'indium pour InxGa1-xN

b : est le paramètre de courbure

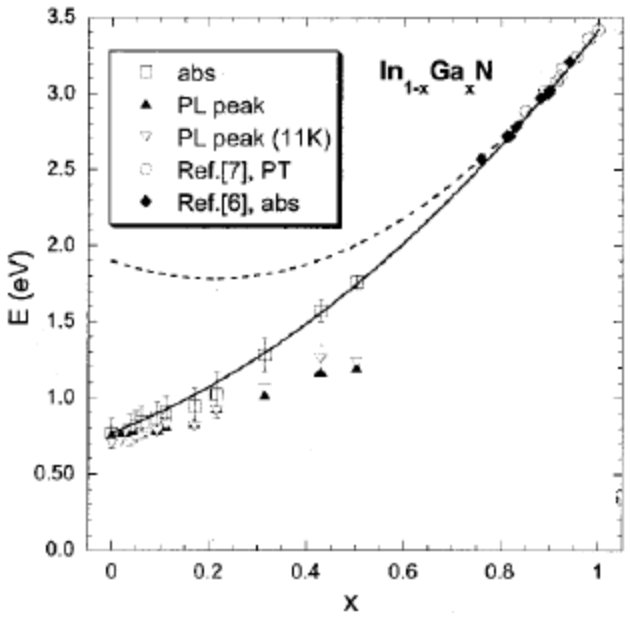


Figure I.5 : Evolution du gap d'énergie interdite de l'$In_{1-x}Ga_xN$ en fonction de la concentration[1].

I.6.2 Evolution du gap d'énergie interdite en fonction de la température :

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

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{T+\beta} \quad \text{(I.18)}$$

L'ensemble des paramètres Eg(0), α et β sont déterminés par la méthode de moindres carrées à partir des données expérimentales.

Avec Eg(0) le gap d'énergie du matériau à 0K [eV]

α le coefficient de régression linéaire du gap pour les températures élevées [eV.K-1]

β est une constante associée à la température de Debye sur laquelle intervient le changement de pente.

Ces paramètres pour le GaN et l'InN sont rassemblés dans le Tableau I.5. L'évolution des gaps d'énergie de GaN et de l'InN en fonction de la température est représentée dans la figure I.6 et la figure I.7, respectivement.

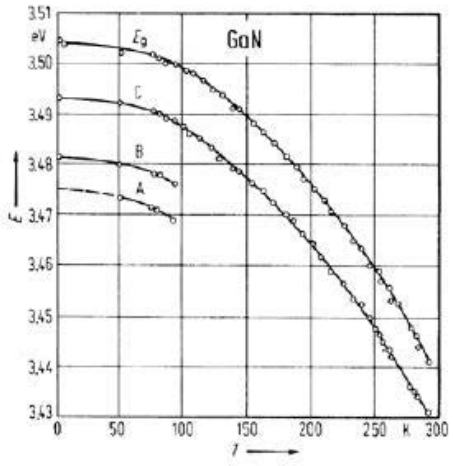


Figure I.6 : Evolution du gap d'énergie de GaN en fonction de la température. Les courbes A, B et C font référence aux excitons du même nom[25].

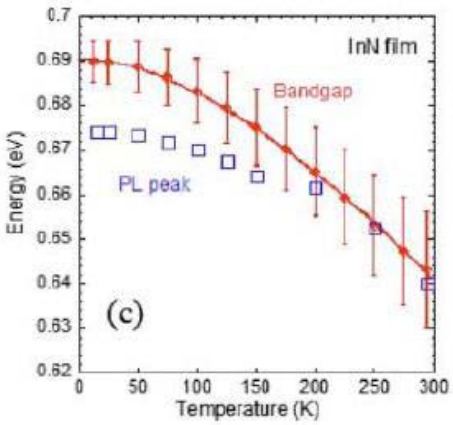


Figure I.7 : Evolution du gap d'énergie pour InN en fonction de la température [8].

I.6.3 Masse effective des binaires (InN, GaN) :

Les masses effectives de porteurs dans un semi-conducteur sont directement reliées à sa structure de bande, elles sont inversement proportionnelles à la courbure des bandes :

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{h^2}\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \quad \text{(I.19)}$$

Les valeurs de masses effectives des électrons et des trous pour les nitrures GaN et InN de structure hexagonale sont présentées dans le tableau 1.5

Masse effective	Valeur
m_e^{InN}	$0.2m_0$ [Levinshtein et al 2001]
m_e^{GaN}	$1.25m_0$ [santic 2003]

Table I.5 Masse effectives d'InN et GaN.

Pour le ternaire InGaN, la variation des masses effectives des électrons et des trous au voisinage de minimum de la bande de conduction, montre que ce paramètre donné en fonction de la quantité d'indium suit un comportement selon la loi de Végard[26]:

$$m^*_{InGaN} = m^*_{GaN}.X + m^*_{InN}.(1-x) \quad \text{(I.20)}$$

I.6.4 Masse effective en fonction de la température :

La variation de la masse effective des électrons en fonction de la température est évaluée d'après l'expression suivante[27].

$$\frac{m_0}{m^*(T)} = 1 + \left[\frac{E_P^\Gamma(E_P^\Gamma(T)+(2/3)\Delta_{so})}{E_P^\Gamma(T)(E_P^\Gamma(T)+\Delta_{so})}\right] \quad \text{(I.21)}$$

Où m_0 est la masse de l'électron libre, EPΓ est l'énergie liée à l'élément de la matrice de quantité de mouvement, Δ_{s0} est la division spin-orbite, $Eg^\Gamma(T)$ est la variation de l'énergie du gap, et Γ représente InN ou GaN. Les valeurs de ces paramètres sont reportées dans le tableau I.6.

Paramèters	GaN	InN
E_P^Γ (eV)	14.0	14.6
$E_g^\Gamma(T = 0K)$ (eV)	3.42	0.71
Δ_{so}(eV)	0.014	0.001
α (meV/K)	0.909	0.245
β(K)	830	624

Tableau I.6. Paramètres des matériaux GaN et InN [27].

I.6.5 Le caractère intrinsèque :

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 intrinsèque de type N [28]. Cette forte densité d'électrons peut 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 [29-31]. En effet, d'après les calculs, ces lacunes ont la plus faible énergie de formation dans GaN et InN. 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[32]. Ont montré que la concentration d'électrons dans InN est dépendante de l'épaisseur de la couche. Ainsi, la concentration des électrons suit la densité de défauts dus au désaccord de maille (voir Figure I.8). C'est pourquoi les défauts, et non les contaminants, sont la principale source d'électrons dans InN [29].

La Figure 1.8 montre l'évolution de la concentration d'électrons en fonction de la température dans différents alliages d'$In_{1-x}Ga_xN$, *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.

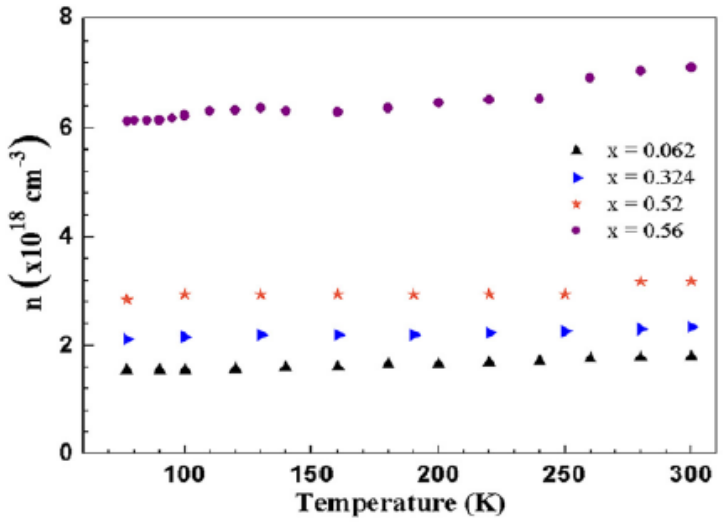


Figure I.8 : Concentration d'électrons en fonction de la température dans $In_{1-x}Ga_xN$ avec différentes concentrations d'indium[30].

Cette forte concentration de porteurs libres dans le matériau peut interférer dans la détermination du gap d'énergie[30]. 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 la température d'une part, et de la composition d'autre part, à partir des données de photoluminescence. Ce phénomène peut être à l'origine de la variation des données publiées dans la littérature.

I.6.6 Mobilité des porteurs dans les nitrures :

La mobilité des porteurs libres dans l'$In_{1-x}Ga_xN$ est présentée dans la Figure I.9. On observe que la mobilité diminue avec la concentration de Ga. Ceci est dû à l'augmentation de la masse effective des électrons avec l'augmentation de la concentration de Ga dans l'$In_{1-x}Ga_xN$ (me_{GaN} = 0,2 m_0 et me_{InN} = 0,11 m_0), mais aussi à l'augmentation du phénomène de diffusion des porteurs à cause de l'alliage et des défauts qui augmentent avec la concentration de Ga dans l'$In_{1-x}Ga_xN$. On remarque également que la mobilité est quasiment indépendante de la température.

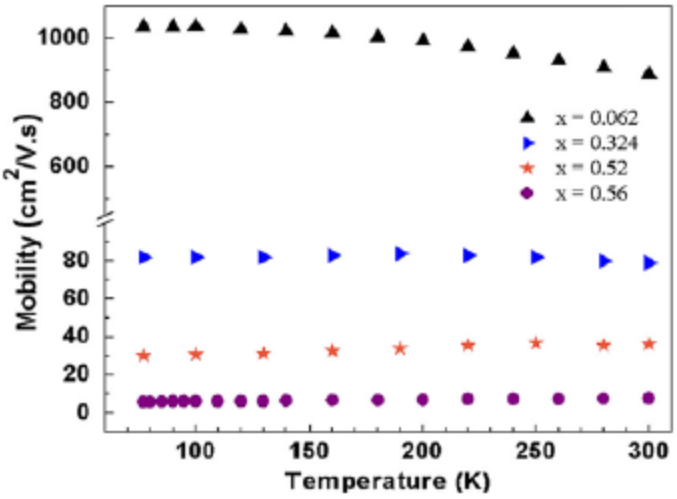


Figure I.9 : Mobilité des porteurs libres dans $In_{1-x}Ga_xN$ en fonction de la température [30].

I.6.7 Longueur de diffusion

La longueur de diffusion, notée *L* est par définition la distance moyenne sur laquelle les porteurs peuvent se déplacer par diffusion. La longueur de diffusion est un paramètre à connaître lors de la conception d'un composant électronique, telle qu'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.

Elle est exprimée par :

$$L = \sqrt{D_\tau} \quad \text{(I.22)}$$

τ la durée de vie des porteurs [s],

D le coefficient de diffusion des porteurs [$cm^{-2}s^{-1}$], qui est défini par :

$$D = \frac{kT}{q}\mu \quad \text{(I.23)}$$

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

I.7. 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 constitué de différents matériaux, la lumière a une 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.

I.7.1. Indice de réfraction :

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

$$n = \frac{c}{v} \quad \text{(I.24)}$$

La Figure 1.10 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 l'environ 2,3 et pour l'InN, elle est environ de 2,9 dans l'infrarouge[6].

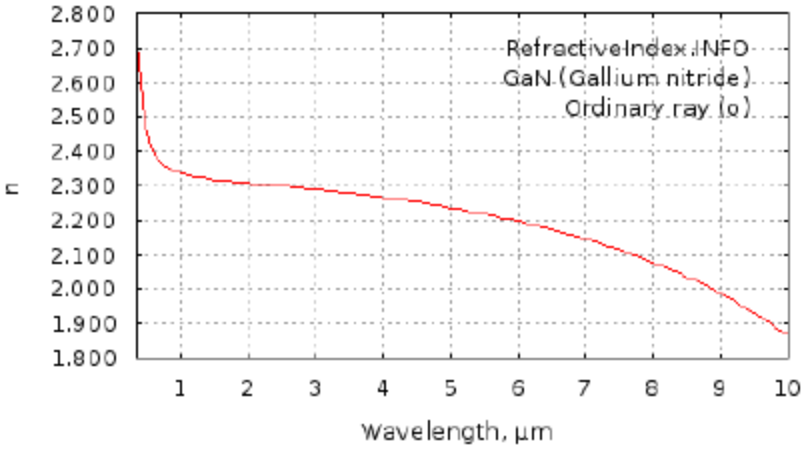


Figure I.10 : Indice de réfraction du GaN entre 0,35 et 10µm [33].

Ont estimé la variation de l'indice de réfraction d'alliages InGaN en fonction de la composition d'indium Figure I.11[33]. Ils ont relié la formule de l'indice de réfraction, n, à l'énergie d'un photon absorbé par un matériau, Eg, définie par :

$$E_g = \frac{hc}{\lambda} \tag{I.25}$$

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

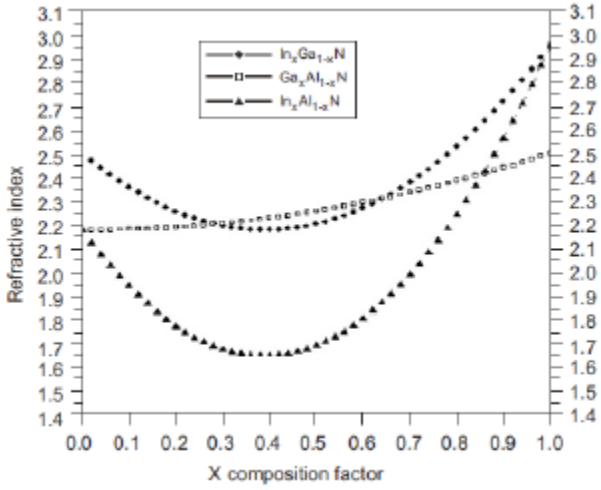


Figure I.11 : Estimation de la variation de l'indice de réfraction dans l'InGaN, le GaAlN et l'InAlN[33].

Généralement, l'indice de réfraction est une grandeur sans dimension et il détermine le comportement de la lumière dans le matériau. La lumière incidente sur une interface entre deux matériaux ayant différents indices de réfraction va avoir une partie transmise et une partie réfléchie. La trajectoire de chaque partie est déterminée par la loi Snell-Descartes :

$$n_1 \sin\theta_1 = n_2 \sin\theta_2 \tag{I.26}$$

Où n_1 et n2 sont les indices de réfraction des deux matériaux. θ_1 est l'angle d'incidence et θ_2 est l'angle de réfraction du faisceau transmis. L'angle de réflexion est le même que l'angle d'incidence. Ces grandeurs sont présentées dans la Figure I.12.

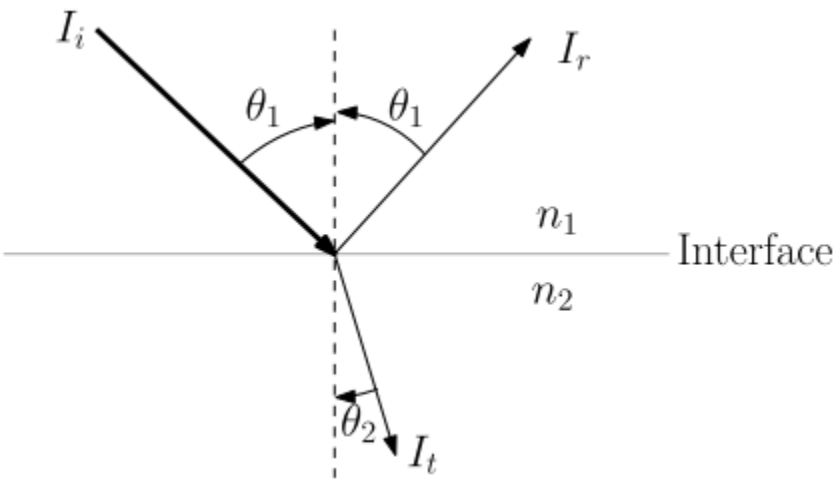


Figure I.12: Schéma montrant les grandeurs de la loi Snell-Descartes [34]

L'intensité du faisceau réfléchi Ir et du faisceau transmis I*t* est déterminée, pour une incidence normale, par la différence entre les indices de réfraction des deux matériaux. Elles sont données par:

Ir = I. R (I.27)

Ir = I. T (I.28)

où I*i* est l'intensité du faisceau incident, R et T sont la réflectance et la transmittance à l'interface, et elles sont données par :

$$R = \left(\frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2}\right)^2 \quad \text{(I.29)}$$

T= 1-R (I.30)

Plus la différence entre les indices de réfraction est grande, plus l'interface est réfléchissante. Pour les cellules solaires, la réflexion peut être réduite par deux voies principales : ARC ; Texturation.

La première consiste à ajouter une ou plusieurs couches en face avant du semi-conducteur qui amortissent le contraste d'indice de réfraction entre l'air et le semi-conducteur.

La deuxième consiste à rendre la surface rugueuse qui permet d'avoir des réflexions multiples comme montré dans la Figure I.13.

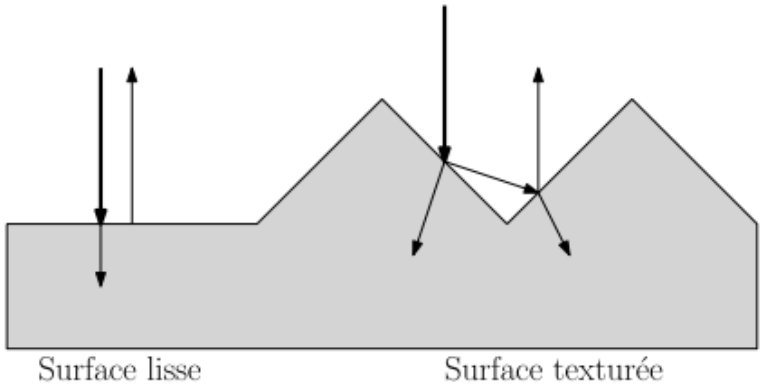


Figure I.13: Schéma montrant la différence entre la réflexion sur une surface lisse et sur une surface texturée.

Lorsque le phénomène d'absorption a lieu dans un matériau alors l'indice de réfraction a une composante complexe défini par :

$$N = (n(\lambda) - ik(\lambda)) \qquad (I.31)$$

Où k(λ) est le coefficient d'atténuation ou d'extinction.

Un exemple de courbe de transmission, de réflexion et d'absorption que l'on peut voir dans du GaN est montré dans la figure I.14 et la figure I.15. Le seuil de transmission ou d'absorption observé sur ces figures autour de 360 nm correspond au gap d'énergie du matériau. On peut alors, d'après ces mesures déterminer le gap du matériau, ici, 3,41 eV, ce qui correspond bien au gap du GaN.

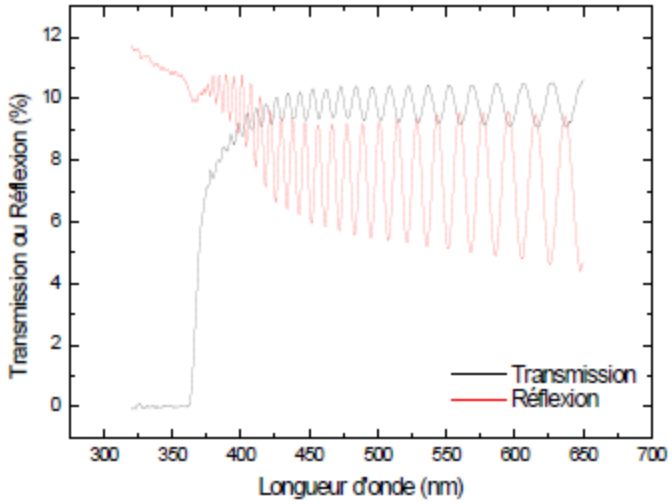


Figure I.14 : Courbe de transmission (noire) et de réflexion (rouge) du GaN[35].

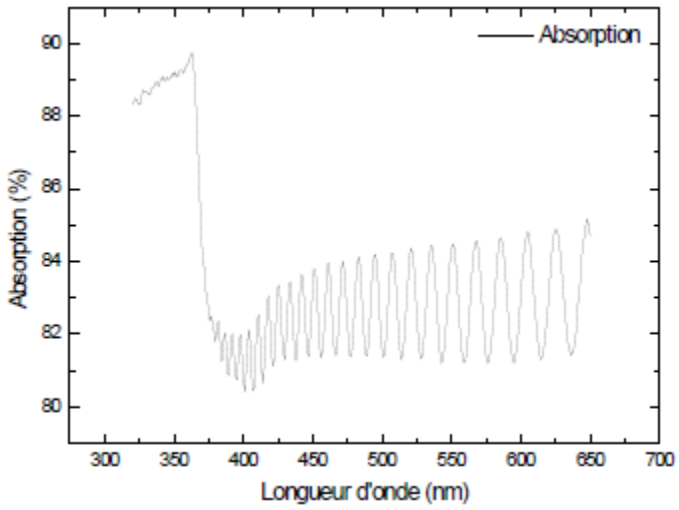


Figure I.15 : Courbe d'absorption du GaN[35].

I.7.2 Coefficient d'absorption :

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. Le flux lumineux à une certaine profondeur est donné par la loi de Beer-Lambert :

$$\varphi(x) = \varphi_0 exp(-\alpha(x)) \qquad \text{(I.32)}$$

Où $\varphi_0$est le flux lumineux à la surface et αle coefficient d'absorption.

x: représente la distance parcourue par la lumière dans le matériau. Les paramètres optiques du GaN et de l'InN sont résumés dans le Tableau I.7.

	GaN	InN
Indice de réfraction	2.3	2.9
Constantes diélectriques statiques [s.d]	10.4	14.3
Constantes diélectriques à hautes fréquence [s.d]	5.8	8.4
Coefficient d'absorption [cm^{-1}]	1.10^5	5.10^4

Tableau I.7 : Les paramètres optiques du GaN et de l'InN.[35]

I.8 Propriétés thermiques :

I.8.1 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 [6].

$$R_{th}=\Delta T/p \qquad (I.33)$$

Avec : P la puissance dissipée en W et ΔT l'élévation de la température en K.

I.8.2 Expansion thermique :

Le coefficient d'expansion thermique (CET) α, décrit la dilatation ou la contraction d'un réseau cristallin à une variation de température (figure 1.16). Dans le plan cristallin, il est défini par :

$$\frac{\Delta a}{a\Delta T} \text{ et } \frac{\Delta c}{c\Delta T} \qquad (I.34)$$

Avec Δa et Δc la variation des paramètres de maille suite à une variation de température dans un plan perpendiculairement d'un plan [Å] et ΔT la variation de température [K] [6].

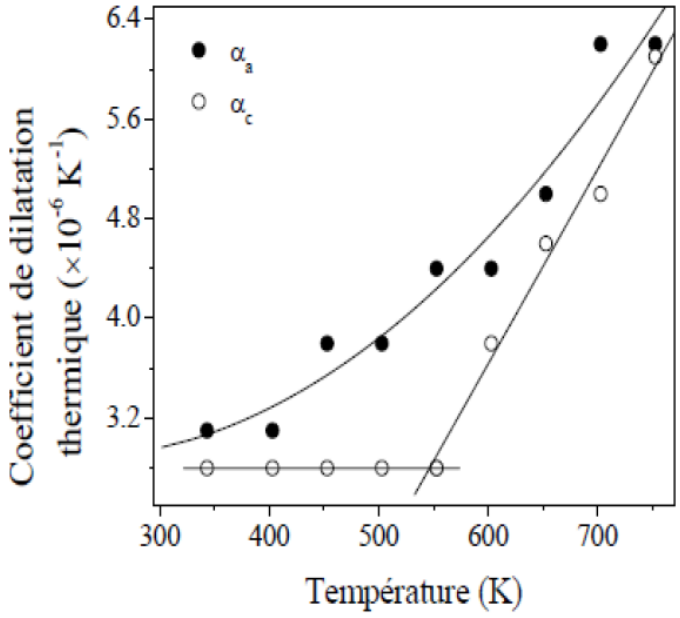


Figure I.16 : coefficient de dilatation thermique en fonction de la température [36].

I.8.3 Chaleur spécifique :

La chaleur apportée à un semi-conducteur a pour effet de mettre en vibration les atomes du réseau et d'augmenter le nombre de phonons. La chaleur spécifique est définie comme une valeur qui lie la variation de température d'un matériau à la chaleur qui lui est apportée

$$C_p = \frac{\partial E}{\partial T} \qquad (I.35)$$

Notons que cette grandeur peut être affectée par la concentration en porteurs libres et la présence de défauts ponctuels. La chaleur spécifique pour GaN a été calculée à pression constante en fonction de la température soit:

$Cp = 38{,}1 + 8{,}96 \times 10^{-3}T$ en $J.^{mol-1}.K^{-1}$ (I.36)

Les coefficients thermiques spécifiques aux matériaux d'alliages ternaires sont exprimés par une interpolation linéaire entre les valeurs des matières binaires [37].

$$c_p^{ABC} = (1-x)c_p^{AB} + xc_p^{AB} \quad \text{(I.37)}$$

Le résumé des propriétés thermiques du GaN et de l'InN est illustré dans le tableau I.8.

	InN	**GaN**
Coefficient d'expansion thermique αa ($10^{-6}K^{-1}$)	3.68	5.59
Coefficient d'expansion thermique αc ($10^{-6}K^{-1}$)	2.56	3.17
Conductivité thermique K [$W.cm^{-1}.C^{-1}$	0.45	1.3
Température de fusion	1373	2773

Tableau 1.8 : résumé des propriétés thermiques du GaN et de l'InN[38].

I.9 Applications InGaN :

Avant d'être envisagé pour les applications photovoltaïques, l'InGaN fut principalement étudié pour les LEDs et les diodes laser [39]. En effet, son grand gap direct et sa large couverture spectrale font de ce matériau un bon candidat pour des composants à haut rendements, qui peuvent résister à de hautes températures et à de fortes puissances[40]. Les nitrures ont été également étudiés pour des applications électroniques comme la fabrication du transistor à haute mobilité électronique (HEMT) avec l'hétérojonction GaN/Al(In)GaN qui présente une forte discontinuité de bande de conduction à l'interface et la présence d'un champ de polarisation créant un gaz d'électron à deux dimensions (2DEG) confiné à l'interface. L'InGaN peut être orienté pour les applications dans les télécommunications. Cette longueur d'onde importante dans ce domaine puisqu'elle est utilisée dans les fibres optiques pour les communications longues distance [41]. Ainsi avec un faible pourcentage de Gallium, une couche d'InGaN ou d'InN confinée dans un puits quantique pourrait être utilisée comme source pour ces communications[42]. Enfin, il a été montré que l'InN pouvait produire une forte émission dans la gamme de tétra hertz entre 0.01 et 3 mm, (soit entre 100GHz et 30GHz). L'InGaN est destiné pour les applications photovoltaïques.

I.10 Hétéro-épitaxie des nitrures d'éléments III :

Les nitrures d'élément III souffrent principalement du manque de substrats massifs ou en accord de maille pour la croissance épitaxiale. Les substrats couramment utilisés sont le saphir (Al_2O_3), le carbure de silicium (SiC) ou le silicium (Si), tous trois présentant des désaccords de paramètres de réseau importants avec le GaN, respectivement de 16%, 3.5% et 17% (Tableau I.9)[43]. Ce désaccord de paramètre de maille ainsi que les différences entre les coefficients de dilatation thermiques des matériaux, provoquent une très forte contrainte dans la couche mince. Il en résulte souvent une densité importante de défauts qui sont principalement des dislocations fortement préjudiciables aux propriétés électroniques et optiques des composants que l'on développe avec ces matériaux.

	Al_2O_3 (0001)	6H-SiC (0001)	Si (111)	GaN (0001)	AlN (0001)
Paramètre de maille a (300 K)	4,76	3,08	5,43	3,19	3,1
Déssacord paramètrique/GaN	-16%	-3,40%	17%	0%	-2,40%
Coeff. d'expansion thermique α_a ($\times 10^{-6}K^{-1}$)	5,8	4,46	2,6	5,6	2,9

Table I.9 – Caractéristiques physiques des substrats usuels utilisés pour la croissance du GaN[43].

I.10.1 Désaccord de maille et contrainte biaxiale :

Pour avoir des composants optoélectroniques efficaces en GaN ou en InGaN, il est nécessaire de maitriser, en premier, la croissance des matériaux. En général, dans le cas de deux matériaux de même paramètre de maille, il est possible de faire croitre un matériau sur un autre sans défauts ni contraintes. Par contre dans le cas où il y a un désaccord de maille, on peut assister à la création de défauts de structures dans le matériau qui pourrait aussi être contraint.

Lorsque l'on dépose une couche mince (α_F) sur un substrat (α_S), c'est ce dernier qui va imposer son paramètre de maille dans le plan. Le désaccord paramétrique entre la couche et le substrat s'exprime de la façon suivante :

$$\frac{\Delta a}{a} = \frac{a_F - a_S}{a_S} \tag{I.38}$$

On distingue deux cas comme illustrés sur la figure I.17en fonction de la valeur du paramètre de maille dans le plan du film (α_F) par rapport au paramètre de maille dans le plan du substrat (α_S).

Lors de l'épitaxie d'un alliage InGaN sur une couche de GaN, considéré comme substrat, avec une concentration différente d'indium, le paramètre de maille varie selon la composition d'indium ce qui va créer des contraintes.

Si $\alpha_F<\alpha_S$ le paramètre de maille dans le plan du film va subir une contrainte en tension pour s'adapter au paramètre de maille dans le plan du substrat : le film est dit en tension,

Si $\alpha_F>\alpha_S$ le paramètre de maille dans le plan du film va subir une contrainte en compression pour s'adapter au paramètre de maille dans le plan du substrat : le film est dit en compression. C'est le cas de l'alliage InGaN déposé sur pseudo-substrat de GaN.

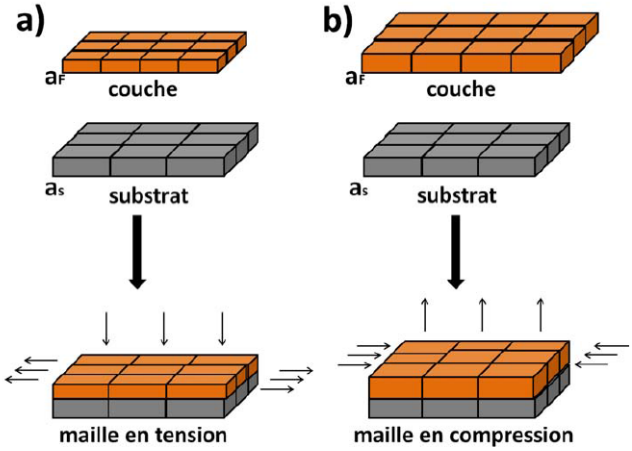


Figure I.17 – Contrainte liée au désaccord de maille : Cas (a), ($\alpha_F<\alpha_S$), la maille est en tension. Cas (b), ($\alpha_F>\alpha_S$), la maille est en compression[1].

Dans le cas du matériau InGaN élaboré sur GaN, la déformation engendrée par (Δ_a/a) est de 11% signifiant qu'une couche active d'$In_xGa_{1-x}N$ avec x = 0,2 possède un désaccord paramétrique considérable de 2,2%. Pour chaque incorporation supplémentaire de 10% d'indium dans l'InGaN élaboré sur GaN, le désaccord de maille augmente de 1,1% comme le montre la figure I.18.

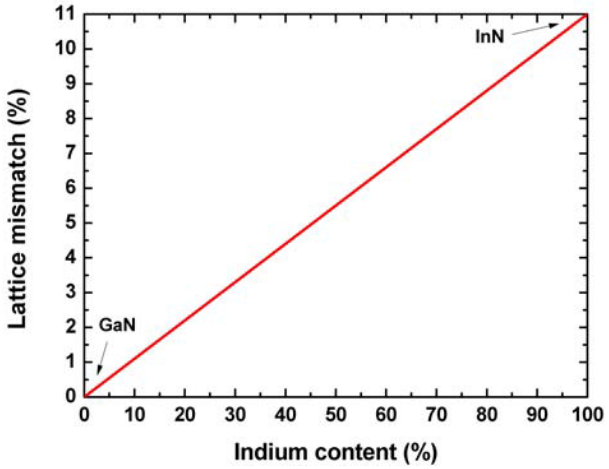


Figure I.18 Variation du désaccord de maille d'InGaN élaboré sur pseudo-substrat de GaN[1].

Le volume de la maille étant conservé, le paramètre c va varier proportionnellement à la variation de a. On parle de contrainte biaxiale qui peut être décrite par la loi de Hooke

généralisé. Cette loi permet de déterminer la variation entre les champs des contraintes (σ_{ij}) et les déformations relatives dans le cristal (ε_{kl}) qui sont reliées par le tenseur des constants élastiques C_{mn}.[1]

L'allongement relatif dans le matériau épitaxie (*e*) peut ainsi se définir comme la variation de ses paramètres de maille (a, c) par rapport à leur valeur totalement relaxée (a_0, c_0), avec :

$\epsilon_{zz} = \frac{c-c_0}{c_0}$, Allongement relatif suivant l'axe **c**

$\epsilon_{xx} = \frac{a-a_0}{a_0}$, Allongement relatif suivant l'axe **a**

La loi de Hooke généralisée a pour expression :

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{13} & c_{13} & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}(c_{11}-c_{12}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} \\ \epsilon_{yy} \\ \epsilon_{zz} \\ \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{xz} \\ \epsilon_{xy} \end{pmatrix} \quad \text{(I.39)}$$

La contrainte épitaxiale étant biaxiale, les seules composantes non nulles sont les contraintes contenues dans le plan d'épitaxie :

$$\sigma_{zz} = c_{13}\epsilon_{xx} + c_{13}\epsilon_{yy} + c_{33}\epsilon_{zz} = 0 \quad \text{(I.40)}$$

Ce qui donne l'expression suivante :

$$\epsilon_{zz} = \frac{-c_{13}.(\epsilon_{xx}+\epsilon_{zz})}{c_{33}} \quad \text{(I.41)}$$

Et, en considérant pour des raisons de symétrie que $\varepsilon_{xx}=\varepsilon_{yy}$, on obtient :

$$\epsilon_{zz} = -\frac{2c_{13}}{c_{33}}\epsilon_{xx} = -\frac{2v}{1-v}\epsilon_{xx} \quad \text{(I.42)}$$

Ces équations permettent d'établir la relation entre l'allongement relatifs selon l'axe **c** et l'allongement dans la direction de la surface. Le facteur $2c_{13}/c_{33}$s'appelle le coefficient de poisson biaxial et *n* est le coefficient de poisson qui est de 0,183 pour le GaN (croissance MOVPE et de densité de dislocations relativement faible) et de 0,272 pour l'InN[44].

Lorsque la couche mince est contrainte sur le substrat, on applique une correction à la loi de Vegard et la valeur de la composition peut être déduite à partir de l'équation suivante :

$$x = \frac{1-v}{1+v} \times \frac{c_{mes}^{InGaN} - c_{mes}^{GaN}}{c_0^{InN} - c_{mes}^{GaN}} \quad \text{(I.43)}$$

Avec C_{mes} correspondant aux valeurs du paramètre c pour l'InGaN et le GaN déduites des données expérimentales et $C^{InN}{}_0$ = 5,702nm (valeur pour l'InN massif).

I.10.2 Coefficient de dilatation thermique et contrainte thermique :

Le coefficient de dilatation thermique noté αdécrit la dilatation d'un réseau cristallin suite à une variation de température. Il dépend du matériau mais aussi de la stœchiométrie, des défauts étendus et de la concentration en charges libres dans le matériau. Le tableau I.10 synthétise les valeurs de *a* dans le plan et hors du plan pour le GaN et l'InN.

	GaN[5]	InN[5]
$\alpha_a(\times 10^{-6}K^{-1})$	5,59	2,85
$\alpha_c(\times 10^{-6}K^{-1})$	3,17	3,75 - 5,7 (260 - 800K)

Tableau I.10 Coefficients de dilatation thermique dans le plan (α_a) et hors du plan (α_c) du GaN et de l'InN[45].

Lors du refroidissement post-croissance où l'on passe d'une température supérieure ou égale à 1000°C à la température ambiante, la contrainte thermo-élastique emmagasinée par la couche est donnée par la formule :

$$\epsilon_{th} = \Delta T \times (\alpha_s - \alpha_F) \quad \text{(I.44)}$$

avec ΔT différence de température entre la température et la température ambiante (ΔT < 0).

α_s et α_F coefficients de dilatation thermique respectifs du substrat et du film.

ainsi :

pour $\alpha_F < \alpha_s$ et ΔT < 0 (refroidissement) la déformation dans la couche est négative et correspond à une contrainte thermique compressive. À l'inverse, le substrat est soumis à une contrainte en tension. Ce cas correspond au dépôt d'InGaN sur GaN.

Pour $\alpha_F > \alpha_s$ et ΔT < 0 la déformation dans la couche est positive et correspond à une contrainte thermique extensive alors que le substrat est soumis à une contrainte compressive.

I.10.3 Épaisseur critique de relaxation plastique (*h*c) :

Pour un désaccord de maille donné, l'énergie emmagasinée par la couche augmente avec l'épaisseur jusqu'à une épaisseur dite "épaisseur critique" de relaxation plastique à partir de laquelle des dislocations sont générées dans le film. En dessous de cette épaisseur critique, l'alliage épitaxie est déformé élastiquement pour adapter son paramètre de maille *a* à celui du substrat (Figure I.17). Au-delà de cette épaisseur, le matériau se relaxe en générant des

dislocations (zones de libération des contraintes) lui permettant de reprendre partiellement ou totalement ses paramètres de maille nominaux.

La figure I.19présente les modèles théoriques développés par People et Bean [46, 47], Fischer et al.[48] et Matthews et Blakeslee[49] ainsi que les modèles expérimentaux [50] de la variation de l'épaisseur critique de relaxation plastique (h_c) de l'InGaN sur pseudo substrat GaN en fonction du taux d'indium dans la couche.

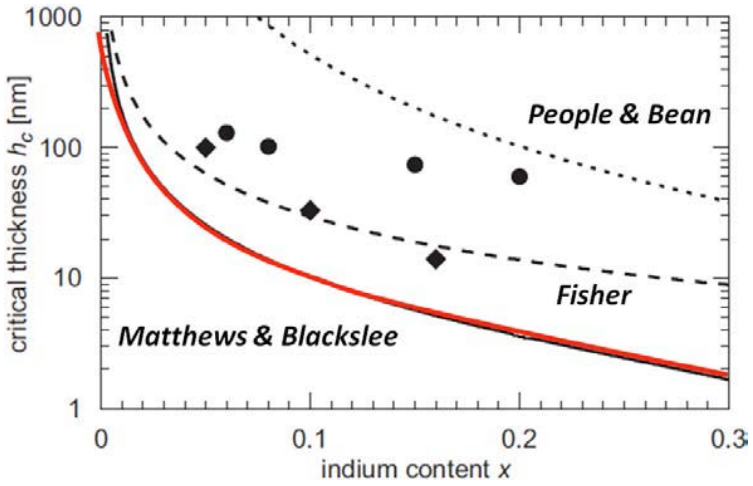


Figure I.19 : Épaisseur critique de relaxation plastique calculée à partir des modèles de People et Beam[46, 47], Fisher et al. [48] et Matthews et Blackslee[49] avec celles obtenues expérimentalement par Parker et al. (●) [51] et Srinivasan et al. (♦) [50]

Les équations permettant le tracé théorique de l'épaisseur critique de relaxation plastique (h_c) en fonction de la composition (x) : h_c = f (x) sont les suivantes :

Modèle de People et Bean [46]. $$h_c(x) = \left(\frac{1-\nu(x)}{1+\nu(x)}\right) \times \left(\frac{1}{16\pi\sqrt{2}}\right) \times \left(\frac{b^2}{a(x)}\right) \times \left[\left(\frac{1}{f^2(x)}\right) \times \ln\left(\frac{h_c(x)}{b}\right)\right] \quad (1.18) \qquad \text{(I.45)}$$

Modèle de Fischer et al.[48]. $$x = \left(\frac{b\cos\lambda}{0,0836h_c}\right) \times \left(1 + \frac{1-(\nu/4)}{4\pi\cos^2\lambda(1+\nu)}\right) \times \ln\left(\frac{h_c}{b}\right) \qquad \text{(I.46)}$$

Modèle de Matthews et Blakeslee[49]. $$h_c = \frac{b}{2\pi f} \times \frac{1-\nu\cos^2\alpha}{(1+\nu)\cos^2\lambda} \times \left(\ln\frac{h_c}{b} + 1\right) \qquad \text{(I.47)}$$

Avec ν (x) coefficient de Poisson de l'alliage en fonction de la composition x.

$a(x)$ paramètre de maille dans le plan en fonction de la composition.

b norme du vecteur de burger.

f(x) désaccord paramétrique ($\Delta a/a$).

x incorporation en gallium dans l'alliage $In_xGa_{1-x}N$,

a l'angle entre la ligne de dislocation et le vecteur de Burger.

I.10.4 Relaxation de la contrainte via un changement de mode de croissance : transition 2D/3D :

De nombreux auteurs et notamment le groupe de Pereira et al. [54] ont observé un changement de mode de croissance au-delà d'une certaine épaisseur comme le montre la figure I.20. La croissance peut être décrite de la façon suivante :

- Proche de l'interface : la couche est pseudo morphique ($\alpha_F = \alpha_S$) de croissance 2D (zone A) et la composition en indium est homogène.
- Au-delà d'une certaine épaisseur : le matériau InGaN est dit totalement relaxé. Dans cette région la croissance est de type 3D en surface (zone C) et l'incorporation en indium est supérieure à celle observée dans la sous-couche inférieure (zone A). Dans cette région le matériau InGaN peut être décrit comme un "empilement" de deux sous-couches.

Il existe une région intermédiaire où le matériau InGaN est partiellement relaxé, ce changement d'état de contrainte facilite l'incorporation des atomes d'indium dans l'alliage InGaN et on observe ainsi une région ou l'état de contrainte et la composition varient.

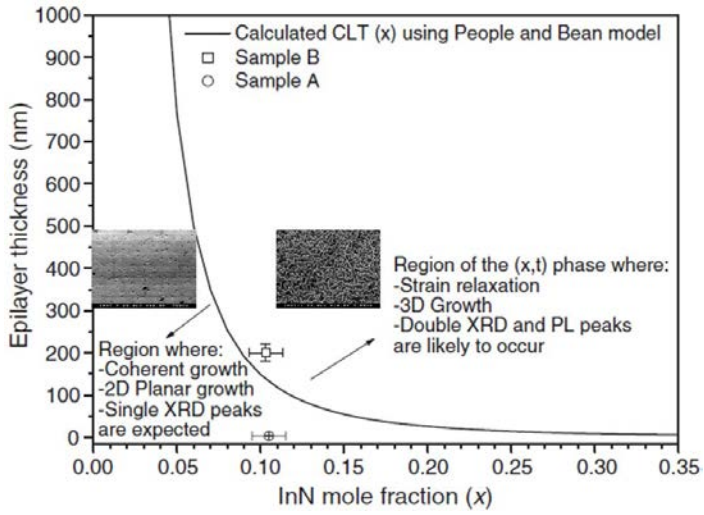


Figure I.20 : Synthèse de données expérimentales obtenues par Pereira et al. [54] dans le cas où l'on se trouve en dessous ou au-dessus du tracé de l'épaisseur critique CTL(x) donné par le modèle de People et Beam[46].

I.10.5 Défauts structuraux typiques des nitrures :

a/ Dislocations :

Les dislocations sont des défauts linéaires qui font partie des imperfections typiques de la structure cristalline. Ils sont générés pour relâcher la contrainte qui peut survenir lors de la croissance et toute autre déformation mécanique afin de diminuer l'énergie globale du système matériel. S'ils se forment lors d'une croissance épitaxiale, ils proviennent de la différence des

paramètres de réseau et des coefficients de dilatation thermique du substrat et de la couche. Ces défauts linéaires sont caractérisés par leur vecteur de Burgers *b* et leur ligne de dislocation *u*. En fonction de leur densité à l'intérieur des couches utilisées pour la fabrication des composants électroniques, ils affectent fortement les performances du dispositif [52, 53].

Dans l'épitaxie au nitrure du groupe III, les dislocations les plus courantes sont les dislocations vis (TDs)[54] qui sont générées à l'interface avec le substrat et se propagent jusqu'à la surface de la couche, à travers la partie active du composant. Une luxation peut être parfaite ou partielle. Une dislocation est dite parfaite, lorsque son vecteur de Burgers correspond à une translation entière du réseau; il est partiel lorsque le vecteur Burgers est une fraction d'une traduction du réseau. Dans les couches de nitrure développées le long de *c*, les principaux défauts sont les TDs (représentés dans le tableau I.11), qui se présentent sous la forme de bord, de vis ou de type mixte et se distinguent par l'angle fait entre le vecteur de Burgers et la ligne de dislocation.

(1) Pour une dislocation de bord pure, la ligne de dislocation est perpendiculaire au vecteur *b* de Burgers. Un diagramme schématique des plans atomiques peut être utilisé pour illustrer des défauts de réseau tels que des dislocations. Le concept de "demi-plan supplémentaire" d'une dislocation de type bord est illustré à la figure I.21.

(2) Pour une dislocation de vis, la ligne de dislocation est parallèle au vecteur Burgers comme illustré à la figure I.21.

(3) Pour une dislocation de type mixte, il n'y a pas de relation angulaire définie entre la ligne de dislocation et le vecteur de Burgers.

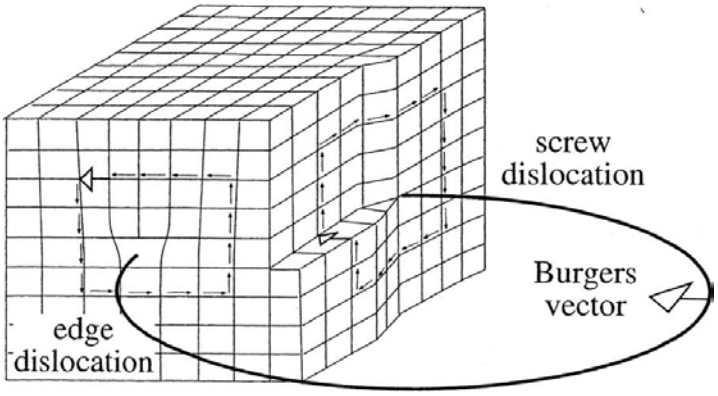


Figure I.21 : A schematic diagram showing, screw and edge dislocation [55].

Burgers vector (*b*)	Type of dislocation	Character
1/3<11-20>	Edge type (***a***)	Perfect
<0001>	Screw type (***c***)	Perfect
1/3<11-23>	Mixed type (***a+c***)	Perfect
1/3<1-100>	Shockley	Partial
1/6<20-23>	Frank-Shockley	Partial
1/2<0001>	Frank	Partial

Tableau I.11 : Dislocations parfaites et partielles dans des couches épitaxiales du groupe III nitrure croitre le long de la direction [0001] [53, 56].

***b*/Mosaïcité :**

La croissance hétéro-épitaxiale des films de nitrures d'élément III peut être modélisée comme un ensemble de microstructures colonnaires désorientées les unes par rapport aux autres (figures 1.23 et 1.22) et définies principalement par quatre paramètres qui sont :

- l'inclinaison par rapport à l'axe c (tilt),
- la rotation autour de l'axe c (twist),
- la longueur de cohérence verticale,
- la longueur de cohérence latérale.

La diffraction des rayons *X* permet d'accéder aux valeurs de l'inclinaison (tilt) et de la rotation (twist) des microstructures colonnaires. Il est ainsi possible d'obtenir une indication sur le nombre et le type de dislocations de type mixtes (dues au tilt) ou coin (due au twist) comme on peut le voir en annexe E.

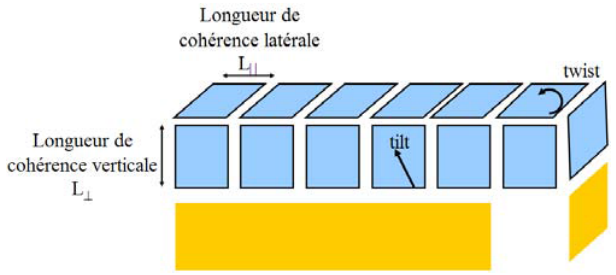


Figure 1.22 – Représentation des microstructures Colonnaires

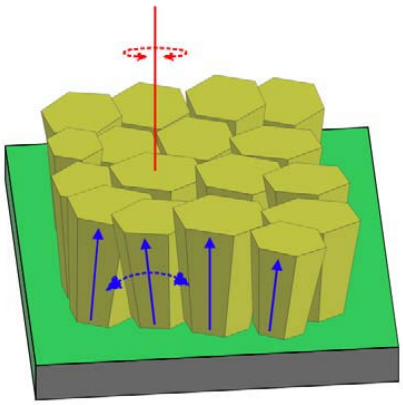


Figure 1.23 – Représentation de la mosaïcité d'une couche de nitrure couche de nitrure (adapté de [57].

I.11 Le dopage résiduel dans les nitrures :

Les nombreux travaux de caractérisation électrique par effet Hall ont montré un dopage de type N résiduel (non-intentionnel) dans les nitrures avec une concentration d'électrons qui dépend des conditions d'élaboration des couches[58, 59]. Ce dopage résiduel a été attribué aux défauts telles que les lacunes d'azote[29, 31, 60] ou encore à des impuretés incorporées durant l'élaboration, telles que l'oxygène ou le silicium[61]. La nature exacte de ce dopage résiduel reste encore à déterminer et sa dépendance avec les conditions d'élaboration rend son étude difficile. L'impact de ce dopage non-intentionnel est bien entendu très important pour le composant et la cellule solaire notamment, en particulier lorsqu'il s'agit d'élaborer des couches de nitrures dopées P ou des couches intrinsèques.

I.12 Le dopage :

Les cellules solaires comme quasiment tous les composants électroniques ont comme élément de base une jonction entre une couche de semi-conducteur de type P et une couche de semi-conducteur de type N (jonction PN). Il est donc important d'avoir de bons dopages (type N et P) afin d'obtenir des dispositifs efficaces. Nous avons vu précédemment que les nitrures sont intrinsèquement de type N. Ceci fait que le dopage de type N est relativement facile à obtenir et que le dopage de type P est plus compliqué à atteindre.

Le dopage de type N dans les nitrures est couramment réalisé avec le silicium. La solubilité du silicium dans le GaN par exemple, est de l'ordre de $10^{20}cm^{-3}$, il est donc adapté au dopage des nitrures, et le dopage N du GaN est actuellement bien maîtrisé. L'énergie d'activation du silicium n'est pas déterminée précisément, elle est généralement donnée entre 10 et 30meV.

Le dopage de type P reste toujours un défi majeur pour le développement des nitrures. En effet, du fait du caractère intrinsèque de type N des nitrures (InN, Gan et InGaN), il faut dans un premier temps compenser les électrons en excès présents dans le matériau, avant d'arriver à créer un excès de trous[62]. Le dopage P est généralement obtenu en incorporant du magnésium(Mg) comme accepteur avec un procédé complexe d'activation à haute température. Les résultats expérimentaux donnent une valeur limite à l'incorporation du M*g* de quelques $10^{19}cm^{-3}$ dans le GaN hexagonal avec une concentration de trous plus faible du fait de la forte énergie d'activation des impuretés Mg. Au-delà, la morphologie est dégradée[63].

I.13 l'effet de la réalisation du Contact ohmique sur la couche p-InGaN :

L'une des principales implications des faibles concentrations d'accepteurs dans les nitrures III est le défi d'obtenir des contacts de haute qualité optoélectronique avec un matériau de type p.

En plus de la résistivité de contact élevée due aux faibles concentrations d'accepteurs, il n'y a pas de métal facilement disponible qui puisse former un contact ohmique avec l'InGaN de type p en raison de son travail de sortie élevé. La figure II.24 donne une idée du travail d'extraction des métaux couramment utilisés pour obtenir des contacts ohmiques par rapport aux bords des bandes de conduction et de valence de InGaN (0< [In]<0,5) et du niveau de vide.

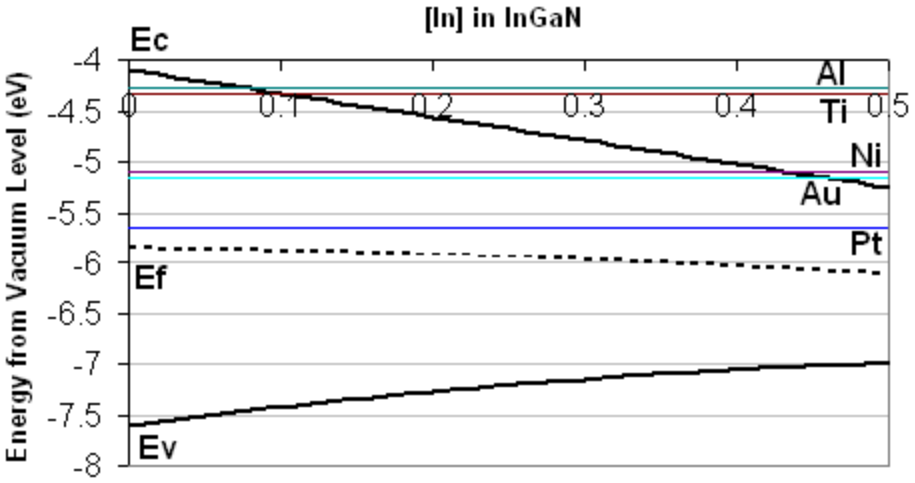


Figure II.24 : Travail de sortie des métaux communs utilisés pour obtenir des contacts ohmiques par rapport aux énergies de bande de conduction et de valence de $In_xGa_{1-x}N$ pour $0<x<0,5$.

Cependant, de tels contacts ne parviennent pas à surmonter la barrière Schottky à l'interface de type p III-nitrure ou à fournir de faibles résistances ohmiques, et ne sont donc pas préférés pour des applications pratiques. Il y a également eu plusieurs tentatives pour réduire la résistance de contact par traitement de surface[64, 65]et recuit.

Les jonctions métallurgiques NiO_x récemment développées ont atteint des résistances de contact spécifiques aussi faibles que 10^{-6} Ωcm^2[66, 67]. La figure II.25 illustre les diagrammes de bande de tels contacts qui justifient le mécanisme du contact. On voit sur la figure 2.7(b) qu'un puits de potentiel pour les trous et un potentiel intégré sont formés à la surface p-GaN/NiO_x. Pour les couches NiO_x très minces, ces contacts utilisent un effet tunnel d'électrons à travers la barrière d'interface Au/NiO_x où ils sont injectés dans l'encoche pour se recombiner avec des trous à la surface p-GaN, comme le montre la figure II.25(c).

Cependant, de tels contacts NiO_x ont tendance à couvrir toute la surface supérieure du dispositif qui absorbe la lumière et, par conséquent, à diminuer l'efficacité de la cellule

solaire. D'autres oxydes conducteurs transparents tels que l'oxyde d'indium-étain (ITO) donnent une meilleure transparence [68], mais forment un contact Schottky avec l'InGaN de type p [69].

Des méthodes alternatives impliquant l'ingénierie des bandes interdites ont également été étudiées ; une structure de super réseau à courte période (SPS) peut être développée qui combine la couche de type p avec le matériau du puits en utilisant InN [70], InGaN[71]ou AlGaN[72]pour former un contact ohmique. Ce type de structure est avantageux pour les cellules solaires car il améliore également le transport latéral des porteurs, améliorant ainsi la probabilité de collecte.

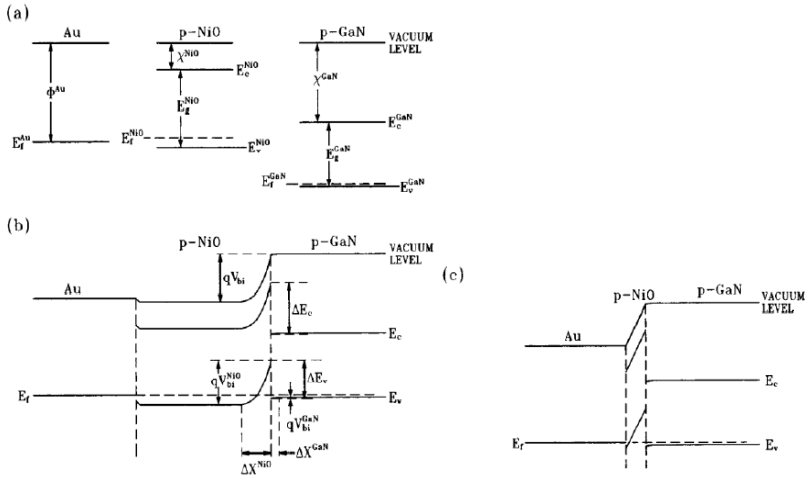


Figure II.25 : Diagramme de bande d'énergie d'équilibre de (a) Au, p-NiO et p-GaN en vrac, (b) Hétéro-structure Au/p-NiO épais/p-GaN, et (c) Au/p-NiO/p mince –Hétéro-structure GaN.[73]

I.14 ségrégation d'Indium :

Les défis de désaccord de maille et des dislocations du réseau pour l'alliage InGaN. Un autre problème difficile pour la croissance d'InGaN est l'instabilité de la composition.[74] On dit que la différence d'espacement interatomique conduit à un écart de miscibilité en phase solide comme le montre la figure I.26.[74] Une étude systématique de l'évolution de la microstructure des alliages $In_xGa_{1-x}N$ cultivés par épitaxie organométallique en phase vapeur (MOVPE), dans la plage de température de 700 à 900°C, a montré une variété de microstructures. [75] Pour $x< 0,08$, la teneur en indium est uniforme et non perturbée par les dislocations de filetage. Des phases secondaires de nucléation au niveau des dislocations de filetage sont observées pour $In_xGa_{1-x}N$ avec $0,08 < x < 0,20$. Des limitations sévères dans la

réaction de synthèse empêchent une croissance épitaxiale appropriée et entraînent des couches non homogènes avec une séparation de phase possible dans $In_xGa_{1-x}N$ avec $x \geq 0,20$.

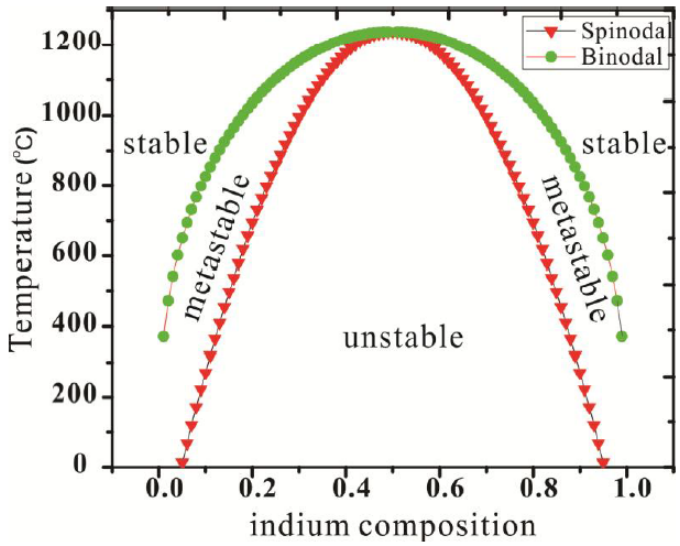


Figure. I.26. Diagramme de phase calculé pour les alliages binaires de GaN et d'InN, montrant les courbes binodales (cercles pleins verts), spinodales (triangles pleins) et la température critique (~ 1250 ° C). [34] Les regions stables, metastable et instable sont indiquées.[74]

En raison de ces difficultés, la MBE pourrait être une méthode de croissance appropriée pour la croissance d'InGaN à haute teneur en indium en raison des avantages. Récemment, deux techniques de croissance MBE modifiées connues sous le nom d'épitaxie à modulation de métal (MME) [76] et de lithographie et d'épitaxie par faisceau d'atomes d'azote énergétique (ENABLE) [59] ont été utilisées pour faire croître des films InGaN de haute qualité sans séparation de phase à très basse température < 500°C.

I.14.1La technique de croissance d'épitaxie à modulation de métal (MME) utilise dans la fabrication des films d'InGaN a haute composition (x = 0.22 - 0.67) :

Nous abordent l'évolution de la microstructure des films $In_xGa_{1-x}N$ a haute composition d'indium x supérieure à 22%. Les films sont développées par épitaxie à modulation de métal à basse température (~ 400 ° C) pour faciliter l'incorporation d'indium, et avec une modulation de précurseur pour améliorer la morphologie de surface et la diffusion d'une couche métallique. Les alliages InGaN avec une teneur élevée en indium, de faibles densités de dislocation et une composition spatialement uniforme sont souhaitables pour des applications telles que les dispositifs électroluminescents fonctionnant dans le régime de longueur d'onde verte et plus longue, et pour les cellules solaires photovoltaïques à haut rendement.

Cependant, il est difficile de faire croitre des films InGaN de haute qualité avec une composition élevée en indium

Moseley et coll. ont récemment réalisé des films $In_xGa_{1-x}N$ monophasés de haute qualité pour une large gamme de compositions d'indium élaborées en utilisant une approche couche par couche à basses températures par la technique d'épitaxie à modulation de métal (MME).[77] Fischer et coll. ont démontré que les épilayeurs à haute teneur en indium (x = 67%) présentent une relaxation de contrainte inadaptée à l'interface InGaN / GaN, et une amélioration significative des propriétés structurelles et optiques. [78]

Il est rapporté dans le travail Fischer et Wei[78] que l'évolution de la microstructure des épilayeurs$In_xGa_{1-x}N$ élaborées par la technique de croissance MME, pour des valeurs x de 22%, 46%, 60% et 67%. Les épilayeurs $In_xGa_{1-x}N$ présentent une densité élevée de défauts pour x = 22% et 46%. Une amélioration surprenante de la microstructure est observée pour x ~ 60% et plus. Une luminescence élevée, une composition uniforme d'indium et une relaxation presque complète de la déformation inadaptée sont observées dans les films $In_xGa_{1-x}N$ avec x = 67%.

I.14.2 La technique de croissance Epitaxie Modulée en Métal MME (Metal-Modulated Epitaxy) :

Les films $In_xGa_{1-x}N$ avec une composition en indium dans la gamme [20%, 70%] ils sont élaborés Il est élaboré par la technique MME,[79] sur des épilayeurs GaN sur des substrats c-saphir, à des températures allant de 400 à 450 ° C dans un système Riber 32 MBE , avec des flux riches en métal, et une pression équivalente de faisceau pondérée en nombre Z du groupe III (flux Ga / 31 + flux entrant / 49) entre 0,24 et 0,30 10-7 Torr. En raison de la faible température du substrat et de la réduction résultante de la désorption, la composition finale d'Indium est simplement le rapport du flux *In* normalisé en nombre Z aux flux métalliques totaux. Pendant la croissance, les temps d'ouverture et de fermeture des volets en indium et en gallium sont soigneusement surveillés, tout en maintenant le volet à azote ouvert en permanence.

La composition de l'indium dans les alliages InGaN est modifiée en faisant varier le rapport *In* / *Ga*. Pour empêcher la décomposition thermique pendant le refroidissement, une couche de GaN de 10 nm d'épaisseur est utilisée pour revêtir les films $In_xGa_{1-x}N$. Plus de détails sur les conditions de croissance peuvent être trouvés ailleurs.[76]

I.15 Conclusion :

Dans ce chapitre, nous avons débuté par un rappel sur l'état de l'art des matériaux III-V de manière générale, ainsi les propriétés des composés III-N et les notions de la piézoélectricité en signifiant son origine. Nous avons également exploré les avantages des matériaux III-N par rapport aux III-V conventionnels, comme la large gamme de l'énergie de gap direct (0,72 à 6 *eV)*, ainsi que le coefficient d'absorption élevé. Néanmoins, ces matériaux ont montré des faibles performances dans l'état de l'art. Ceci est principalement dû à : l'effet de la polarisation de ces matériaux, la croissance d'une couche d'InGaN relativement épaisse et de bonne qualité, et le dopage de type p de ces alliages. D'ailleurs, pour résoudre ces problématiques surtout la croissance et le dopage de type p. La croissance avec MME, la structure semibulk ou nano-pyramides, et la couche cap d'InGaN contrainte pour le contact p-GaN.

Références :

[1] El Gmili Y. Étude et caractérisations par cathodoluminescence de couches minces d'InGaN pour le photovoltaïque: Université de Lorraine; 2013.

[2] Nakamura S, Pearton S, Fasol G. The blue laser diode: the complete story: Springer Science & Business Media; 2000.

[3] Orton J, Foxon C. Group III nitride semiconductors for short wavelength light-emitting devices. Reports on progress in physics. 1998;61:1.

[4] Munoz E, Monroy E, Pau J, Calle F, Omnes F, Gibart P. III nitrides and UV detection. Journal of Physics: Condensed Matter. 2001;13:7115.

[5] Mishra UK, Wu Y-F, Keller BP, Keller S, Denbaars SP. GaN microwave electronics. IEEE transactions on microwave theory and techniques. 1998;46:756-61.

[6] Marouf Y. Modélisation des cellules solaires en InGaN en utilisant Atlas Silvaco. 2013.

[7] Wu J, Walukiewicz W, Yu KM, Ager III J, Haller E, Lu H, et al. Small band gap bowing in In 1− x Ga x N alloys. Applied Physics Letters. 2002;80:4741-3.

[8] Wu J, Walukiewicz W, Yu K, Shan W, Ager Iii J, Haller E, et al. Superior radiation resistance of In 1− x Ga x N alloys: Full-solar-spectrum photovoltaic material system. Journal of Applied Physics. 2003;94:6477-82.

[9] Jani O, Ferguson I, Honsberg C, Kurtz S. Design and characterization of Ga N⁄ In Ga N solar cells. Applied Physics Letters. 2007;91:132117.

[10] Fabien CA, Moseley M, Gunning B, Doolittle WA, Fischer AM, Wei YO, et al. Simulations, practical limitations, and novel growth technology for InGaN-based solar cells. IEEE Journal of photovoltaics. 2013;4:601-6.

[11] Amano H, Sawaki N, Akasaki I, Toyoda Y. Metalorganic vapor phase epitaxial growth of a high quality GaN film using an AlN buffer layer. Applied Physics Letters. 1986;48:353-5.

[12] Ambacher O, Brandt M, Dimitrov R, Metzger T, Stutzmann M, Fischer R, et al. Thermal stability and desorption of Group III nitrides prepared by metal organic chemical vapor deposition. Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures Processing, Measurement, and Phenomena. 1996;14:3532-42.

[13] Wei Y. Structural Properties of III-Nitride Semiconductors: Arizona State University; 2014.

[14] Bernardini F, Fiorentini V, Vanderbilt D. Spontaneous polarization and piezoelectric constants of III-V nitrides. Physical Review B. 1997;56:R10024.

[15] Liu L, Edgar JH. Substrates for gallium nitride epitaxy. Materials Science and Engineering: R: Reports. 2002;37:61-127.

[16] Jordan MB. Growth optimization and process development of indium gallium nitride/gallium nitride solar cells: Georgia Institute of Technology; 2017.

[17] King-Smith R, Vanderbilt D. Theory of polarization of crystalline solids. Physical Review B. 1993;47:1651.

[18] Bernardini F, Fiorentini V. Nonlinear macroscopic polarization in III-V nitride alloys. Physical Review B. 2001;64:085207.

[19] Piprek J. Nitride semiconductor devices: principles and simulation: Wiley Online Library; 2007.

[20] Vurgaftman I, Meyer Jn. Band parameters for nitrogen-containing semiconductors. Journal of Applied Physics. 2003;94:3675-96.

[21] Bernardini F, Fiorentini V. Nonlinear behavior of spontaneous and piezoelectric polarization in III–V nitride alloys. physica status solidi (a). 2002;190:65-73.

[22] Fiorentini V, Bernardini F, Ambacher O. Evidence for nonlinear macroscopic polarization in III–V nitride alloy heterostructures. Applied Physics Letters. 2002;80:1204-6.

[23] Lestrade M, Li Z, Xiao Y, Li ZS. Modeling of polarization effects in InGaN PIN solar cells. Optical and quantum electronics. 2011;42:699-703.

[24] Li Z, Lestradet M, Xiao Y, Li S. Effects of polarization charge on the photovoltaic properties of InGaN solar cells. physica status solidi (a). 2011;208:928-31.

[25] Monemar B. Fundamental energy gap of GaN from photoluminescence excitation spectra. Physical Review B. 1974;10:676.

[26] Morkoç H. Handbook of nitride semiconductors and devices, Materials Properties, Physics and Growth: John Wiley & Sons; 2009.

[27] Vurgaftman I, Meyer Já, Ram-Mohan Lá. Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys. Journal of Applied Physics. 2001;89:5815-75.

[28] Palacios T, Chakraborty A, Heikman S, Keller S, DenBaars S, Mishra U. AlGaN/GaN high electron mobility transistors with InGaN back-barriers. IEEE Electron Device Letters. 2005;27:13-5.

[29] Wu J. When group-III nitrides go infrared: New properties and perspectives. Journal of Applied Physics. 2009;106:5.

[30] Donmez O, Gunes M, Erol A, Arikan M, Balkan N. High carrier concentration induced effects on the bowing parameter and the temperature dependence of the band gap of GaxIn1− xN. Journal of Applied Physics. 2011;110:103506.

[31] Yıldız A, Kemal ÖM, Bosi M, Özçelik S, Kasap M. Structural, electrical and optical characterization of InGaN layers grown by MOVPE. Chinese Physics B. 2009;18:4007.

[32] Schaff WJ, Chen X, Hao D, Matthews K, Richards T, Eastman LF, et al. Electrical properties of InGaN grown by molecular beam epitaxy. physica status solidi (b). 2008;245:868-72.

[33] Anani M, Abid H, Chama Z, Mathieu C, Sayede A, Khelifa B. InxGa1− xN refractive index calculations. Microelectronics Journal. 2007;38:262-6.

[34] El-Huni W. Modélisation de cellules solaires multi-tandem bas coût et très haut rendement à base de nitrures des éléments III-V: Université Paris-Saclay; 2016.

[35] Gorge V. Caractérisations de matériaux et tests de composants des cellules solaires à base des nitrures des éléments III-V: Paris 11; 2012.

[36] Morkoç H. Handbook of Nitride Semiconductors and Devices, GaN-based Optical and Electronic Devices: Wiley-vch; 2008.

[37] Palankovski V, Schultheis R, Selberherr S. Simulation of power heterojunction bipolar transistors on gallium arsenide. IEEE Transactions on electron devices. 2001;48:1264-9.

[38] Petit M. Etude par spectroscopies électroniques de la nitruration du phosphure d'indium: Université Blaise Pascal-Clermont-Ferrand II; 2004.

[39] Zhang Z-H, Tiam Tan S, Kyaw Z, Liu W, Ji Y, Ju Z, et al. p-doping-free InGaN/GaN light-emitting diode driven by three-dimensional hole gas. Applied Physics Letters. 2013;103:263501.

[40] Zhang Y, Liu Y, Wang ZL. Fundamental theory of piezotronics. Advanced Materials. 2011;23:3004-13.

[41] Mokkapati S, Jagadish C. III-V compound SC for optoelectronic devices. Materials Today. 2009;12:22-32.

[42] Wu G, Kao Y. Defect structures in InGaN/GaN multiple quantum wells on Si (111) substrates. Journal of achievements in materials and manufacturing engineering. 2006;18.

[43] Feltin E. Hétéro-épitaxie de Nitrure de Gallium sur substrat de silicium (111) et applications: Nice; 2003.

[44] Moram M, Vickers M. X-ray diffraction of III-nitrides. Reports on progress in physics. 2009;72:036502.

[45] Boćkowski M. High pressure direct synthesis of III–V nitrides. Physica B: Condensed Matter. 1999;265:1-5.

[46] People R, Bean J. Calculation of critical layer thickness versus lattice mismatch for Ge x Si1− x/Si strained-layer heterostructures. Applied Physics Letters. 1985;47:322-4.

[47] People R, Bean J. Erratum: Calculation of critical layer thickness versus lattice mismatch for Ge x Si1− x/Si strained-layer heterostructures [Appl. Phys. Lett. 4 7, 322 (1985)]. Applied Physics Letters. 1986;49:229-.

[48] Fischer A, Kühne H, Richter H. New approach in equilibrium theory for strained layer relaxation. Physical review letters. 1994;73:2712.

[49] Matthews J, Blakeslee A. Defects in epitaxial multilayers: I. Misfit dislocations. Journal of crystal growth. 1974;27:118-25.

[50] Srinivasan S, Bertram F, Bell A, Ponce F, Tanaka S, Omiya H, et al. Low Stokes shift in thick and homogeneous InGaN epilayers. Applied Physics Letters. 2002;80:550-2.
[51] Parker C, Roberts J, Bedair S, Reed M, Liu S, El-Masry N. Determination of the critical layer thickness in the InGaN/GaN heterostructures. Applied Physics Letters. 1999;75:2776-8.
[52] Sugahara T, Sato H, Hao M, Naoi Y, Kurai S, Tottori S, et al. Direct evidence that dislocations are non-radiative recombination centers in GaN. Japanese journal of applied physics. 1998;37:L398.
[53] Cherns D, Henley S, Ponce F. Edge and screw dislocations as nonradiative centers in InGaN/GaN quantum well luminescence. Applied Physics Letters. 2001;78:2691-3.
[54] Ponce F, Cherns D, Young W, Steeds J. Characterization of dislocations in GaN by transmission electron diffraction and microscopy techniques. Applied Physics Letters. 1996;69:770-2.
[55] Li Q. Strain relaxation in InGaN/GaN herostructures: Normandie; 2018.
[56] Wu X, Brown L, Kapolnek D, Keller S, Keller B, DenBaars S, et al. Defect structure of metal-organic chemical vapor deposition-grown epitaxial (0001) GaN/Al2O3. Journal of Applied Physics. 1996;80:3228-37.
[57] Doppalapudi D, Basu S, Ludwig Jr K, Moustakas T. Phase separation and ordering in InGaN alloys grown by molecular beam epitaxy. Journal of Applied Physics. 1998;84:1389-95.
[58] Pantha B, Wang H, Khan N, Lin J, Jiang H. Origin of background electron concentration in In x Ga 1− x N alloys. Physical Review B. 2011;84:075327.
[59] Hoffbauer MA, Williamson TL, Williams JJ, Fordham JL, Yu KM, Walukiewicz W, et al. In-rich InGaN thin films: Progress on growth, compositional uniformity, and doping for device applications. Journal of Vacuum Science & Technology B, Nanotechnology and Microelectronics: Materials, Processing, Measurement, and Phenomena. 2013;31:03C114.
[60] Perlin P, Suski T, Teisseyre H, Leszczynski M, Grzegory I, Jun J, et al. Towards the identification of the dominant donor in GaN. Physical review letters. 1995;75:296.
[61] Stampfl C, Van de Walle C, Vogel D, Krüger P, Pollmann J. Native defects and impurities in InN: First-principles studies using the local-density approximation and self-interaction and relaxation-corrected pseudopotentials. Physical Review B. 2000;61:R7846.
[62] Hautakangas S, Oila J, Alatalo M, Saarinen K, Liszkay L, Seghier D, et al. Vacancy defects as compensating centers in Mg-doped GaN. Physical review letters. 2003;90:137402.
[63] Philippe A. Caractérisation électrique et optique du nitrure de gallium hexagonal et cubique en vue de l'obtention d'émetteurs bleus: Lyon, INSA; 1999.
[64] Kim JK, Lee J-L, Lee JW, Eoi Shin H, Jo Park Y, Kim T. Low resistance Pd/Au ohmic contacts to p-type GaN using surface treatment. Applied Physics Letters. 1998;73:2953-5.
[65] !!! INVALID CITATION !!!

[66] Ho J-K, Jong C-S, Chiu CC, Huang C-N, Shih K-K, Chen L-C, et al. Low-resistance ohmic contacts to p-type GaN achieved by the oxidation of Ni/Au films. Journal of Applied Physics. 1999;86:4491-7.
[67] Jang HW, Kim SY, Lee J-L. Mechanism for ohmic contact formation of oxidized Ni/Au on p-type GaN. Journal of Applied Physics. 2003;94:1748-52.
[68] Margalith T, Buchinsky O, Cohen D, Abare A, Hansen M, DenBaars S, et al. Indium tin oxide contacts to gallium nitride optoelectronic devices. Applied Physics Letters. 1999;74:3930-2.
[69] Lin Y-C, Chang S-J, Su Y-K, Tsai T-Y, Chang C, Shei S-C, et al. InGaN/GaN light emitting diodes with Ni/Au, Ni/ITO and ITO p-type contacts. Solid-state electronics. 2003;47:849-53.
[70] Lin M, Huang F, Morkoc H. Nonalloyed ohmic contacts on GaN using InN/GaN short-period superlattices. Applied Physics Letters. 1994;64:2557-9.
[71] Jani O, Jampana B, Mehta M, Yu H, Ferguson I, Opila R, et al. Optimization of GaN window layer for InGaN solar cells using polarization effect. 2008 33rd IEEE Photovoltaic Specialists Conference: IEEE; 2008. p. 1-4.
[72] Li Y-L, Schubert E, Graff J, Osinsky A, Schaff W. Low-resistance ohmic contacts to p-type GaN. Applied Physics Letters. 2000;76:2728-30.
[73] Jani OK. Development of wide-band gap InGaN solar cells for high-efficiency photovoltaics: Georgia Institute of Technology; 2008.
[74] Ho Ih, Stringfellow G. Solid phase immiscibility in GaInN. Applied Physics Letters. 1996;69:2701-3.
[75] Ponce F, Srinivasan S, Bell A, Geng L, Liu R, Stevens M, et al. Microstructure and electronic properties of InGaN alloys. physica status solidi (b). 2003;240:273-84.
[76] Moseley M, Gunning B, Greenlee J, Lowder J, Namkoong G, Alan Doolittle W. Observation and control of the surface kinetics of InGaN for the elimination of phase separation. Journal of Applied Physics. 2012;112:014909.
[77] Moseley M, Lowder J, Billingsley D, Doolittle WA. Control of surface adatom kinetics for the growth of high-indium content InGaN throughout the miscibility gap. Applied Physics Letters. 2010;97:191902.
[78] Fischer A, Wei Y, Ponce F, Moseley M, Gunning B, Doolittle W. Highly luminescent, high-indium-content InGaN film with uniform composition and full misfit-strain relaxation. Applied Physics Letters. 2013;103:131101.
[79] Burnham SD, Namkoong G, Lee K-K, Doolittle WA. Reproducible reflection high energy electron diffraction signatures for improvement of AlN using in situ growth regime characterization. Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures Processing, Measurement, and Phenomena. 2007;25:1009-13.

Chapitre II

Concepts généraux des cellules solaires

Introduction :

L'épuisement des ressources naturelles et les impératifs de protection de l'environnement ont amorcé un processus dynamique de transition énergétique dans le monde. Il consiste à passer du système énergétique actuel, dépendant fortement des énergies fossiles à un système reposant principalement sur des sources renouvelables. On distingue parmi ces dernières l'énergie solaire photovoltaïque qui connait un fort développement ces dernières années. La filière photovoltaïque offre une solution très pratique pour l'obtention de l'électricité partout, aussi bien dans de grands parcs solaires que sur des petites installations autonomes isolées. Elle s'est d'abord principalement développée grâce à l'industrie spatiale avant d'être largement démocratisée pour s'installer sur nos toits et devenir l'une des énergies alternatives de demain.

Le présent chapitre est une introduction qui permet dans un premier temps de présenter le cadre physique de ce travail de thèse dédié à l'interaction entre le rayonnement lumineux et un matériau semi-conducteur. Nous n'allons pas entrer dans les détails de la physique des semi-conducteurs car de nombreux auteurs illustres l'ont déjà entrepris avec succès Nous allons juste dans la première partie et de façon succincte et brève, décrire l'effet photovoltaïque et les paramètres d'une cellule solaire. La seconde partie dresse un état des lieux et les perspectives de la filière photovoltaïque. Enfin, en dernière partie, nous décrirons le matériau au centre de cette thèse, le Nitrure de Gallium et d'Indium (InGaN) et analyserons l'état de l'art des cellules solaires à base de ce matériau.

II.1 Historique :

L'effet photovoltaïque a été découvert en 1839 par Edmond Becquerel [1]. Il mit en évidence pour la première fois la propriété qu'ont certains matériaux de convertir directement la lumière en courant électrique. Pratiquement un siècle plus tard, les bases théoriques du photovoltaïque furent posés par Albert Einstein en 1912. Il postula que la lumière était à l'origine de collision entre les photons et les atomes, provoquant ainsi l'expulsion des électrons de leur orbite et créant ainsi un courant électrique. Ce n'est qu'en 1954 que la première cellule photovoltaïque en semi-conducteur a été mise au point par des chercheurs du laboratoire Bell permettant d'obtenir un rendement de 4.5%.

II.2 Masse d'air:

La masse d'air est noté AM qui est la perte de l'énergie solaire par l'absorption atmosphérique. Elle est donnée en fonction de l'angle entre le soleil et le zénith par la formule suivante :

$AM = 1 / \sin \theta$ (II.1)

θ : représente l'angle entre la position du soleil et le zénith exprimée en (Deg).

Pour le spectre solaire :

- ✓ AM0 est nulle pour un rayonnement incident d'une façon normale au-dessus de la couche atmosphérique.
- ✓ AM1 pour un soleil vertical à la terre c'est-à-dire le soleil est au zénith.
- ✓ AM1.5 pour un rayonnement solaire correspondant à une déviation du soleil de 45° par rapport au zénith. Le nombre1.5montre que le parcours de la lumière dans l'atmosphère est 1.5 fois supérieur au parcours le plus court du soleil, c'est-à-dire lorsqu'il est au zénith.

  Les conditions de qualification des modules photovoltaïques sont: un spectre AM1.5 sous un éclairement de 1000W/m² et une température de 25°C.[2]

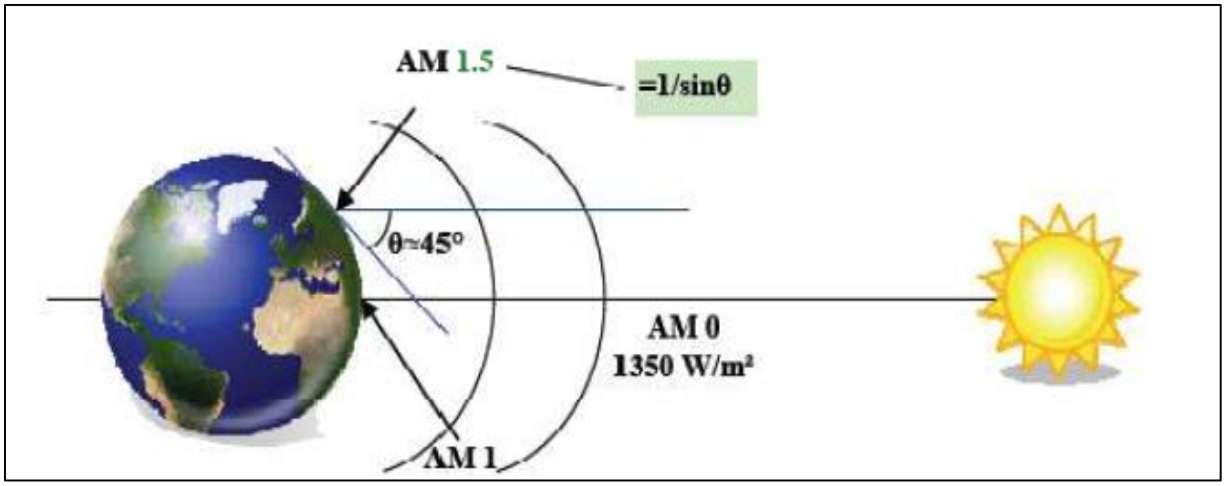


Figure II.1 : Normes de mesures de spectre d'énergie lumineuse émis par le soleil, notion de la convention AM.[2]

II.3 L'effet photovoltaïque :

L'effet photovoltaïque est la transformation directe d'une énergie électromagnétique (rayonnement) en énergie électrique de type continue utilisable. Les cellules photovoltaïques

sont donc capables de permettre le transfert d'énergie du photon absorbé à un électron de plus haute énergie par un circuit extérieur. A chaque photon, on associe une longueur d'onde λ telle que :

$$E_{ph} = h\nu \quad \text{(II.2)}$$

Où *ν* est la fréquence associée à la longueur d'onde.

En fait, une cellule solaire est sensible seulement dans un domaine de longueur d'onde particulier et seuls les matériaux semi-conducteurs disposent de la structure de bande nécessaire à la génération, à partir du rayonnement solaire, des paires électrons-trous.

Dans un métal, tous les niveaux supérieurs au niveau de Fermi sont autorisés et toutes les longueurs d'onde sont donc susceptibles d'être absorbées.

Dans un isolant, le photon n'interagira avec un électron qu'en lui fournissant une énergie supérieure à celle du gap, à savoir supérieure à 5 eV, ce qui correspond à des $\lambda < 0.15$ μm. Ainsi le rayonnement solaire ne sera plus absorbé.

Dans un semi-conducteur, la structure des bandes de conduction et de valence définissent un gap plus faible que dans les isolants ; de 0.3 eV à 2 ou 3 eV. La génération de pairs électrons-trous est engendrée par l'absorption d'un photon qui permet à un électron de la bande de valence de passer dans la bande de conduction. Cette transition est régie par les lois de la conservation de l'énergie et la quantité de mouvement.

II.4 Interaction rayonnement matière :

Quand le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence coïncident dans l'espace k, il s'agit d'un gap direct. Les transitions inter bandent s'effectuent verticalement et présentent de fortes probabilités de transitions radiatives. Ceci est illustré par le fonctionnement des semi-conducteurs binaires III-V tel que l'InGaN. Dans le cas du silicium, matériau à gap indirect, les transitions électroniques entre les extrema des bandes sont obliques, donc non radiatives puisqu'elles impliquent un changement du vecteur d'onde de l'électron. Les électrons du sommet de la bande de valence peuvent toutefois être directement excités vers le minimum relatif central de la bande de conduction grâce à un photon de plus grande énergie. Pour que la transition s'effectue dans le gap indirect elle sera assistée par un phonon soit au préalable absorbé (ou émis)[3].

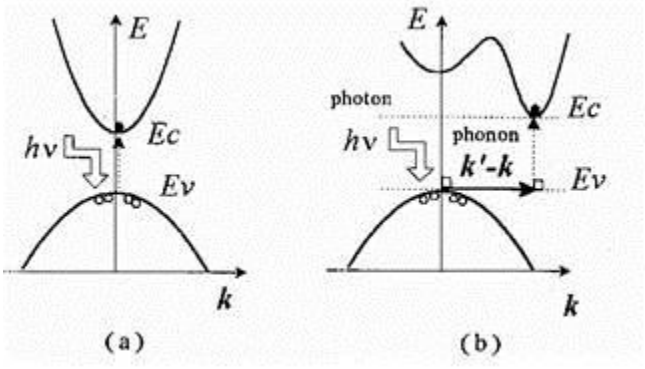


Figure II.2:Transition inter-bande dans un semi-conducteur : (a) à gap direct, (b) à gap indirect.

Prenons le cas du silicium, l'interaction entre les photons et les électrons se traduit par le coefficient d'absorption. Il correspond au nombre de photons absorbés par unité d'épaisseur du matériau en fonction des longueurs d'onde. Pour le GaN la majorité des photons ayant une énergie supérieure au gap direct de 3.4 eV est absorbée dans les premières couches atomiques du matériau. Ces transitions directes ne sont plus possible pour les longueurs d'onde plus importante. Il faut alors qu'un (ou plusieurs) photon vienne assister à l'électron pour que ce dernier passe dans la bande de conduction, réduisant ainsi la probabilité de transition. Le coefficient d'absorption diminue donc pour les longueurs d'onde croissantes. Lorsque l'énergie du photon devient inférieure à celle du gap du matériau (à l'énergie d'un photon près), la transition n'est plus possible et le photon n'est plus absorbé.

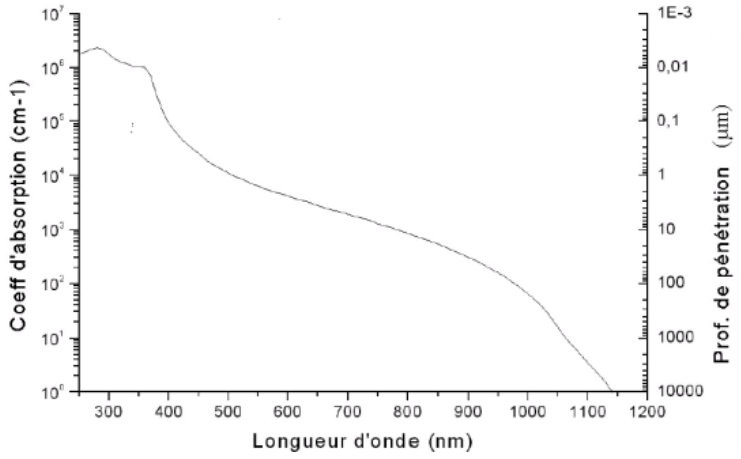


Figure II.3:La variation du coefficient d'absorption du silicium et la profondeur de pénétration des photons en fonction de la longueur d'onde [4].

L'interaction photon/électron au sein d'un semi-conducteur se traduit finalement par la génération d'une paire électron-trou qui modifie localement la conductivité du matériau. Le

dopage étant en général supérieur au taux de photo génération (régime de basse injection) ; les porteurs minoritaires (électrons dans un matériau de type p et trous dans un matériau de type n) sont métastables et n'existent en moyenne que pour un temps égale à la durée de vie τ. Elle correspond au temps moyen entre la création d'une paire électron-trou et sa recombinaison. Il faut donc, pour créer un courant électrique, dissocier les pairs électrons trous photo-générés et les collecter dans un circuit extérieur avant qu'elles se recombinent librement au sein du matériau.

II.5 La collecte des porteurs photo-générés :

La séparation des pairs électrons trous est en général réalisée dans les cellules photovoltaïques par la création d'une barrière de potentiel dans le semi-conducteur. Les types de barrière les plus communes sont l'homo-jonction (jonction p-n dans le même semi-conducteur), l'hétérojonction (jonction p-n entre deux matériaux différents) et barrière Schottky (métal semi-conducteur).

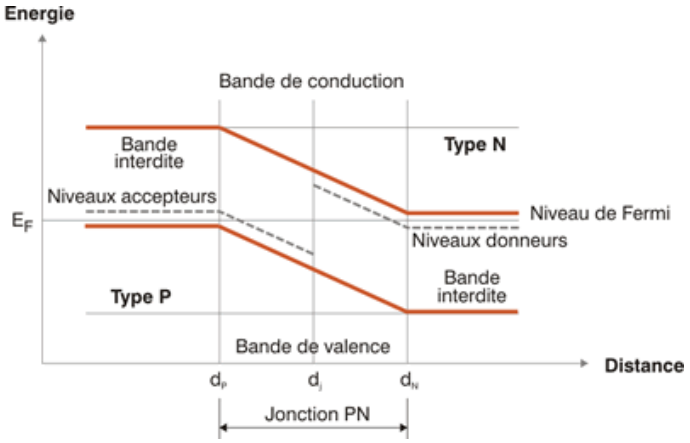


Figure II.4: Diagramme de bande énergétique d'une jonction PN.

Dans une jonction PN, les photo-porteurs auront un comportement différent suivant la région où ils sont créés : en effet, les électrons et les trous se déplacent par diffusion dans ces deux couches. Au voisinage de leurs interfaces, la diffusion entraine une recombinaison entre les trous et les électrons. Les électrons et les trous mobiles s'annihilent. Ce phénomène produit deux zones non neutres électriquement, l'une chargée positivement et l'autre chargée négativement. On obtient ainsi un champ électrique au sein du semi-conducteur et cette zone est appelée zone de charge d'espace (ZCE). Le champ induit l'apparition d'une différence de potentiel électrique entre la zone N et la zone P.

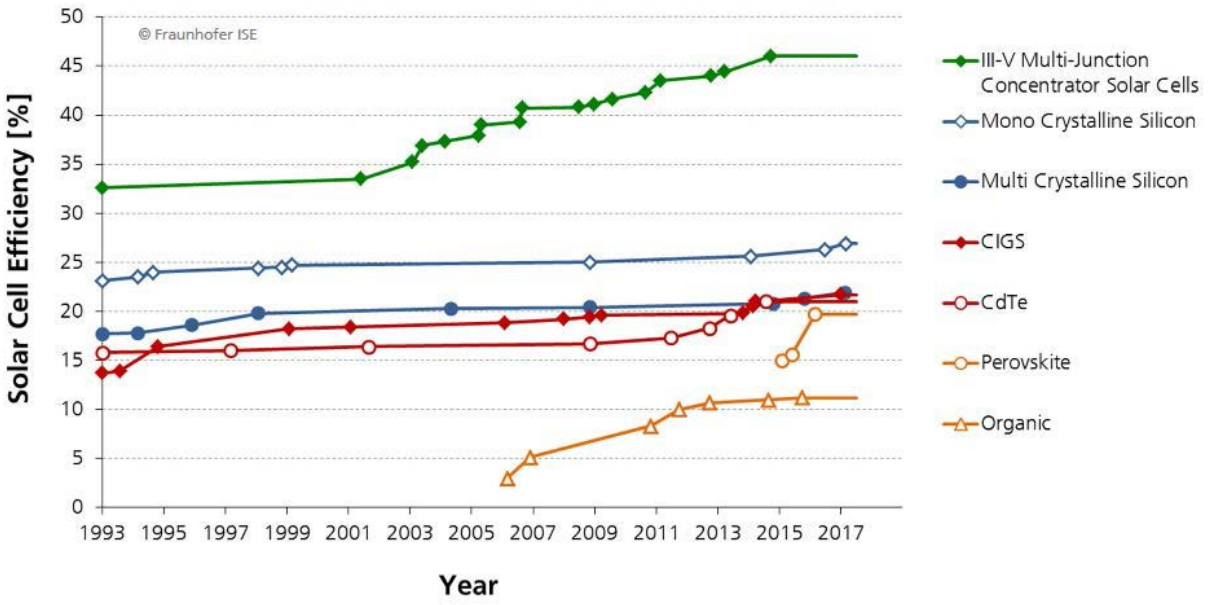
II.6 Les filières photovoltaïques :

Différentes technologies sont aujourd'hui utilisées dans la filière photovoltaïque. La figure II.5montreles évolutions des rendements des différentes filières. Nous pouvons observer qu'à ce jour, les plus hauts rendements sont obtenus avec les cellules III-V multi-jonction sous concentration, tandis que les plus faibles rendements sont obtenus avec les cellules solaires organiques.

II.6.1 Les filières à base de silicium cristallin :

Le silicium est actuellement, et de loin, le matériau le plus utilisé pour la fabrication des cellules solaires. Près de 93 % de la production mondiale des panneaux solaires est à base de silicium. Le silicium présente principalement deux avantages :

- Son abondance. Il est le deuxième élément le plus abondant sur notre planète après l'oxygène, autant dire qu'il est quasiment inépuisable.
- Technologie mature. Les technologies mises en œuvre sont en effet, depuis plusieurs dizaines d'années déjà, bien maîtrisées.



FigureII.5 : Évolution en laboratoire du rendement des cellules photovoltaïques[5].

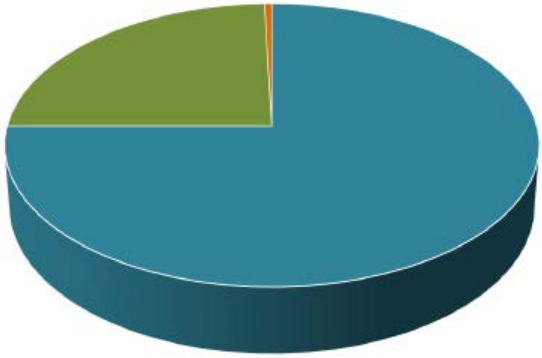


Figure II.6 : Production photovoltaïque mondiale, pour la technologie silicium (2015)[5].

Silicium polycristallin (75%)
Silicium monocristallin (24, 5%)
Silicium amorphe (0, 5%)

La répartition des différentes technologies de cellules solaires photovoltaïques à base de silicium est représentée sur la Figure II.6. On distingue donc trois familles dans la filière silicium : les cellules monocristallines, les cellules poly-cristallines, et les cellules amorphes.

a) Les cellules au silicium monocristallin :

Le silicium monocristallin (mono-Si), est un matériau composé d'un seul cristal parfaitement homogène. Les cellules solaires issues de ce silicium ont une couleur caractéristique qui est généralement gris-noir métallique.

Les avantages de cette technologie sont : une production des panneaux solaires presque optimale. Les cellules monocristallines offrent les meilleurs rendements (16 à 25 %)[6]. Les panneaux solaires à base de silicium monocristallin présentent une bonne durée de vie (30 ans [7]).

Les inconvénients sont : un coût de production élevé, les panneaux sont donc chers à la vente, un rendement plus faible sous un faible éclairement et une baisse du rendement quand la température augmente; par conséquent une production faible dans les régions chaudes.

b) Les cellules au silicium poly-cristallin:

Contrairement au silicium monocristallin, le silicium poly-cristallin (mc-Si) est composé de plusieurs domaines cristallins de tailles variées et orientés de manière aléatoire dans le matériau. Les cellules solaires poly-cristallines ont donc un aspect non uniforme et sont de couleur bleue.

Cette technologie a comme avantages : un coût de production moins élevé que pour les cellules monocristallines. Les panneaux ont également une bonne durée de vie. Le rendement est correct, même par temps nuageux.

Son principal inconvénient est justement son rendement de conversion qui est légèrement inférieur à celui des cellules au mono-Si. Il est compris entre 14 et 21%[6].

c) Les cellules au silicium amorphe :

Les cellules solaires au silicium amorphe (a-Si) sont obtenues à partir d'un dépôt de silicium. Ce dernier peut être déposé sur différents substrats comme du plastique, du verre ou encore sur du métal. Les cellules solaires présentent une couleur grise. Elles ont comme avantage un procédé de fabrication moins coûteux car il est réalisé à basse température et utilise moins de matériau que le silicium cristallin. En effet le a-Si possède un coefficient d'absorption beaucoup plus élevé que le silicium cristallin. C'est ce qui permet d'avoir des cellules avec des couches de l'ordre du micron d'épaisseur et qui permet de réduire significativement les coûts de production [8]. C'est une technologie très utilisée pour alimenter des petits objets du quotidien comme des calculatrices ou des montres solaires. Elles ont aussi l'avantage de fonctionner à faible luminosité et peuvent donc produire du courant même à l'intérieur d'une habitation. Elles présentent comme inconvénient un rendement de conversion faible (environ 13%) par rapport aux autres technologies et une faible durée de vie des panneaux solaires.

II.6.2 Les couches minces :

Comme son nom l'indique, cette filière se base sur l'utilisation des couches minces dont les épaisseurs sont de l'ordre de quelques centaines de nanomètres à quelques micromètres. Cela est permis par une absorption bien plus importante dans ces matériaux si on les compare au silicium. Cette diminution des épaisseurs présente plusieurs avantages. Elle permet, tout d'abord, de réduire considérablement la quantité de matières premières utilisées, et aussi d'ouvrir de nouvelles applications. On peut classer cette filière en trois catégories : les couches minces inorganiques, les couches minces organiques et les couches minces à base de matériaux III-V.

a) Les couches minces inorganiques :

Les principaux matériaux utilisés pour cette catégorie de couches minces sont : le tellurure de Cadmium (CdTe), le CIGS (Cuivre Indium Gallium Sélénium) et le silicium amorphe (a-Si). Ces cellules en couches minces représentaient, en 2016, environ 5% de la production photovoltaïque [5].

Les cellules à base de CdTe sont en plein développement et elles occupent, depuis 2009, une part importante du marché des cellules en couches minces avec des rendements qui atteignent les 21% pour une cellule et 18,6% pour un module photovoltaïque [6]. Les inconvénients majeurs de cette technologie sont la toxicité du Cadmium et la rareté du tellure.

Les cellules à base de CIGS sont généralement sous forme d'une hétérojonction de type CIGS(p)/CdS(n)/ZnO(n) dans les dispositifs à plus haut rendement. Les rendements record obtenus avec cette technologie sont de l'ordre de 21% pour une cellule, 17,5% pour un module et environ 13,5% pour les modules industriels [6].

Les cellules à base de a-Si ont comme avantages de fonctionner avec un éclairement faible, comme à l'intérieur d'une maison mais affichent un rendement assez faible par rapport aux autres. Les rendements record obtenus sont : 13,6% pour une cellule et 10,5% pour un module [6].

L'un des principaux avantages de ces cellules en couches minces est l'utilisation de substrats légers et flexibles. Cela ouvre de nouvelles applications, notamment dans le domaine de l'habitat, comme par exemple le placement de cellules photovoltaïques sur de grandes toiles à coller sur les murs où les toitures, pour générer de l'électricité.

b) Les couches minces organiques :

Les cellules photovoltaïques organiques sont constituées d'une ou plusieurs couches minces de semi-conducteurs organiques. Ces cellules sont encore au stade du laboratoire et présentent déjà de nombreux avantages notoires : une réduction drastique des coûts de fabrication, un faible impact environnemental et une grande flexibilité d'utilisation. Leur développement à grande échelle est aujourd'hui freiné par la faible durée de vie des cellules et les faibles rendements qui les rendent difficilement compétitives avec les autres technologies. Les rendements maximaux actuels sont de l'ordre de 11% pour une cellule et environ 9% pour les modules [6]. Les applications visées sont principalement des usages couvrant de grandes surfaces sur substrats flexibles et également des usages comme l'électronique grand public, le transport, les panneaux publicitaires et dans le bâtiment. Un autre domaine de recherche sur le solaire, plus récent, concerne les cellules photovoltaïque à base de pérovskites. Il s'agit d'un type de cellule photovoltaïque qui comprend un élément chimique ayant une structure de pérovskite, le plus souvent un hybride organique- inorganique de plomb ou un halogénure d'étain, dans sa couche active. C'est une nouvelle technologie pleine de promesses, mais elle

se heurte également à des verrous très importants, comme leur mauvaise résistance à l'eau. Actuellement le rendement record obtenu en laboratoire est de 19,7%[9].

c) Les couches minces à base de matériaux III-V :

À côté de toutes ces filières, on trouve aussi celle des matériaux III-V, très performante. Les semi-conducteurs III-V sont des matériaux composés d'un ou plusieurs éléments de la colonne III et de la colonne V du tableau périodique de Mendeleïev, tels que l'arséniure de gallium, arséniure d'indium, nitrure de gallium, antimoniure de gallium ou des alliages ternaires tels qu'$In_xGa_{1-x}As$. Ils présentent généralement une haute mobilité électronique et une bande interdite directe. Après le Silicium, ce sont les deuxièmes matériaux semi-conducteurs les plus utilisés dans l'industrie des semi-conducteurs. Les cellules solaires III-V sont essentiellement utilisées pour les systèmes multi-jonction dans le but d'augmenter le rendement de la cellule solaire, en superposition de multiples cellules ayant des bandes d'énergie interdites différentes permettant ainsi une absorption plus large du spectre solaire. En effet, comme la composition de l'alliage III-V détermine son énergie de bande interdite, on peut donc plus facilement concevoir une cellule multi-jonction avec différentes bandes interdites. La première jonction doit avoir une largeur de bande interdite pour absorber les photons les plus énergiques (UV) et rester transparente aux autres. La seconde jonction est adaptée pour les photons moins énergiques et ainsi de suite. C'est une technologie, à l'origine, utilisée pour des applications spatiales avant le développement aujourd'hui, des modules photovoltaïques pour les applications terrestres.

Ces cellules multi-jonctions peuvent certes donner des meilleurs rendements maisellesont aussi des coûts de fabrication élevés, ce qui limite leurs applications au niveau spatial et militaire. Afin de diminuer ces coûts, on utilise pour cette technologie, des cellules solaires sous forte concentration lumineuse. Cela consiste à capter le rayonnement solaire grâce à une série de dispositifs optiques (lentilles ou miroirs) pour le concentrer sur une cellule solaire de faible surface. La concentration varie de 2 à plus de 1000 fois la puissance lumineuse émise par le soleil. Elle s'exprime en unité dite "soleil" ("sun") qui indique par combien la densité de puissance incidente du soleil est multipliée. Comme le montre la figure II.5, le rendement maximal des cellules à base de silicium est d'environ 25%, et peut atteindre 28% pour les cellules sous concentration, alors que les cellules multi-jonctions à base de III-V approchent les 46% de rendement sous concentration[6]. Les cellules solaires à base de matériaux III-V répondent alors aux deux principales problématiques de recherche de la filière photovoltaïque, à savoir :

- L'augmentation du rendement de conversion des cellules photovoltaïques, avec notamment la conception de nouvelles structures et l'utilisation de cellules multi-jonctions, ce qui permet une meilleure exploitation du spectre solaire et une augmentation de la densité de courant produite.

- La baisse des coûts de fabrication des cellules photovoltaïques, par l'utilisation de cellules en couches minces.

Nous avons, dans la figure II.7 ci-dessous, représenté quelques exemples d'applications de cellules solaires photovoltaïques.



Figure II.7 – Quelques exemples d'applications de cellules solaires photovoltaïques : a) Avion 100% solaire du projet Solar Impulse, qui a bouclé un tour du monde en 2016. b) Panneaux solaires flottants dans le réservoir du parc industriel d'Okegawa (japon), la centrale devrait produire environ 1,2 MW par an. c) Tronçon routier de 1 km recouvert de panneaux photovoltaïques en Normandie (France). d) Batterie nomade solaire, pour smart phone, produit par Infinité PV, une société Danoise, utilisant des cellules solaires organiques imprimées [10].

II.7 Caractéristique physique des cellules solaires :

II.7.1 Caractéristique courant-tension et schéma équivalent d'une cellule solaire :

Les propriétés électriques de la cellule sont synthétisées dans un graphe qu'on appelle caractéristique courant-tension et accompagnées par un schéma électrique équivalent. Les performances d'une cellule photovoltaïque sont caractérisées par un certain nombre de paramètre extraits de la caractéristique courant-tension tel que la tension en circuit ouvert (V_{co}), le courant du court-circuit (I_{CC}), le facteur de forme (FF) et par la suite le rendement de la cellule (η).

Dans l'obscurité et dans le cas idéal, la courbe obéit à l'équation de Schrockley suivante :

$$I_{obs}(V) = I_S\,(exp\,[qVnKT] - 1) \qquad \text{(II.3)}$$

Où I_S : le courant de saturation

V : la tension aux bornes de la jonction (V)

q : la charge élémentaire= $1.6.10^{-19}$C

K : la constante de Boltzmann= $1.38.10^{-23}$ $J.K^{-1}$

T : la température (K)

η: le facteur d'idéalité de la diode. Tenant compte des recombinaisons

Ce courant d'obscurité correspond au courant de diode (I_d), il résulte de la polarisation de la jonction. Sous éclairement, les photons incidents vont générer des paires électron-trou dont le comportement va différer selon la zone d'absorption :

- Dans la zone de charge d'espace (ZCE) engendrée par la jonction p-n ; les paires électron-trou créées sont dissociés par le champ électrique. Les électron sont accélérés puis injectés dans la zone n (émetteur) et les trous dans la zone p (base). Un photo-courant de génération est créé.

- Dans les zones n et p, les porteurs minoritaires générés (trous dans l'émetteur et électron dans la base) vont diffuser vers la ZCE. S'ils atteignent cette dernière avant de se recombiner, ils sont injectés dans la zone n pour les électrons et dans la zone p pour les trous et deviennent majoritaires. Un photo-courant de diffusion est créé.

Ces deux contributions s'ajoutent pour donner un photo-courant de porteurs minoritaires résultant I_{ph}. Il est proportionnel à l'intensité lumineuse. On obtient l'équation suivante :

$$I = I_{ph} - I_{obs} \qquad \text{(II.4)}$$

Soit:

$$I(V) = I_{ph} - I_S\,(exp\,[qVnKT] - 1) \qquad \text{(II.5)}$$

Ainsi, sous éclairement, la caractéristique d'une cellule photovoltaïque idéale est donc la superposition d'un générateur du courant d'intensité I_{ph} et de la caractéristique de cette diode sous obscurité.

Dans le cas d'une cellule réelle, d'autre paramètre tenant compte des effets résistifs, des recombinaisons, des fuites vers les bords doivent être pris en considération. Le schéma équivalent est représenté sur la figure II.8 par un générateur du courant, une diode et deux résistance R_s et R_{sh}.

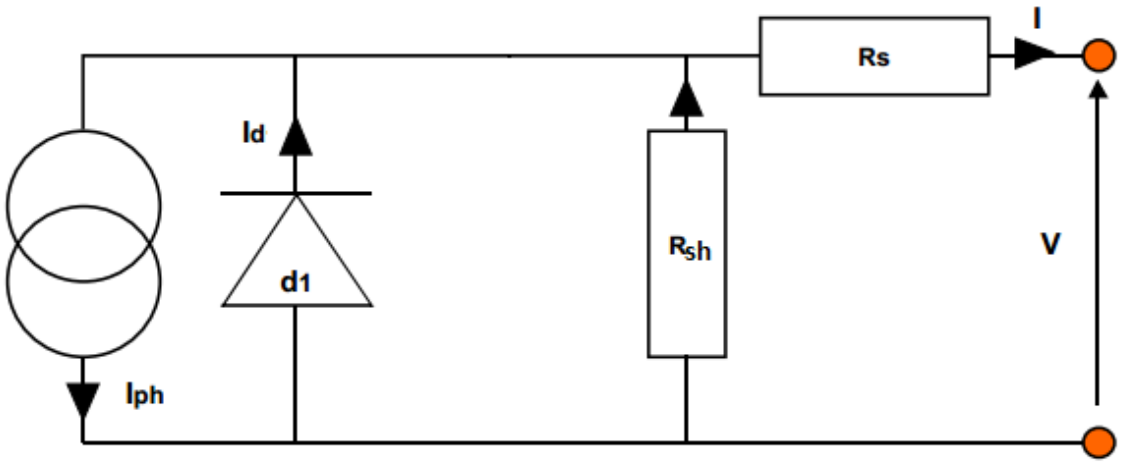


Figure II.8:Schéma électrique équivalent d'une cellule solaire réelle.

- La résistance série R_s : tient compte de la mobilité des porteurs de charge dans le matériau qui est régie par les impuretés et les barrières. Elle prend en compte également la résistivité propre aux contacts entre les différentes régions constitutives de la cellule. Ce terme doit idéalement être le plus faible possible pour limiter son influence sur le courant de la cellule. Ceci peut être réalisé en optimisant le contact métal/semi-conducteur, et en diminuant la résistivité du matériau utilisé. Cependant, un dopage trop élevé entraine une augmentation de la recombinaison des porteurs. Elle se calcule à partir de l'inverse de la pente de la caractéristique courant-tension au point ($V>V_{co}$, 0).

- La résistance shunt R_{sh} : également connue sous le nom de résistance de court-circuit. Elle est liée à l'effet de bord et aux recombinaisons volumiques. Elle traduit l'existence de shunt à travers l'émetteur, causé par un défaut. La résistance parallèle modélise le courant de fuites qui court-circuite la jonction. Elle devra être la plus élevée possible. Elle se calcule à partir de l'inverse de la pente de la caractéristique courant-tension au point (0, I_{CC}). Dans le cas idéal, R_s est égale à 0 et R_{sh} tend vers l'infini.

II.7.2 Grandeurs caractéristiques de la cellule solaire :

A partir de la caractéristique I(V) sous éclairement, on déduit les paramètres électriques propres à la cellule. Typiquement, la tension maximale d'une cellule (PN) est d'environ 0.5 à 0.8 V. elle peut être directement mesurée à ses bornes. Cette tension est nommée tension de circuit ouvert. On mesure le courant maximal produit par la cellule et on le nomme communément courant de court-circuit. Ces valeurs sont fortement dépendantes de la qualité du matériau utilisé, de la température et de l'ensoleillement.

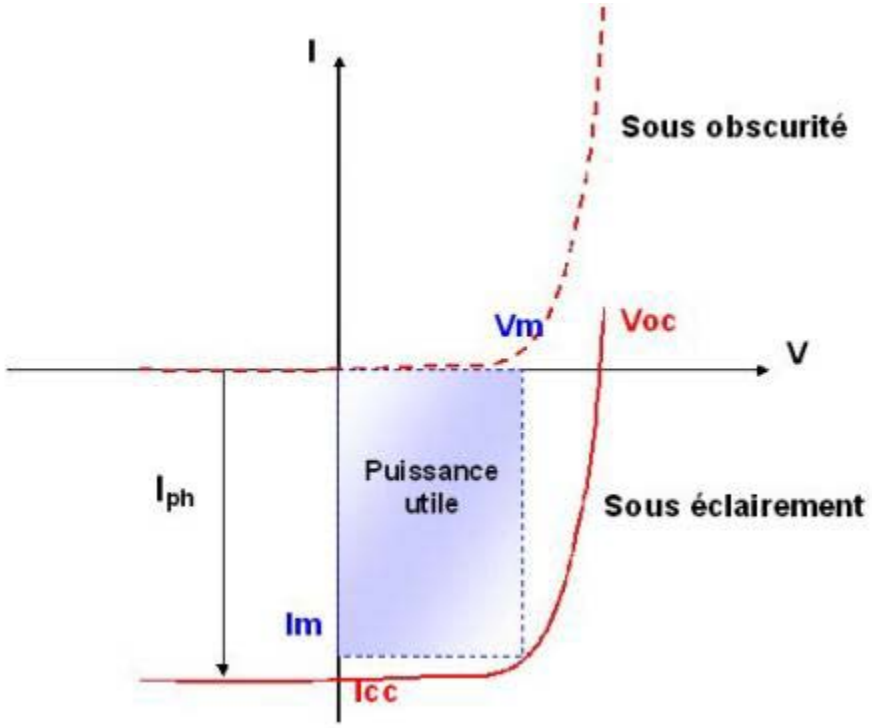


Figure II.9:Caractéristique I(V) sous obscurité et sous éclairement d'une photopile dans le noir et sous éclairement.

- Les valeurs V_{max}. I_{max} sont définies de telle sorte que le produit $|V_{max}.I_{max}|$soit maximal. Ce produit correspond à la puissance maximale P_{max} pouvant être délivrée par la cellule photovoltaïque.

- Un paramètre important est souvent utilisé à partir de la caractéristique *I(V)* pour qualifier la qualité de la cellule ; c'est le facteur de remplissage ou facteur de forme *(FF).* Ce coefficient représente le rapport entre la puissance P_{max} et la puissance formée par le rectangle Vco.I_{CC}. Plus la valeur de ce facteur sera grande, plus la puissance exploitable le sera également. Les

meilleures cellules auront donc fait l'objet de compromis technologiques pour tendre le plus possible vers les caractéristiques idéales.

$$FF = P_{max}/I_{CC}.V_{OC} \quad (II.6)$$

- Le rendement de conversion (η) exprimé en pourcentage est défini comme le rapport de la puissance maximale délivrée par la cellule photovoltaïque et la puissance lumineuse incidente

$$\eta = P_{max} / P_{inc} = FF.\ V_{co}.I_{CC}P_{inc} \quad (II.7)$$

Ces paramètres électriques varient avec l'intensité lumineuse.

II.7.3 Facteurs limitant le rendement :

En pratique, la conversion d'énergie lumineuse en énergie électrique n'est pas totale. Différentes pertes viennent influer le rendement d'une cellule. Ces pertes peuvent être classées en deux catégories : les pertes dues à la nature du matériau et les pertes dues à la technologie utilisées.

II.7.3.1 Les pertes engendrées par le matériau utilisé :

- Pertes par les photons de longueur d'onde supérieure au gap : tous les photons possédant une longueur d'onde supérieure à celle associées au gap du semi-conducteur ($\lambda > \lambda g$) ne fournit pas assez d'énergie pour faire passer un électron de la bande de valence à la bande de conduction. Son énergie sera perdue.

- Pertes dues à l'énergie excédentaire : des photons possédant une énergie supérieure au gap générant une seule paire électron-trou. L'excès d'énergie, supérieur à la longueur de la bande interdite, est dissipé sous forme de chaleur (thermalisation).

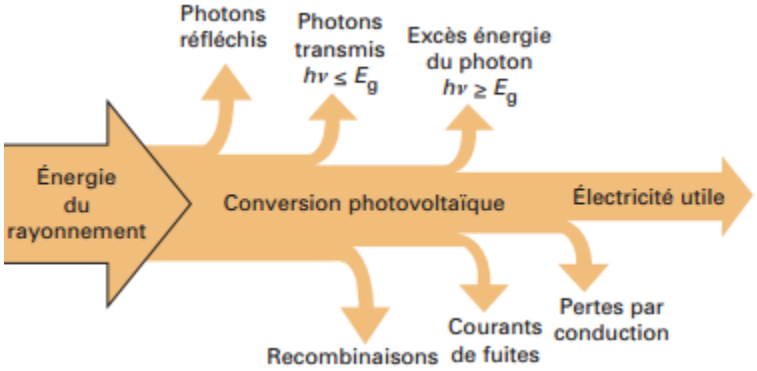


Figure II.10:Les différents mécanismes e pertes dans la cellule solaire : les photons avec une énergie plus faible que l'énergie du gap et ceux avec un excès la perdent sous forme de chaleur [11].

- Les recombinaisons radiatives et non radiatives : le rendement de conversion est réduit si les photo-porteurs se recombinent avant d'être collectés. L'importance de ces pertes dépend particulièrement de la durée de vie des porteurs minoritaires en excès de part et d'autre de la jonction (des électrons injectés du coté P et des trous injectés du coté N). Les mécanismes de recombinaisons peuvent être radiatifs ou non radiatifs. On définit la recombinaison radiative lorsqu'un électron perd son énergie et passe de la bande de conduction à la bande de valence en émettant un photon. Les porteurs en excès peuvent aussi se recombiner de façon radiative via des pièges en surface ou en volume ou via des processus Auger. Ce dernier mécanisme fait intervenir plus de deux porteurs : ainsi un électron de la bande de conduction peut se recombiner avec un trou de la bande de valence en transférant son énergie en excès à un autre porteur (électron ou trou) qui devra par la suite perdre son énergie cinétique en excès via l'émission des phonons. Ces mécanismes sont importants lorsque la densité des porteurs est grande car la probabilité de recombinaisons est directement proportionnelle au nombre de particules impliquées dans le processus.

- Chute de tension en circuit-ouvert (V_{co}) : cette tension concorde avec la tension du gapE_g. Les plus grands ou les plus importants enregistrés sont de l'ordre de 700 mV pour le silicium. Les chutes en circuits ouvert sont dues aux chutes de potentiels au niveau des contacts [12].

- Facteur de forme (FF) : les équations courant tension sont régies par les équations de Boltzmann sous la forme exponentielle (exp [$qVkT$]). La courbe I(V) ne peut pas donc avoir une forme rectangulaire et, même dans une cellule idéale, le facteur de forme ne peut pas dépasser 0.89. Ce terme dépend également de la qualité de la jonction p-n, de la résistance série et parallèle.

II.7.3.2 Les pertes technologiques :

- Les réflexions : l'indice de réfraction de l'arséniure de gallium (n=3.5227)est différent de celui de l'air (n=1). A leur interface, des réflexions vont se produire, ce qui limite le rendement de la cellule. Le coefficient de réflexion R peut être optimisé par l'emploi des couches antireflet.

- Le taux d'ombrage : tient compte de la couverture partielle de la surface de la cellule par une partie opaque correspondant à la surface des contacts métalliques de la face avant. Il doit être minimal puisqu'il réduit proportionnellement le courant d'éclairement, car il empêche une partie du rayonnement incident d'atteindre la cellule. Les dimensions des métallisations sont

alors un compromis entre les pertes optiques dues à la couverture partielle de l'émetteur et les pertes du facteur de forme provoquées par la résistance série, liées à la taille de métallisation [13].

- Rendement de collecte : c'est le rapport entre le nombre de porteurs effectivement collectées et le nombre total de porteurs photo-générés. En effet, certains porteur se recombinent dans le volume ou à la surface avant leur collecte. Ce phénomène dépend de la durée de vie τ des porteurs minoritaires (temps moyen entre la génération et la recombinaison d'un porteur minoritaire). Ces recombinaisons peuvent être réduites en mettant en œuvre différents traitement.

II.7.4 Technologie pour la réduction des pertes :

Les mécanismes de fonctionnement des cellules photovoltaïques tel que l'absorption des photons, la conversion de l'énergie solaire en énergie électrique collectée à travers un circuit extérieur, crées des pertes. Plusieurs solutions sont utilisées pour l'obtention d'un rendement de conversion optimal.

-**Passivation des faces avant et arrière** : les surfaces des semi-conducteurs contiennent une densité de défauts importante donnant lieu à des pertes notables dues aux recombinaisons en surface. La passivation des surfaces aide essentiellement à améliorer les qualités électroniques de la surface et du volume du matériau en neutralisants les effets des défauts électriquement actifs.

- Couche antireflet : afin d'atteindre un rendement de conversion parfait, plusieurs essais ont été mis en œuvre. L'introduction des couches antireflets à la surface éclairée a prouvé leur efficacité en diminuant les pertes par réflexion. Parmi ces couches, nous citons le TiO2, SiO2, ZnS…

- Contacts face avant et arrière : les contacts métalliques, qui doivent être ohmiques, à l'émetteur et au substrat servent à collecter le courant photo-générés. La forte résistance des contacts augmente la résistance série de la cellule et baisse le facteur de forme et le rendement.

II.8.. InGaN pour le photovoltaïque à haut rendement :

II.8.1 Limites de rendement dans une cellule solaire a une seule jonction :

Comme expliqué précédemment, les cellules solaires à haut rendement sont souhaitables pour la viabilité économique à long terme. La majeure partie des cellules solaires disponibles dans

le commerce sont basées sur la technologie du silicium à jonction unique monocristalline et multi cristalline. L'efficacité photovoltaïque maximale pour une bande interdite à jonction unique de 1,1 eV éclairée par un corps noir à 6 000 K, comme prédit par Shockley et Queisser à l'aide d'une modélisation d'équilibre détaillée, est de 31 %[14].

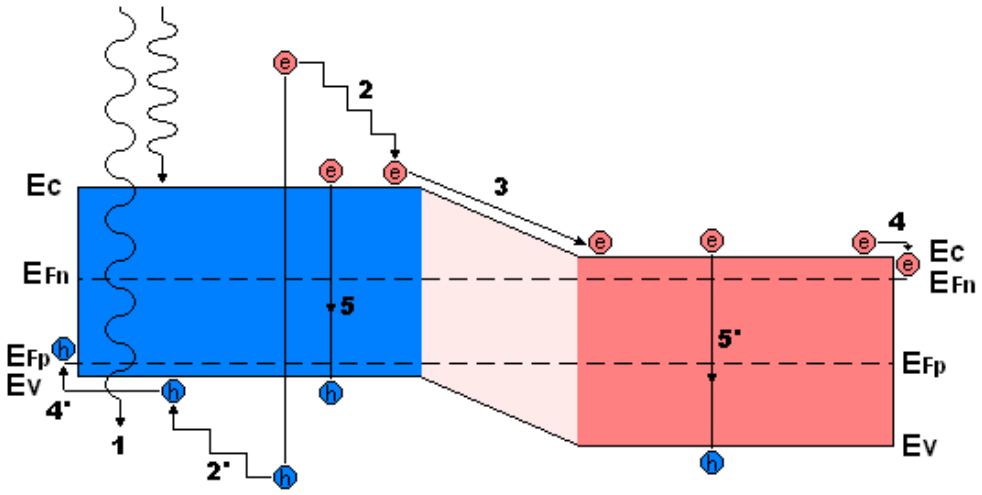


Figure II.11 : Processus de perte majeurs dans une cellule solaire à simple jonction sous polarisation directe : (1) Transmission de photons de faible énergie, (2) Perte de thermalisation, (3) Perte de tension de jonction, (4) Perte de tension de contact, et (5) Perte de recombinaison.

La limite d'efficacité thermodynamique des cellules solaires à simple jonction est de 31 et de 41 % à la concentration maximale par rapport à un tandem de piles infinies ou une cellule solaire équivalente à 86,8 % [15], ce qui est en accord avec la limite d'efficacité d'équilibre détaillée[16]. Cependant, le rendement le plus élevé enregistré dans les cellules solaires au silicium est de 24,7% (PERL) [17], tandis que la majorité des modules disponibles sur le marché se situent autour de 13-17% en raison des pertes qui leur sont associées.

Les principaux mécanismes de perte dans une cellule solaire standard sont illustrés à la figure II.11. L'un des principaux mécanismes de perte (1) est la transmission de photons de faible énergie à grande longueur d'onde. Si l'énergie des photons est inférieure à celle de la bande interdite des semi-conducteurs constitutifs, alors ces photons ne sont pas du tout absorbés et sont transmis à travers la cellule solaire. Ce mécanisme de perte réduit le rendement des cellules solaires en silicium à jonction simple de 23 %. Un autre mécanisme de perte majeur, la perte de thermalisation (2), est provoqué lorsque la paire électron-trou photo-excitée perd rapidement son énergie lors de l'accès à la bande interdite du semi-conducteur en raison de

l'absorption d'un photon de haute énergie. Par conséquent, un photon rouge de faible énergie ne serait aussi efficace qu'un photon bleu de haute énergie. Ce processus réduit l'efficacité des cellules solaires de 38 %.

Les pertes de tension se produisent du fait que la tension de sortie d'une cellule est inférieure au potentiel équivalent à son énergie de bande interdite. Les pertes de tension peuvent être causées par des pertes au niveau de la jonction de la diode ou des contacts externes. Dans le cas du silicium, la bande interdite correspond à environ 1,1 V, tandis que sa tension de sortie maximale réalisable n'est que de 0,785 V.

La perte de recombinaison est un autre mécanisme de perte qui peut s'avérer préjudiciable aux performances de la cellule si la qualité du matériau n'est pas prise en compte. Ici, les électrons et les trous se recombinent au lieu de migrer vers leurs jonctions respectives et sont donc perdus. La recombinaison représente environ 5 % de perte dans les cellules conventionnelles actuelles. D'autres mécanismes de perte incluent les pertes de facteur de courbe de diode (14 %), les pertes de résistance de matériau et de contact (5 %) et les pertes de réflexion et d'ombrage (5 %) [18].

II.8.2 Approches a haute efficacité :

Alors que des méthodes évolutives telles que la réduction de l'épaisseur des plaquettes, les contacts enterrés pour réduire l'ombrage [19] et la texturation de surface pour réduire la réflexion [17] sont principalement utilisées pour améliorer l'efficacité des cellules solaires en silicium à simple jonction, des concepts révolutionnaires sont étudiés pour piloter la haute - efficacité des cellules solaires vers leur limite thermodynamique ultime. La méthode la plus efficace pour atteindre des rendements élevés aujourd'hui est une conception comparativement plus simple et intuitive - la cellule solaire tandem [20, 21]. Le tandem GaInP-GaInAs-Ge à triple jonction détient actuellement le record d'efficacité de 40,7 % à 240 soleils [22]. Des concepts nanoélectroniques tels que les puits quantiques[23, 24]et les bandes intermédiaires [25]peuvent également être incorporés dans les cellules solaires pour augmenter le nombre de bandes interdites effectives.

II.8.2.1 Cellules solaires tandem :

Les principaux processus de perte de thermalisation et de non-absorption peuvent être réduits considérablement si l'énergie du photon absorbé est légèrement supérieure à la bande interdite

du matériau de la cellule. Cela conduit au concept de cellule en tandem [20, 26], où plusieurs cellules sont utilisées avec des bandes interdites différentes, chaque cellule convertissant une plage étroite d'énergies photoniques proches de sa bande interdite, comme le montre la figure II.12.

Les cellules à grand espacement sont empilées sur le dessus, qui absorbe efficacement les photons à haute énergie, transmettant les photons à plus faible énergie aux cellules avec des bandes interdites plus faibles. Les premières cellules tandem utilisées dans les applications spatiales étaient empilées mécaniquement et individuellement.

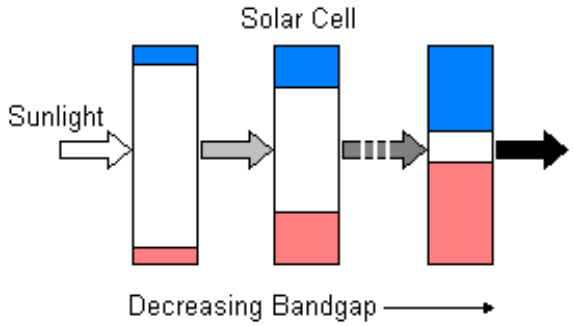


Figure II.12 : Concept de cellule tandem.

Avec l'amélioration de la technologie de croissance, les cellules individuelles sont élaborées de manière monolithique les unes sur les autres. De tels dispositifs fonctionnent en série avec seulement deux sondes pour la connexion externe, alors qu'ils sont connectés en interne par des jonctions tunnel, qui présentent des caractéristiques ohmiques. Les performances d'un tandem augmentent à mesure que le nombre de cellules dans la pile augmente, avec une efficacité de conversion de la lumière directe du soleil de 86,8 % calculée pour une pile infinie de cellules fonctionnant indépendamment sous une concentration maximale. Cependant, l'augmentation du nombre d'empilements ajoute des complications et rend le tandem sensible au spectre d'irradiation car ces cellules individuelles doivent être connectées en série avec une faible résistance de contact ohmique et doivent être adaptées en courant.

II.8.2.2 Cellules solaires à puits quantiques :

Une structure à intervalle d'énergie multiple, similaire aux cellules solaires en tandem, peut également être obtenue à l'aide de la structure Quantum-Well Solar Cell (QWSC) proposée par le groupe de Keith Barnham en 1991 [23, 24]. Dans sa forme la plus simple, le QWSC se

compose d'une cellule solaire p-i-n avec un système Multi-Quantum-Well (MQW) ajouté à la région intrinsèque (i) comme le montre la figure II.13. La région i étend la région porteuse de champ de la jonction p-n. De fines couches alternées, de l'ordre de quelques nanomètres, d'un matériau à bande interdite inférieure sont élaborées dans la région i. Ces matériaux à faible bande interdite apparaissent comme des puits dans le diagramme des bandes d'énergie.

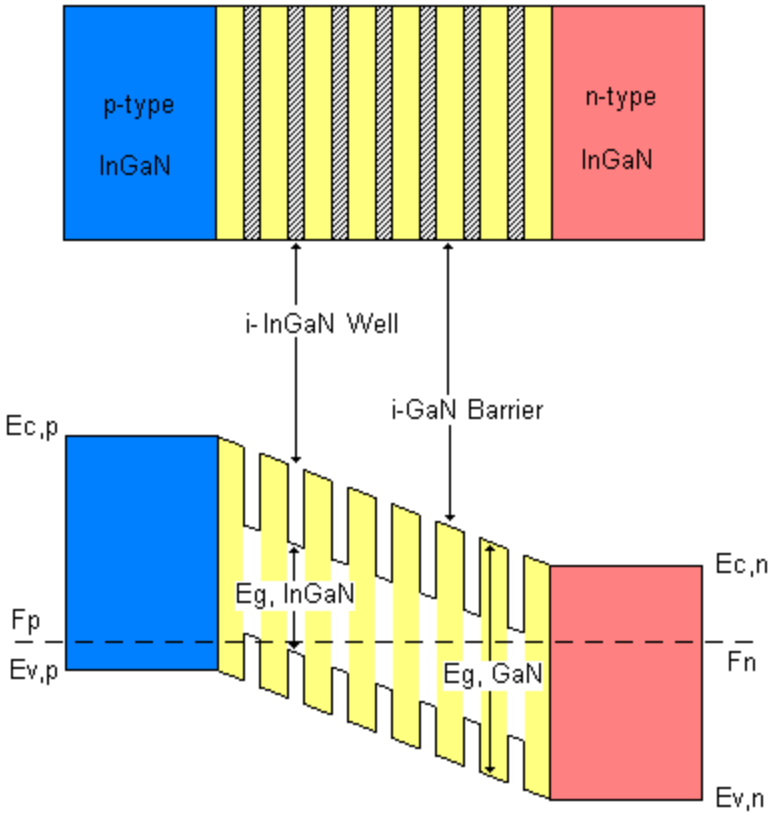


Figure II.13 : Structure de la cellule solaire à puits quantique et diagramme de bande.

Les puits quantiques (QW) génèrent des niveaux d'énergie quantifiés dans le puits correspondant à la bande interdite et aux dimensions du puits. Un tel système MQW ou super-réseau se comporte comme une superposition de semi-conducteurs avec des bandes interdites équivalentes à la différence de ces niveaux d'énergie.

Ce super-réseau absorbe les photons d'énergie inférieure à la bande interdite du matériau, qui auraient autrement été perdu dans le processus de conversion photovoltaïque. Cette absorption supplémentaire augmente le courant photo-généré, augmentant ainsi le rendement net de la cellule solaire. La tension de sortie de la cellule est comprise entre celle de la cellule classique constituée du puits et celle constituée de la barrière. Les propriétés d'absorption des cellules

solaires à puits quantique peuvent être modifiées en adaptant le nombre et la taille des puits quantique et des barrières et ainsi atteindre un optimum. De cette façon, les cellules solaires à puits quantique intègrent les principes des cellules solaires en tandem et peuvent théoriquement atteindre des rendements équivalents.

II.8.2.3 Autres concepts à haute efficacité :

La cellule solaire à bande intermédiaire (IBSC) suit également une approche multi-bande comme les tandems et les QWSC, où la bande supplémentaire est incorporée dans la cellule solaire à jonction unique [25]. De telles cellules solaires se comportent comme une superposition de trois bandes interdites et sont théoriquement moins sensibles aux variations spectrales par rapport aux tandems. Les bandes intermédiaires sont pratiquement réalisées via des impuretés mid-gap ou des points quantiques. Ainsi, l'efficacité des IBSC est améliorée par la « conversion ascendante » des photons de faible énergie.

Les cellules solaires à porteurs chauds fonctionnent sur le principe que les porteurs photo-générés ne doivent pas se détendre aux bords des bandes par interaction avec le réseau absorbant [27]. Pour une efficacité maximale, la recombinaison radiative doit être plus rapide qu'une telle relaxation. Ce n'est pas une exigence triviale, mais de telles structures peuvent être obtenues grâce à des systèmes moléculaires et de faible dimension. De tels dispositifs offrent une tolérance spectrale importante.

Contrairement à la combinaison de deux photons de faible énergie pour obtenir une paire électron-trou de haute énergie, un photon de haute énergie peut être utilisé pour produire plusieurs paires électron-trou de faible énergie. Ce processus peut être réalisé par ionisation par impact dans des structures à faible bande interdite. La génération d'au moins 3 paires électron-trou par photons incident a été démontrée dans les boîtes quantiques de PbSe et PbS [28, 29]. Ce processus a été renforcé par la discrétisation des énergies provoquée par le confinement dans les boîtes quantiques.

II.9 Approche expérimentale conception de cellules solaires InGaN :

II.9.1 Principes généraux de conception des cellules solaires :

Les cellules solaires au nitrure III sont développées selon les principes de conception de base, car ces règles restent inchangées quel que soit le matériau semi-conducteur. De plus, il

devient important de comprendre complètement ces principes pour les nouveaux semi-conducteurs comme InGaN afin d'explorer de nouvelles conceptions, car les conceptions communes peuvent ne pas être technologiquement viables. Les quatre aspects pris en compte lors de la conception de dispositifs photovoltaïques InGaN à simple jonction, comme toutes les autres cellules solaires, sont :

1. Maximiser l'absorption dans les cellules solaires pour augmenter le nombre de porteurs photo-générés,
2. Maximiser la collecte des porteurs photo-générés aux jonctions p et n,
3. Minimiser le courant d'obscurité de polarisation directe,
4. Minimiser les pertes résistives dans la masse ainsi que les contacts externes de l'appareil.

II.9.1.1Absorption lumineuse :

Le courant de court-circuit (ISC) des cellules solaires dépend directement de la quantité de lumière absorbée par cet appareil. De plus, il est prévu de maximiser l'absorption de la lumière dans la région d'appauvrissement de la diode de la cellule solaire pour améliorer la probabilité de collecte des porteurs photo-générés. Les méthodes suivantes peuvent être utilisées pour maximiser l'absorption de la lumière dans une cellule solaire :

1. **Augmentation de l'épaisseur de** dispositif: pour un matériau donné, où la bande interdite n'est pas une variable, la méthode la plus intuitive pour augmenter l'absorption de la lumière consiste à augmenter l'épaisseur de dispositif. Cependant, cette méthode peut ne pas être viable au-delà d'une certaine limite pour des matériaux comme InGaN, où la séparation de phase et les défauts peuvent augmenter à des épaisseurs plus élevées et avoir un impact négatif sur les performances de dispositif.
2. **Piégeage de la lumière :** Alternativement, l'épaisseur effective des cellules solaires peut être augmentée en augmentant la longueur du chemin optique de la lumière entrant dans dispositif. Des miroirs de surface arrière impliquant des métaux ou des réflecteurs de Bragg [30, 31]peuvent être utilisés à cette fin. De tels réflecteurs sont étudiés pour les LED et les lasers à base de GaN, et peuvent être intégrés dans des cellules solaires InGaN [32].
3. **Revêtement antireflet (ARC) :** alors qu'habituellement 30 % de la lumière est réfléchie par une surface de silicium lisse, les ARC tels que le nitrure de silicium

peuvent réduire considérablement cette réflexion [33] et sont couramment utilisés dans les cellules solaires. De tels ARC peuvent également être déposés sur des cellules solaires au nitrure III pendant les étapes finales de fabrication.

4. **Texturation de la surface :** la texturation de la surface minimise non seulement la réflexion de la surface de la cellule solaire, mais augmente également la longueur du chemin optique de la lumière entrant dans dispositif en déviant la lumière entrante, comme le montre la figure II.14[34]. Une telle texturation peut également être appliquée à des substrats tels que le saphir, le carbure de silicium ou l'oxyde de zinc, lors de l'éclairage de la cellule solaire au nitrure III depuis le côté substrat.
5. **Minimiser la couverture de contact supérieur :** La réflexion due au métal de contact supérieur peut être réduite en minimisant sa zone de couverture. Cette méthode, cependant, augmente la résistance série de la cellule solaire en raison de la résistance accrue des doigts métalliques minces et des barres omnibus [35, 36]. La technologie de contact enterré [19] est une méthode innovante pour surmonter ce compromis, et des méthodes similaires peuvent être étudiées pour les nitrures III.

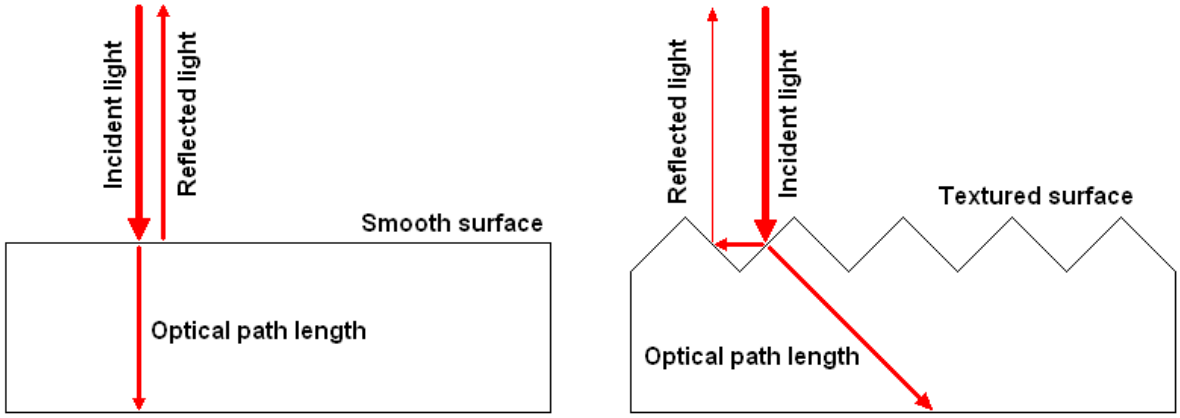


Figure II.14 : Comparaison géométrique de (a) surface lisse et (b) surface texturée dans les cellules solaires indiquant une absorption plus élevée pour la surface texturée en raison d'une réflexion plus faible et d'une augmentation de la longueur du chemin optique.

II.9.1.2 Efficacité de la collecte :

L'efficacité de collecte des porteurs minoritaires d'une cellule solaire peut diminuer en raison de la recombinaison des porteurs photo-générés à la surface, dans la jonction ou dans la région d'appauvrissement du dispositif. La recombinaison non diminue seulement le courant de court-circuit I_{sc} de la cellule solaire, mais diminue également

la tension en circuit ouvert (Vco) en raison de l'augmentation des courants de fuite. Alors que la recombinaison est généralement un artefact de la qualité du matériau, cet effet peut être contrôlé dans le dispositif final à l'aide des méthodes suivantes :

1. Passivation de surface : des liaisons pendantes se forment à la surface du semi-conducteur en raison de l'indisponibilité des atomes voisins pour compléter la liaison dans sa coque externe. De telles liaisons agissent comme des centres de recombinaison pour les porteurs minoritaires et, par conséquent, diminuent l'efficacité de collecte de la cellule solaire. Typiquement, des oxydes ou nitrures à large bande interdite sont formés ou déposés sur de telles surfaces pour éliminer les liaisons pendantes[37]. Cependant, les oxydes de gallium et d'indium formés spontanément à la surface du métal-semi-conducteur ont tendance à augmenter la résistance de contact [38] et doivent être pris en compte lors de la fabrication des cellules solaires InGaN.

2. Champs de surface : Les champs de surface avant (FSF) et les champs de surface arrière (BSF) peuvent être formés à l'interface semi-conducteur-métal en augmentant le dopage dans le semi- près de la surface. De tels dopages réduisent non seulement la résistance de contact, mais génèrent également des champs électriques qui repoussent les porteurs minoritaires de la surface et les empêcher de se recombiner à la surface (comme le montre la figure II.15) [39]. Le même principe peut également être appliqué dans les cellules solaires InGaN en augmentant les dopages à proximité des surfaces de type p et n.

3. Ingénierie de bande : Une méthode similaire à la passivation de surface consiste à déposer un semi-conducteur à large bande interdite à la surface de la cellule solaire qui plie les bandes pour générer des champs électriques.

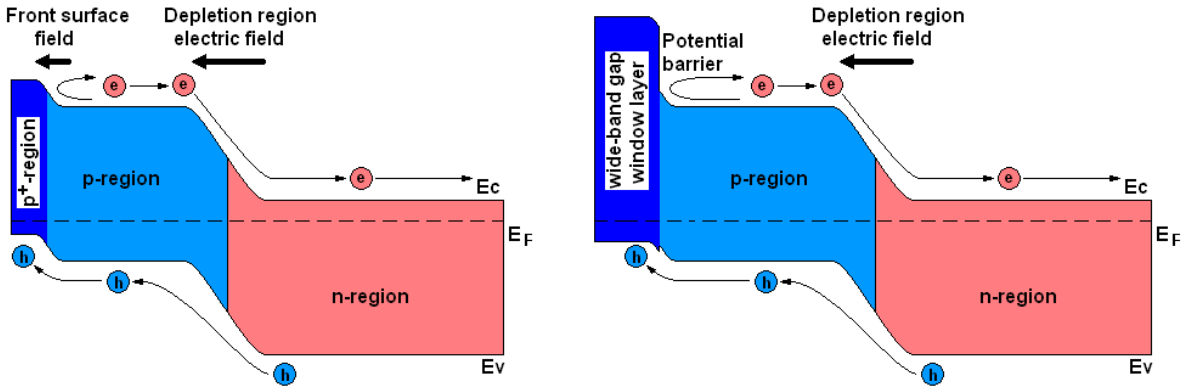


Figure II.15 : Rôle de (a) la région p+ et (b) la couche fenêtre pour générer des champs de surface avant et la passivation.

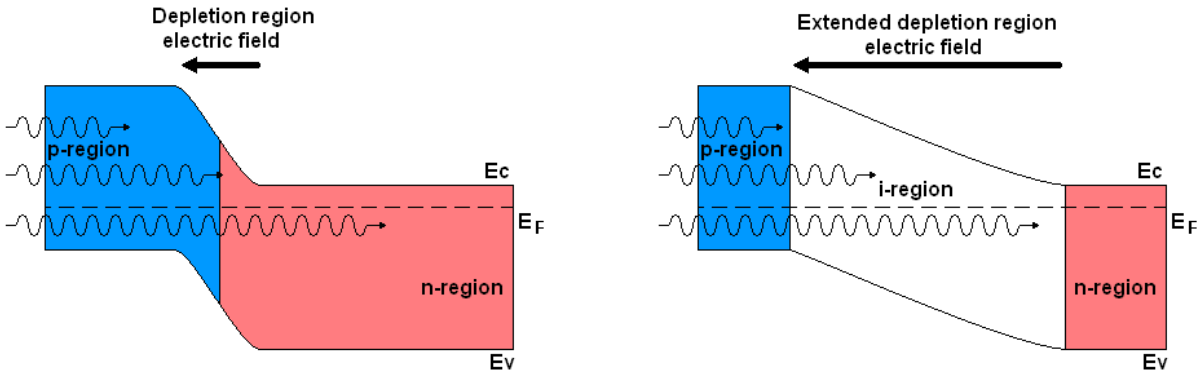


Figure II.16 : (a) Une cellule solaire p-n comparée à (b) une cellule solaire p-i-n illustrant l'extension du champ électrique de la région d'appauvrissement.

De telles « couches de fenêtre », comme le montre la figure II.15 (b), sont largement utilisées dans la technologie des cellules solaires III-V [44] en raison de la facilité relative de croissance et des avantages de fabrication. Les couches de fenêtre GaN et AlN sont étudiées pour leur aptitude à l'énergie solaire InGaN.

4. **Extension de la région d'appauvrissement :** les photo-porteurs générés dans la région d'appauvrissement ont généralement une probabilité de collecte très élevée en raison de la présence d'un champ électrique élevé. Par conséquent, une cellule solaire peut être conçue pour maximiser l'absorption dans la région d'épuisement en augmentant son épaisseur. Cela peut pratiquement être fait en insérant une région i intrinsèque entre les jonctions p et n pour l'InGaN et d'autres semi-conducteurs, comme le montre la figure II.16, ou en classant la couche en termes de bande interdite ou de dopage. Cependant, il convient de noter qu'une région i d'épaisseur non optimale augmente la résistance série de la cellule solaire.
5. **Gettering :** Les imperfections cristallines telles que les défauts ponctuels et les dislocations sont électriquement actifs et agissent comme des centres de recombinaison qui diminuent l'efficacité de collecte de la cellule solaire. De tels défauts peuvent être passivés en liant les liaisons incomplètes avec de l'hydrogène [40] par recuit à haute température.

II.9.2 Avantages et défis des cellules solaires à base d'InGaN :

Les semi-conducteurs au nitrure III ont des bandes interdites directes et leurs bandes interdites couvrent tout le spectre visible et une grande partie de l'ultraviolet, ce qui correspond

exactement au spectre solaire. Par conséquent, les alliages InGaN sont les matériaux les plus prometteurs qui peuvent être potentiellement transformés en cellules solaires avec un rendement ultra-élevé[41].

Jusqu'à présent, la recherche sur les cellules solaires au nitrure III n'en est qu'à ses balbutiements. Il existe un certain nombre de défis fondamentaux dans la technologie et la conception structurelle. L'un des défis intrinsèques est que la structure à jonctions multiples bien connue qui a été utilisée avec succès pour la fabrication de cellules solaires conventionnelles ne peut pas être appliquée à la fabrication de cellules solaires à base de nitrure III en raison d'un problème fondamental sur le p-GaN.[42, 43]. Il est bien connu que le p-GaN doit être exposé à l'azote ambiant à haute température pour être activé. De plus, tout p-GaN activé peut revenir à son état initialement passivé s'il est exposé à un environnement contenant de l'hydrogène (tel que NH_3) à une température élevée pour la croissance de toute autre structure. Par conséquent, le p-GaN doit être la couche finale des cellules solaires afin à la fois de faciliter l'activation du p-GaN et d'éviter d'être désactivé. Cela pose un dilemme pour les cellules solaires à jonctions multiples InGaN. Par conséquent, l'innovation sur d'autres structures pour les cellules solaires à base de nitrure est fortement suggérée pour une efficacité de conversion élevée des cellules solaires dans la pratique.

II.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 associés 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($\boldsymbol{V}$) d'un module solaire ou photovoltaïque est identique à celle d'une cellule solaire élémentaire.

II.10.1 Branchement série :

Les tensions de circuit ouvert de $\boldsymbol{N_S}$ 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 II.17).

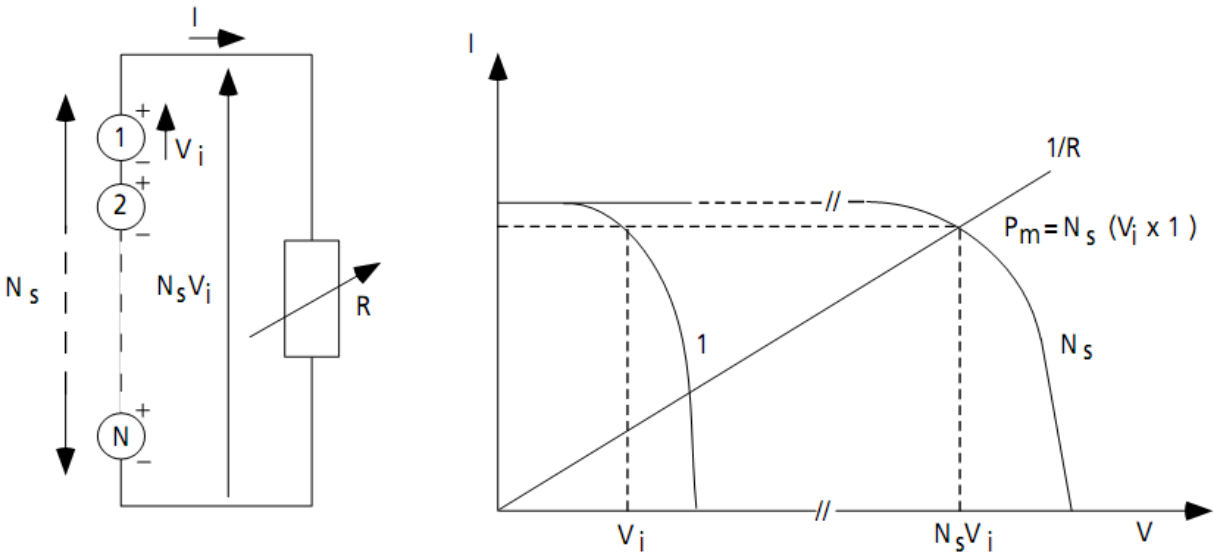


Figure II.17Association en série de Ns cellules solaires [44].

II.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 II.18).

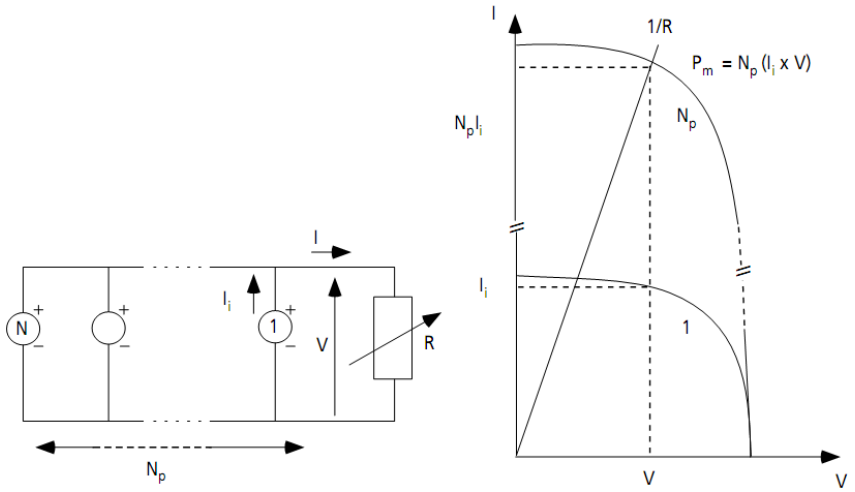


Figure II.18Association en parallèle de Np cellules solaires identiques[44].

II.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 II.19)[45]. La puissance totale disponible P_T, dans ces conditions, est égale à :

$$P_T = N_{MS}.N_{SP}.P_M \quad \text{(II.8)}$$

La résistance optimale est donnée par:

$$R_{opt} = N_{MS}N_{SP}.R_{optm} \quad \text{(II.9)}$$

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

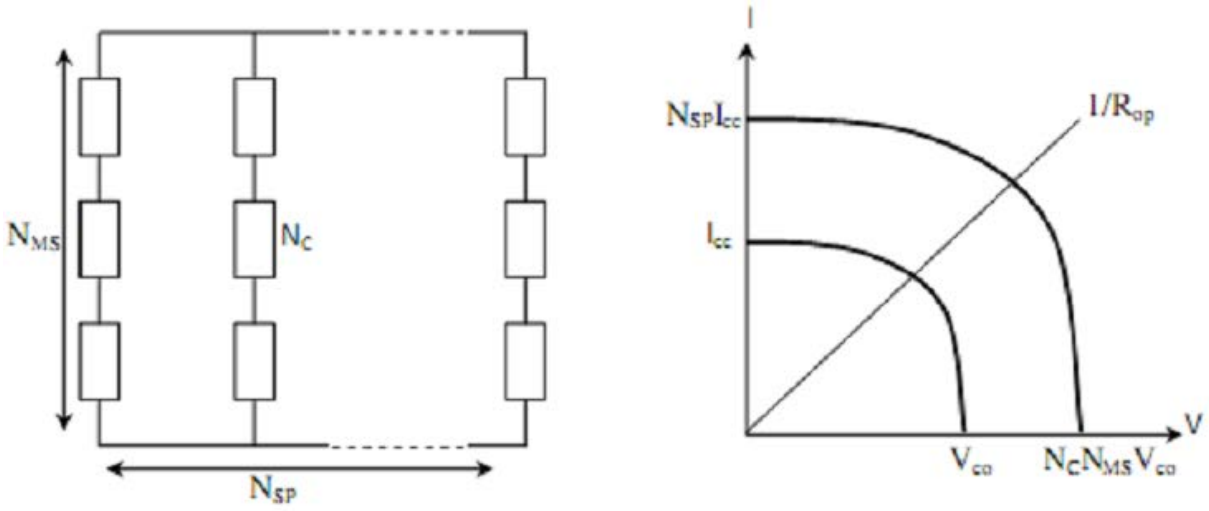


Figure II.19Association mixte de N_{SP} branches et de N_{MS} modules composés de N_c cellules solaires identiques [3].

II.11 Objectifs de la thèse :

L'état de l'art des cellules solaires à base d'InGaN montre que ce matériau possède des atouts indéniables pour la réalisation de cellules solaires à haut rendement. Toutefois, toutes les études expérimentales de différentes cellules solaires à base d'InGaN présentent des rendements bien en dessous des rendements théoriques que l'on pourrait attendre avec cette technologie. Ces faibles performances traduisent principalement trois difficultés : la difficulté de réaliser le dopage de type P, la difficulté d'incorporation de l'indium dans InGaN et la difficulté de réaliser des contacts ohmiques au niveau des couches de dopage de type P.

En vue de contribuer au développement de la technologie InGaN, notre travail est axé sur des simulations numériques de structures cellules solaires dans le but d'en étudier les propriétés, d'en optimiser les performances et de concevoir de nouvelles structures. Ceci grâce notamment à des simulations numériques rigoureuses basées sur les mesures expérimentales, afin d'expliquer les désaccords abordés ici.

Les simulations numériques permettent de prédire les performances d'une cellule solaire avec une facilité de modification des paramètres de la cellule à moindre coût. Cela permet par conséquent de tester des structures innovantes plus facilement. C'est donc évidemment un atout majeur pour valider les structures cellules solaires avant d'effectuer des tests physiques. Ce qui permet de limiter le nombre de prototypes à fabriquer, permettant ainsi de faire des économies d'argent et de temps.

Dans ce travail de thèse, nous allons non seulement simuler des structures cellules solaires conventionnelles, mais également des nouvelles structures permettant de contourner certaines difficultés technologiques actuelles, comme celles liées à l'élaboration de la couche P.

Par ailleurs, afin de connaitre les performances optimales de chaque structure de cellule solaire, ces dernières sont optimisées au moyen de méthodes rigoureuses d'optimisation.

II.12 Conclusion :

Dans ce deuxième chapitre, nous avons présenté le principe de fonctionnement physique d'une cellule solaire et les différentes filières photovoltaïques. Puis, nous avons rappelé quelques notions de base relatives au rayonnement solaire, tels que le spectre solaire, la masse de l'air et les mécanismes de leurs interactions 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. Enfin, nous avons présenté l'état de l'art des cellules solaires à base d'InGaN et les objectifs de la thèse. Nous allons maintenant voir, dans le chapitre suivant, comment modéliser et optimiser les différentes structures de cellules solaires étudiées dans ce travail.

Références :

[1] Becquerel M. Mémoire sur les effets électriques produits sous l'influence des rayons solaires. Comptes rendus hebdomadaires des séances de l'Académie des Sciences. 1839;9:561-7.

[2] Gorge V. Caractérisations de matériaux et tests de composants des cellules solaires à base des nitrures des éléments III-V: Paris 11; 2012.

[3] Mathieu H, Fanet H. Physique des semiconducteurs et des composants électroniques: Dunod Paris; 2001.

[4] Sze S. Si-SiO2 MOS Diode. Physics of Semiconductor Devices, 2nd Edition, Copyright. 1981:383-90.

[5] Weber ER. Photovoltaics moving into the terawatt age. Next Generation Technologies for Solar Energy Conversion VIII: International Society for Optics and Photonics; 2017. p. 1036803.

[6] Green MA, Emery K, Hishikawa Y, Warta W, Dunlop ED, Levi DH, et al. Solar cell efficiency tables (version 49). Progress in photovoltaics: research and applications. 2017;25:3-13.

[7] Ammour Y, Kenouche M, Boubakir CE. Conception et réalisation d'un régulateur de charge par panneaux photovoltaïques: Université de Jijel; 2019.

[8] Lincot D, Bernier J-C, Ehrlacher A, Gronier D, Hamelin P. Chapitre 7: Les fi lières photovoltaïques en couches minces et leurs perspectives d'application à l'habitat. La chimie et l'habitat: EDP Sciences; 2020. p. 127-50.

[9] Yang WS, Noh JH, Jeon NJ, Kim YC, Ryu S, Seo J, et al. High-performance photovoltaic perovskite layers fabricated through intramolecular exchange. Science. 2015;348:1234-7.

[10] Adaine A. Optimisation numérique de cellules solaires à très haut rendement à base d'InGaN 2018.

[11] Surana K. Towards silicon quantum dot solar cells: comparing morphological properties and conduction phenomena in Si quantum dot single layers and multilayers: Université de Grenoble; 2011.

[12] Fonash S. Solar Cell Device Physics, Energy Science and Engineering: Resources. Technology, Management, Academic Press, New York. 1981.

[13] Ali K, Khan SA, Jafri MM. Effect of double layer (SiO2/TiO2) anti-reflective coating on silicon solar cells. Int J Electrochem Sci. 2014;9:7865-74.

[14] Shockley W, Queisser HJ. Detailed balance limit of efficiency of p-n junction solar cells. Journal of Applied Physics. 1961;32:510-9.

[15] De Vos A. Thermodynamics of photochemical solar energy conversion. Solar Energy Materials and Solar Cells. 1995;38:11-22.

[16] Marti A, Araújo GL. Limiting efficiencies for photovoltaic energy conversion in multigap systems. Solar Energy Materials and Solar Cells. 1996;43:203-22.

[17] Zhao J, Wang A, Green MA, Ferrazza F. 19.8% efficient “honeycomb” textured multicrystalline and 24.4% monocrystalline silicon solar cells. Applied Physics Letters. 1998;73:1991-3.

[18] Green M. Solar cells: operating principles, technology, and system applications. University of New South Wales, Kensington. NSW. 1998;2033.

[19] Honsberg CB, Cotter JE, McIntosh KR, Pritchard SC, Richards BS, Wenham SR. Design strategies for commercial solar cells using the buried contact technology. IEEE Transactions on electron devices. 1999;46:1984-92.

[20] Jackson E. Areas for improvement of the semiconductor solar energy converter. Trans Intern Conf on the Use of Solar Energy-The Scientific Basis1955. p. 122.

[21] Kirk A, Cardwell D, Wood J, Wibowo A, Forghani K, Rowell D, et al. Recent progress in epitaxial lift-off solar cells. 2018 IEEE 7th World Conference on Photovoltaic Energy Conversion (WCPEC)(A Joint Conference of 45th IEEE PVSC, 28th PVSEC & 34th EU PVSEC): IEEE; 2018. p. 0032-5.

[22] King R, Sherif R, Law D, Yen J, Haddad M, Fetzer C, et al. New horizons in III-V multijunction terrestrial concentrator cell research. Proceedings of the 21st European Photovoltaic Solar Energy Conference and Exhibition (Dresden, Germany, 2006)2006.

[23] Barnham K, Duggan G. A new approach to high-efficiency multi-band-gap solar cells. Journal of Applied Physics. 1990;67:3490-3.

[24] Barnham K, Braun B, Nelson J, Paxman M, Button C, Roberts J, et al. Short-circuit current and energy efficiency enhancement in a low-dimensional structure photovoltaic device. Applied Physics Letters. 1991;59:135-7.

[25] Hubbard SM, Bailey CG, Aguinaldo R, Polly S, Forbes DV, Raffaelle RP. Characterization of quantum dot enhanced solar cells for concentrator photovoltaics. 2009 34th IEEE Photovoltaic Specialists Conference (PVSC): IEEE; 2009. p. 000090-5.

[26] Chowdhury S, Islam MM, Rahman MM, Debnath MK, Hossain S. Designing and Analysis of Lightweight InGaN/GaN PV Cell.

[27] Ross RT, Nozik AJ. Efficiency of hot-carrier solar energy converters. Journal of Applied Physics. 1982;53:3813-8.

[28] Schaller RD, Klimov VI. High efficiency carrier multiplication in PbSe nanocrystals: implications for solar energy conversion. Physical review letters. 2004;92:186601.

[29] Ellingson RJ, Beard MC, Johnson JC, Yu P, Micic OI, Nozik AJ, et al. Highly efficient multiple exciton generation in colloidal PbSe and PbS quantum dots. Nano letters. 2005;5:865-71.

[30] Shvarts M, Chosta O, Kochnev I, Lantratov V, Andreev V. Radiation resistant AlGaAs/GaAs concentrator solar cells with internal Bragg reflector. Solar Energy Materials and Solar Cells. 2001;68:105-22.

[31] Johnson D, Ballard I, Barnham K, Bishnell D, Connolly J, Lynch M, et al. Advances in Bragg stack quantum well solar cells. Solar Energy Materials and Solar Cells. 2005;87:169-79.

[32] Wang D-X, Ferguson IT, Buck JA. GaN-based distributed Bragg reflector for high-brightness LED and solid-state lighting. Applied optics. 2007;46:4763-7.

[33] Jellison Jr G, Modine F, Doshi P, Rohatgi A. Spectroscopic ellipsometry characterization of thin-film silicon nitride. Thin Solid Films. 1998;313:193-7.

[34] Chitre S. A high volume cost efficient production macrostructuring process. 13th Photovoltaic Specialists Conference1978. p. 152-4.

[35] Serreze H. Optimizing solar cell performance by simultaneous consideration of grid pattern design and interconnect configuration. 13th IEEE PVSC, 1978. 1978;609.

[36] Flat A, Milnes A. Optimization of multi-layer front-contact grid patterns for solar cells. Solar energy. 1979;23:289-99.

[37] Mäckel H, Lüdemann R. Detailed study of the composition of hydrogenated SiN x layers for high-quality silicon surface passivation. Journal of Applied Physics. 2002;92:2602-9.

[38] Jang JS, Park SJ, Seong TY. Effects of surface treatment on the electrical properties of Ohmic contacts to (In) GaN for high performance optical devices. physica status solidi (a). 2002;194:576-82.

[39] Von Roos O. A simple theory of back surface field (BSF) solar cells. Journal of Applied Physics. 1978;49:3503-11.

[40] Sopori B, Deng X, Benner J, Rohatgi A, Sana P, Estreicher S, et al. Hydrogen in silicon: A discussion of diffusion and passivation mechanisms. Solar Energy Materials and Solar Cells. 1996;41:159-69.

[41] Li SS. Semiconductor physical electronics: Springer Science & Business Media; 2012.

[42] Dahal R, Li J, Aryal K, Lin J, Jiang H. InGaN/GaN multiple quantum well concentrator solar cells. Applied Physics Letters. 2010;97:073115.

[43] Yamamoto A, Islam MR, Kang TT, Hashimoto A. Recent advances in InN-based solar cells: status and challenges in InGaN and InAlN solar cells. physica status solidi c. 2010;7:1309-16.

[44] Schiller E, Sy BS. Le pompage photovoltaïque, manuel de cours à l'intention des ingénieurs et des techniciens. IEPF/Université d'Ottawa/EIER/Crepa. 1998.

[45] Djeroud S. Caractérisation morphologique et optoélectronique des cellules solaires (a-Si: H). Mémoire de magistère, Université Oran. 2010.

Chapitre III

Model physique et outil de simulation

Introduction :

La simulation numérique de structures cellules solaires est un outil d'analyse et d'étude incontournable pour le développement de la technologie photovoltaïque. Elle permet de prédire les comportements et les performances des cellules solaires avant leur fabrication et de visualiser des phénomènes physiques difficilement observables intervenant dans le fonctionnement du composant, tels que les phénomènes de photo-génération et de recombinaison des porteurs et la distribution du champ électrique. En outre, la modélisation et la simulation numérique des cellules solaires permettent de réduire considérablement les cycles d'élaboration, de définir des objectifs technologiques précis afin de minimiser les coûts de développement. Pour ce faire, il est très important que les modèles physiques utilisés, soient les plus réalistes possibles. Ces modèles doivent donc rigoureusement reposer sur des paramètres expérimentalement réalisables.

III.1 Généralité sur le Logiciel Silvaco Tcad et modèles utilisés :

Dans ce chapitre nous allons faire une présentation du logiciel SILVACO, utilisé pour mener à bien nos simulations. La première partie est consacrée à la présentation des modèles physiques utilisés pour décrire les structures de cellules solaires. La deuxième partie est consacrée à la description des méthodes permettant de les optimiser. Enfin, dans la dernière partie, les outils informatiques utilisés pour la simulation et l'optimisation des structures de cellules solaires seront présentés

III.2 Modèle dérive-diffusion :

Il existe un certain nombre de modèles physiques utilisés pour décrire le transport des porteurs de charges (électrons et trous) dans les semi-conducteurs. Ces modèles sont basés généralement sur la résolution de l'équation de transport de Boltzmann. Cette équation décrit l'évolution de la fonction de distribution des porteurs de charges (*f*) qui dépend de la position dans l'espace *r* , du vecteur d'onde *k* et du temps *t* : *f* (*r*,*k*, *t*) [1-3].

Cette équation s'écrit :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v\Delta_r f + \frac{qE}{\hbar}\Delta_k f = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{Collisions} \qquad \text{(III.1)}$$

où - *f* représente la fonction de distribution, une notation simplifiée pour *f* (*r*,*k*, *t*).

- *q* est la charge électronique élémentaire.
- E est le champ électrique.
- $\hbar$ est la constante de Planck réduite.
- *v* représente la vitesse des porteurs.

• Le terme $\frac{\partial f}{\partial t}$: traduit la variation de la fonction de distribution dans le temps.

• Le terme $v.\nabla_r f$: traduit l'influence des phénomènes de diffusion qui sont proportionnels aux gradients de concentration des porteurs.

• Le terme $\frac{qE}{\hbar}\nabla_k f$: traduit l'action des forces extérieures imposées aux particules comme le champ électrique.

• Le terme $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{Collisions}$: traduit les interactions et les collisions entre les porteurs de charges et les collisions des porteurs avec les impuretés et les défauts cristallins.

Dans le cas où le système est à l'équilibre thermique correspondant à la température T (aucune force n'est appliquée), la fonction de distribution est donnée par l'équation III.2.

On dit que le système obéit à la statistique de Fermi-Dirac[1].

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{1+exp\left(\frac{\varepsilon - E_F}{k_B T}\right)} \qquad \text{(III.2)}$$

où E_F est le niveau de fermi et k_B est la constante de Boltzmann. $F(\varepsilon)$ représente la probabilité qu'un état électronique disponible d'énergie ε soit occupé par un électron. Dans le cas où la différence ε-E_F est très grande devant k_BT, l'équation (III.2) se simplifie et on en constate que le terme en exponentiel est largement supérieur à 1. La fonction de distribution devient donc :

$$f(\varepsilon) = exp\left(\frac{E_F - \varepsilon}{k_B T}\right) \qquad \text{(III.3)}$$

Ici, on dit que le système obéit à la statistique de Boltzmann[4, 5]. Ainsi, pour déterminer la répartition des porteurs de charges sur les niveaux d'énergie permis dans le matériau, on peut utiliser soit la statistique de Fermi-Dirac (équation III.2) soit la statistique de Boltzmann (équation III.3).

La statistique de Boltzmann s'applique dans le cas où la différence ε-EF est sensiblement supérieure à k_BT. C'est typiquement dans le cas où le niveau de dopage est "faible" ou "moyen". Dans le cas de semi-conducteurs fortement dopés, la statistique Fermi-Dirac s'applique.

Trouver la solution de cette équation (Équation III.1) a toujours été un domaine de recherche particulièrement important de la physique des semi-conducteurs. Il existe principalement deux approches pour résoudre cette équation : l'approche stochastique par lemodèle Monte-Carlo [6] et l'approche déterministe par le modèle dérive-diffusion.

Le logiciel de simulation utilisé pour la modélisation des structures de cellules solaires est basé sur le modèle dérive-diffusion et la statistique de Fermi-Dirac pour décrire la répartition des porteurs de charges dans le matériau. Ce modèle, comme son nom l'indique, tient compte de la dérive due au champ électrique appliqué au dispositif et du transport de charges causé

par le gradient de concentration des porteurs dans la structure [7]. Il est largement utilisé dans le domaine de la recherche et du développement industriel pour la modélisation des dispositifs à base de semi-conducteurs.

Le modèle dérive-diffusion permet de résoudre une forme simplifiée de l'équation de Boltzmann. Les équations mises en jeu dans ce modèle sont les suivantes : l'équation de Poisson, les équations de continuité (ou équations de conservation du courant) et les équations de transport.

III.2.1 Équation de Poisson :

C'est l'équation qui relie le potentiel électrostatique (ψ) à la densité de charge d'espace (ρ). En généralisant l'équation III.4 pour différentes dimensions, on obtient:

$$\vec{\nabla}.\vec{\epsilon} = \frac{\rho}{\epsilon} \quad \text{où} \quad \vec{\epsilon} = -\vec{\nabla}.\Psi \tag{III.4}$$

III.2.2Équation de continuité :

L'équation générale de continuité des électrons et des trous est donnée par :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q}\vec{\nabla}.\overrightarrow{J_n} + G_n + R_n \tag{III.5}$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{1}{q}\vec{\nabla}.\overrightarrow{J_p} + G_p - R_p \tag{III.6}$$

où n et p sont les concentrations d'électrons et de trous respectivement. J_n et J_p sont les densités du courant des électrons et des trous respectivement. G et R sont les taux de génération et de recombinaison des porteurs. Pour la modélisation des cellules solaires, on travaille dans le régime permanent où la variation par rapport au temps est nulle. Alors, on peut écrire :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q}\vec{\nabla}.\overrightarrow{J_n} + G_n + R_n = 0 \tag{III.7}$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{1}{q}\vec{\nabla}.\overrightarrow{J_p} + G_p - R_p = 0 \tag{III.8}$$

Physiquement, cette équation veut dire que la variation de la densité du courant dans un volume donné est la différence entre le taux de génération et le taux de recombinaison, c'est-à-dire que le nombre de porteurs est conservé. La Figure III.1 explique schématiquement cette équation.

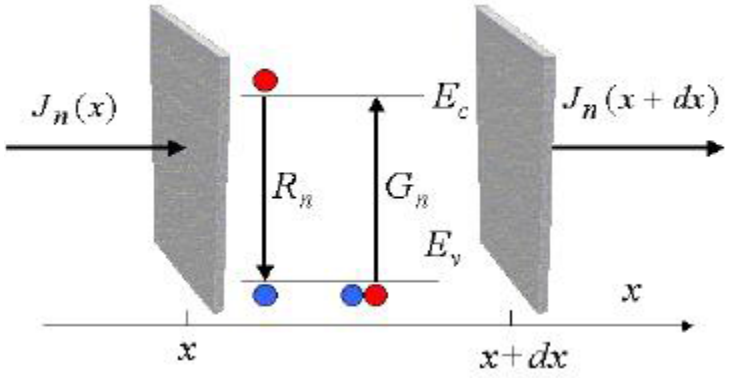


Figure III.1 Explication schématique de l'équation de continuité dans l'état permanent pour les cellules solaires.

III.2.3Équation de transport :

Afin de pouvoir résoudre les équations précédentes, nous avons besoin de trouver une expression pour J_n et J_p. Ces deux grandeurs sont calculées par le modèle dit Drift-Diffusion, et elles sont données par :

$$\vec{J_n} = -n\mu_n \vec{\nabla} E_{fn} \quad \text{(III.9)}$$

$$\vec{J_p} = -p\mu_p \vec{\nabla} E_{fp} \quad \text{(III.10)}$$

Où μ_n et μ_p sont les mobilités respectives des électrons et des trous. E_{fn} et E_{fp} sont les quasi-niveaux de Fermi pour les électrons et pour les trous. A l'équilibre thermodynamique E_{fn} et E_{fp} sont égaux et constants tout au long de la structure, le courant est alors nul. On peut donc en déduire que :

$$n = n_i exp\left(\frac{E_{fi}-E_{fn}}{kT}\right) \quad \text{(III.11)}$$

$$p = n_i exp\left(-\frac{E_{fi}-E_{fp}}{kT}\right) \quad \text{(III.12)}$$

Ce qui nous donne :

$$E_{fn} = E_i - kTln\left(\frac{n}{n_i}\right) \quad \text{(III.13)}$$

$$E_{fp} = E_i - kTln\left(\frac{p}{n_i}\right) \quad \text{(III.14)}$$

en substituant l'Equation. (III.13) et l'Equation. (III.14) en l'Equation. (III.9) et l'Equation. (4.10), on a:

$$\overrightarrow{J_n} = -p\mu_n \vec{\nabla} E_{fi} + \mu_n kT \vec{\nabla}\, n - n\mu_n kT \vec{\nabla} \ln(n_i) \quad \text{(III.15)}$$

$$\overrightarrow{J_p} = -p\mu_p\vec{\nabla}E_{fi} + \mu_p kT\vec{\nabla}\, n - p\mu_p kT\vec{\nabla}\ln(n_i) \quad \text{(III.16)}$$

Le dernier terme est nul dans le cas où l'énergie de la bande interdite ne varie pas en fonction de la position, comme par exemple l'effet de rétrécissement du gap.

Sachant que :

$$\overrightarrow{E_{fi}} = q.\overrightarrow{\nabla}\psi \quad \text{(III.17)}$$

Avec ψ le potentiel électrostatique (équation .III.4). Nous pouvons réécrire l'équation. (III.15) et l'équation. (III.16) comme suit :

$$\overrightarrow{J_p} = \overbrace{qp\mu_p\vec{\varepsilon}} - \overbrace{qD_p\vec{\nabla}p} \quad \text{(III.18)}$$

$$\vec{J}_p = qp\mu_p\vec{\varepsilon} - qD_p\vec{\nabla}p \quad \text{(III.19)}$$

Où D_n et D_p sont les coefficients de diffusion des électrons et des trous et ils sont donnés par :

$$D_{n,p} = \frac{kT}{q}\mu_{n,p} \quad \text{(III.20)}$$

Dans les équations. (III.18) et. (III.19), le premier terme est lié au déplacement des porteurs par le champ électrique (en anglais Drift), et le deuxième terme est lié à la diffusion des porteurs. C'est la raison pour laquelle ce modèle est appelé le modèle de Drift-Diffusion. A l'équilibre thermodynamique, où J_n et J_p sont nuls, les deux termes sont égaux et s'opposent. En résolvant numériquement le jeu d'équations (III.4), (III.7), (III.8), (III.18) et (III.19), logiciel ATLAS trouve la solution convergente pour n, p et ψ pour toute la structure. Deux critères sont utilisés par ATLAS afin de déterminer la convergence :

1) l'erreur entre les deux membres de l'équation ;

2) l'erreur entre deux itérations successives.

III.3Modèles physiques :

ATLAS comprend plusieurs dizaines de modèles pour décrire divers phénomènes physiques. Dans cette section, nous allons aborder seulement quelques modèles surtout ceux qui ont été utilisés dans les simulations de la cellule solaire.

III.3.1 Mobilité :

ATLAS fournit plusieurs modèles de la mobilité des porteurs, mais celui qui a été utilisé dans nos simulations est celui qui est basé sur le travail de [8]. La mobilité des porteurs est alors dépendante de la température et de la concentration des dopants.

$$\mu_{n,p} = \mu 1_{n,p}\left(\frac{T}{300}\right)^{\propto n,p} + \frac{\mu 2_{n,p}\left(\frac{T}{300}\right)^{\beta n,p} - \mu 2_{n,p}\left(\frac{T}{300}\right)^{\propto n,p}}{1+\left(\frac{T}{300}\right)^{\gamma n,p}.\left(\frac{N_{totale}}{N_{n,p}^{ref}}\right)^{\delta n,p}} \quad \text{(III.21)}$$

où μ1, μ2, α, β, γ, δ et N_{ref} sont des paramètres d'ajustement. N_{total} est la concentration nette du dopage. Si on suppose que la température est à 300 K, l'équation précédente sera simplifiée:

$$\mu_{n,p} = \mu 1_{n,p} + \frac{\mu 2_{n,p} - \mu 2_{n,p}}{1+.\left(\frac{N_{totale}}{N_{n,p}^{ref}}\right)^{\delta n,p}} \quad \text{(III.22)}$$

III.3.2Recombinaison :

Sous illumination continue, les porteurs libres photo-générés tentent à revenir à l'état initial par un processus de recombinaison. Ce processus peut être divisé en deux catégories : recombinaison surfacique ou interfaciale et recombinaison dans le volume du matériau. Cette dernière consiste souvent en trois types : la recombinaison SRH (Shockley-Read-Hall)
[9, 10], La recombinaison radiative et la recombinaison Auger. La recombinaison totale est la somme de ces trois types. La Figure III.2montre un schéma du processus de chaque recombinaison.

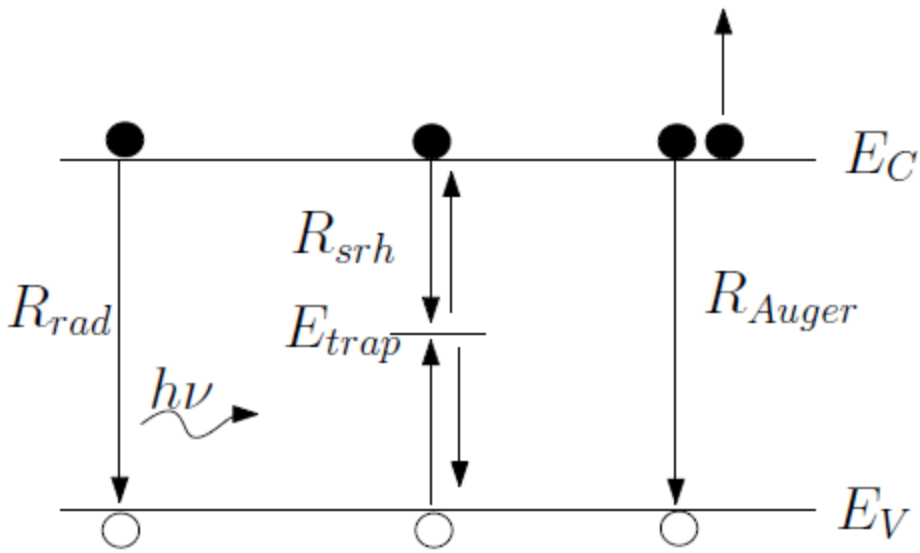


Figure III.2Recombinaisons radiatives, SRH, Auger

Recombinaison SRH : Cette recombinaison fait intervenir des niveaux énergétiques dans la bande interdite dus aux défauts, et elle est modélisée par :

$$R_{srh} = \frac{np - n_i^2}{\tau_n^{srh}\left[n + n_i.exp\left(\frac{E_{trap}}{kT}\right)\right] + \tau_p^{srh}\left[p + n_i.\exp\left(\frac{-E_{trap}}{kT}\right)\right]} \quad \text{(III.23)}$$

Où τ_n^{srh} et τ_p^{srh} sont les durées de vie des électrons et des trous respectivement. E_{trap} est le niveau d'énergie dans la bande interdite par rapport à la bande de valence. τ_n^{srh} et τ_p^{srh} peuvent être définis comme constantes, ou dépendants de la concentration de dopage.

$$\tau_n^{srh} = \frac{\tau_{n0}^{srh}}{A_n + B_n\left(\frac{N_{totale}}{N_n^{srh}}\right) + + C_n\left(\frac{N_{totale}}{N_n^{srh}}\right)^{E_n}} \quad \text{(III.24)}$$

$$\tau_p^{srh} = \frac{\tau_{p0}^{srh}}{A_p + B_p\left(\frac{N_{totale}}{N_p^{srh}}\right) + + C_p\left(\frac{N_{totale}}{N_p^{srh}}\right)^{E_p}} \quad \text{(III.25)}$$

Où N_{totale} est la concentration nette de dopage. τ_{n0}^{srh} et τ_{p0}^{srh} sont les durées de vie initiales. $A_{n,p}$, $B_{n,p}$, $C_{n,p}$, $E_{n,p}$et$N_{n,p}^{srh}$ sont des paramètres d'ajustement.

Recombinaison radiative :

C'est la transition d'un électron de la bande de conduction vers la bande de valence en émettant un photon. Elle est donnée par :

$$R_{rad} = C_{rad} = (np - n_i^2) \quad \text{(III.26)}$$

Où C_{rad} est le coefficient de recombinaison radiative, exprimé en [cm^3/s]. Cette recombinaison est plus dominante dans les matériaux à gap direct que dans les matériaux à gap indirect.

Recombinaison Auger :

C'est la transition de trois particules, ou deux particules se recombinent en donnant de l'énergie à la troisième. Elle est donnée par :

$$R_{rad} = C_{Aug}^{N}.n(np - n_i^2) + C_{Aug}^{p}.p(np - n_i^2) \quad \text{(III.27)}$$

Où C_{Aug}^{n} et C_{Aug}^{p} sont les coefficients de recombinaison Auger des électrons et des trous respectivement. Ce type de recombinaison est plus dominant dans les matériaux à gap indirect que dans les matériaux à gap direct. La recombinaison totale est la somme des trois types de recombinaison :

$$R_{totale} = R_{srh} + R_{rad} + R_{Auger} \quad \text{(III.28)}$$

Recombinaison surfacique : La recombinaison aux interfaces, qui fait partie de la recombinaison SRH, peut être encore plus importante que la recombinaison dans le matériau. Cette recombinaison est donnée par l'équation suivant sauf que les durées de vie sont calculées par :

$$\frac{1}{\tau_n} = \frac{1}{\tau_n^i} + \frac{d^i}{A^i}.S_n \quad \text{(III.29)}$$

$$\frac{1}{\tau_n} = \frac{1}{\tau_p^i} + \frac{d^i}{A^i}.S_p \quad \text{(III.30)}$$

où $\tau_{n,p}{}^{i}$ sont les durées de vie des électrons et des trous calculées au nœud i dans le maillage. A^i et d^i, sont l'aire et la largeur de maille au nœud i. Sn et Sp sont les vitesses de recombinaison surfacique des électrons et des trous respectivement.

III.4 Optique :

Afin de déterminer le comportement optique de la cellule solaire, nous avons besoin de l'indice de réfraction (n) et du coefficient d'extinction (k) ou du coefficient d'absorption (α) des matériaux constituant la cellule. ATLAS donne la possibilité de définir ces paramètres par plusieurs voies : 1) Intégration directe des données ; 2) Définition des modèles en utilisant le langage C; ou 3) Utilisation des modèles prédéfinis dans ATLAS. Pour les matériaux dont les n et k sont connus et peuvent être trouvés facilement, comme le Silicium, nous utilisons des fichiers contenant les données. Par contre, pour les matériaux dont les paramètres sont moins accessibles, nous utilisons des modèles prédéfinis dans ATLAS, comme le modèle d'Adachi[11], pour calculer n :

$$n(\omega) = \sqrt{A\left(\frac{h\omega}{E_g}\right)^{-2}\left[2 - \sqrt{1+\frac{h\omega}{E_g}} - \sqrt{1+\frac{h\omega}{E_g}}\right] + B} \quad \text{(III.31)}$$

où ω est la fréquence optique, A et B sont des paramètres d'accordement et dépendent de la composition dans les alliages, pour l'InGaN, par exemple :

$$A(x)=9.827(1+x)-5.37x \quad \text{(III.32)}$$

$$B(x)=2.736(1+x)-2.19x \quad \text{(III.33)}$$

Où *x* est la composition d'indium.

III.5Effet Tunnel :

Trois types d'effet tunnel ont été utilisés dans nos simulations :

1) Tunnel inter-bandes ;

2) Tunnel intra-bandes ;

3) Tunnel au-travers d'une hétérojonction.

Le premier est utilisé pour la jonction tunnel fortement dopée dans les cellules, alors que le deuxième est utilisé pour les structures MPQ ou semi-bulk. Quant au troisième, il est utilisé pour les hétérojonctions n-GaN/n-InGaN.

Tunnel inter-bandes : L'effet tunnel inter-bandes représente le passage d'un porteur libre (électron ou trou) d'une bande à l'autre entre deux semi-conducteurs de types différents (n ou p), comme montré dans la Figure III.3. Le modèle "Non-local Band-to-Band tunneling", prend en compte la variation spatiale du champ électrique, contrairement aux modèles dits locaux où une valeur fixe est attribuée au champ électrique à travers la jonction. Le calcul de ce modèle est plus complexe que dans le cas des modèles locaux, mais il est plus précis. Le modèle intégré dans ATLAS utilise la formule suivante pour calculer la densité de courant tunnel.

$$J_{tunnel} = \frac{q}{\pi\hbar}\iint T(E)[f_1(E+E_T) - f_r(E+E_T)]\rho(E_T)dE_T dE \qquad \text{(III.34)}$$

où E et E_T sont les énergies verticales et transversales respectivement. T(E) est la probabilité tunnel à une énergie verticale Eρ(E_T)) est la densité d'états 2D par rapport à l'énergie transversale. Elle est donnée par :

$$\rho(E_T) = \frac{\sqrt{m_h m_e}}{2\pi h^2} \qquad \text{(III.35)}$$

où m_e et m_h sont les masses effectives des électrons et des trous, respectivement. Cette densité d'états est indépendante de l'énergie. f_l et f_r sont les fonctions de distribution de Fermi.

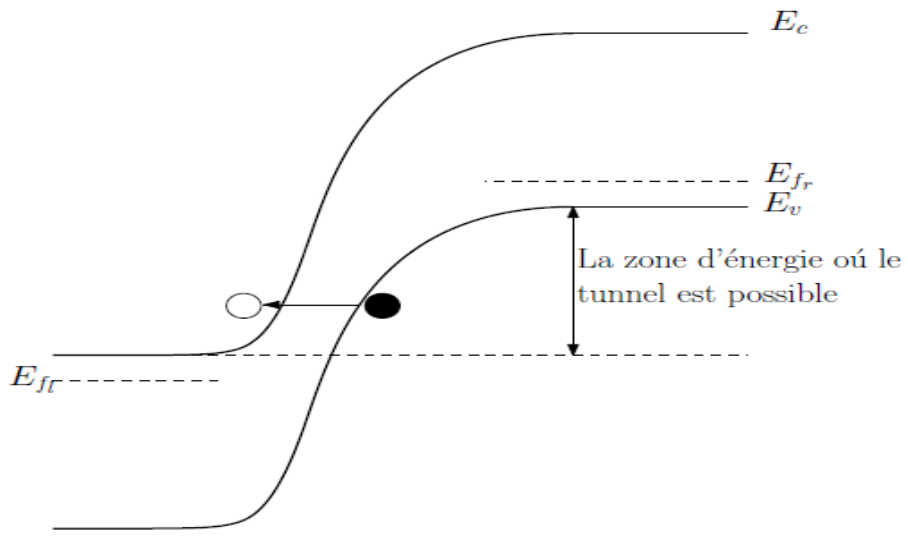


Figure III.3Présentation schématique du processus tunnel de bande à bande

En utilisant le quasi-niveau de Fermi de gauche (E_{fl}) et celui de droite (E_{fr}), respectivement. Ces fonctions sont données par :

$$f_l = \frac{1}{1+\exp\left(\frac{E+E_T-E_{fi}}{kT}\right)} \quad \text{(III.36)}$$

$$f_r = \frac{1}{1+\exp\left(\frac{E+E_T-E_{fr}}{kT}\right)} \quad \text{(III.37)}$$

Ce qui signifie que quand E_{fl} et E_{fr} sont égaux, la densité de courant tunnel est nulle. Ensuite, cette densité de courant est intégrée dans les équations de continuité.

Tunnel intra-bandes : Cet effet tunnel représente le passage d'un porteur libre au travers une barrière entre deux couches de semi-conducteurs en restant toujours dans la même bande (conduction ou valence). Ce phénomène est calculé par la formule basée sur le travail de Price et Radcliffe [12], et qui est donnée par :

$$J_{tunnel} = \frac{qkTm_{e.h}}{2\pi^2 h^3} \int T(E)\, ln\left[\frac{1+\exp\left(\frac{E_{fr}-E}{kT}\right)}{1+\exp\left(\frac{E_{fr}-E}{kT}\right)}\right] dE \quad \text{(III.38)}$$

Où E est l'énergie du porteur incident. Ce modèle dite est aussi non-local. De même que dans le cas précèdent, cette densité de courant est intégrée dans les équations de continuité aux nœuds qui se trouvent aux bords de la barrière.

Tunnel d'une hétérojonction : Le modèle utilisé dans nos simulations pour le tunnel à travers une hétérojonction abrupte est le modèle d'émission thermoïonique-champ (ou en anglais Thermionic-Field Emission TFE ou TF). Ce modèle, intégré dans ATLAS, est basé sur le travail de Yang et al[13]. On suppose une hétérojonction comme dans la Figure III.4

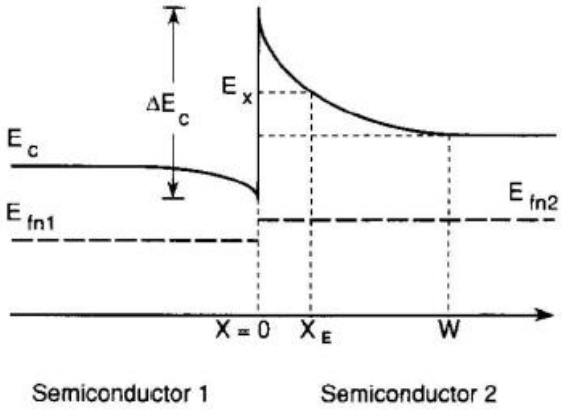


Figure III.4: Diagramme de bande de conduction d'une hétérojonction abrupte. E_{fn} est le quasi-niveau de Fermi[13].

La densité de courant nette des électrons est donnée par :

$$J_n = J_{n1} - J_{n2} = \frac{-A*T}{k}\int_{E_{min}}^{\infty} f_1(E_x)\, T(E_x)\, dE_x + \frac{A*T}{k}\int_{E_{min}}^{\infty} f_2(E_x)\, T(E_x)\, dE_x \quad \text{(III.39)}$$

Où - $T(E_x)$ est la probabilité du tunnel à une énergie E_x,

- W est la largeur de la barrière,
- $f_{1,\ 2}$ sont les fonctions de distribution de Boltzmann pour la zone 1 et 2, elles sont données par:

$$f_1(E_x) = \exp\left(-\frac{E_x - E_{fn1}}{kT}\right) \quad \text{(III.40)}$$

$$f_2(E_x) = \exp\left(-\frac{E_x - E_{fn2}}{kT}\right) \quad \text{(III.41)}$$

A^* est la constante de Richardson [14]. Elle est donnée par :

$$A^*_{e,h} = \frac{4\pi q k^2 m_{e,h}}{h^3} \quad \text{(III.42)}$$

Sachant que $T(E_x)$ pour $E_x > E_c(0^+)$ est égal à 1 ; nous pouvons diviser l'intégrale comme suit :

$$J_{n1} = \frac{-A^*T}{k}\int_{E_{min}}^{\infty} f_1\,(E_x)T(E_x)dfE_x + \frac{A^*T}{k}\int_{E_{c(0)+}}^{\infty} f_1\,(E_x)T(E_x)dfE_x \quad \text{(III.43)}$$

$$J_{n2} = \frac{-A^*T}{k}\int_{E_{min}}^{\infty} f_2\,(E_x)T(E_x)dfE_x + \frac{A^*T}{k}\int_{E_{c(0)+}}^{\infty} f_2\,(E_x)T(E_x)dfE_x \quad \text{(III.44)}$$

Ce qui nous donne :

$$J_{n1} = -qV_{n1}(1+\delta)n_1 exp\left(\frac{-\Delta E_c}{kT}\right) \quad \text{(III.45)}$$

$$J_{n2} = -qV_{n2}(1+\delta)n_2 \quad \text{(III.46)}$$

Où v_n est la vitesse thermique des électrons, n est la densité des électrons :

$$J_{n1,2} = \frac{-A^*T^2}{kN_{c1,2}} \quad \text{(III.47)}$$

$$n_{1,2} = N_{n1,2}\, exp\left(\frac{E_{c1,2} - E_{fn1,2}}{kT}\right) \quad \text{(III.48)}$$

Et δ représente la contribution due au tunnel :

$$\delta = \frac{1}{kT} exp\left(\frac{E_c(0^+)}{kT}\right) \int_{E_{min}}^{E_c(0)^+} exp\left(\frac{-E_x}{kT}\right) T(E_x) dE_x \quad \text{(III.49)}$$

De la même façon, la densité de courant nette des trous est donnée par :

$$J_p = -qV_{p1}(1+\delta)p_1 exp\left(\frac{-\Delta E_c}{kT}\right) - qV_{p2}(1+\delta)p_2 \quad \text{(III.50)}$$

où p est la concentration des trous, v_p est la vitesse thermique des trous.

III.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 [15, 16]:

1. Les limites des bandes de valence et de conduction développent des queues et pénètrent dans la bande interdite.

2. Si la concentration de l'impureté donneuse est élevée, les niveaux énergétiques de ces impuretés s'élargissent en une bande d'impuretés qui chevauche avec la bande de conduction.

3. Une concentration d'atomes donneurs très élevée provoque une variation spatiale de la largeur de la bande interdite, résultat d'une déformation du réseau cristallin. En conséquence, toutes ces modifications entraînent une réduction apparente de la largeur de bande interdite. Ce phénomène est plus connu sous le nom de « Bandgap-Narrowing ».

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

La formule de Bennett-Wilson [17]est donnée par :

$$\Delta E_g(N) = \begin{cases} -E_{bgn}\left[\log\left(\frac{N}{N_{bgn}}\right)\right]^2 & Si \quad N \geq N_{bgn} \\ 0 & Si \quad N < N_{bgn} \end{cases} \quad \text{(III.51)}$$

Et la formule de Del-Alamo est donnée par :

$$\Delta E_g(N) = \begin{cases} -E_{bgn}\left[\log\left(\frac{N}{N_{bgn}}\right)\right] & Si \quad N \geq N_{bgn} \\ 0 & Si \quad N < N_{bgn} \end{cases} \qquad \text{(III.52)}$$

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 III.1représente 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 III.1*Paramètres utilisés par défaut dans Silvaco pour les modèles de Benett-Wilson et Del-Alamo.*

II.3.1 L'outil de simulation AtlasTM (SILVACOTM) :

III.7.1Environnement de simulation TCAD :

Silvaco est une entreprise spécialisée dans la création de logiciels de simulation et cible presque tous les aspects de la conception électronique moderne. L'entreprise offre des capacités de modélisation et de simulation allant de simples circuits jusqu'à la fabrication VLSI. Ils utilisent un grand nombre d'options de modélisation différentes. Les outils permettent de créer des modèles complexes et des vues structurelles 3D.

Les phénomènes modélisés vont de la simple conductivité électrique à l'analyse thermique, en passant par les effets du rayonnement et du laser, avec une grande variété de processus détaillés de croissance des couches et de propriétés des matériaux (mobilités, paramètres de recombinaison, coefficients d'ionisation, paramètres optiques) qui ajoutent à la précision de la simulation.

Parmi les logiciels de Silvaco, Atlas est une bonne combinaison d'analyses sophistiquées en profondeur des dispositifs en 2D ou 3D. En plus de cela, il modifie l'accent mis sur le modeleur de la conception réelle et détermine tous les détails de fabrication. Comme le reste des applications TCAD, il est basé sur des centaines de publications largement acceptées, et de nombreuses recherches ont vérifié leur exactitude et leur fiabilité.

III.7.2 Logiciel de simulation Atlas Silvaco :

Atlas est un logiciel qui simule des dispositifs semi-conducteurs bidimensionnels et tridimensionnels. L'environnement d'exécution DeckBuild a reçoit les fichiers d'entrée. Dans les fichiers d'entrée, Silvaco Atlas est appelé pour exécuter le code. Enfin, pour visualiser le résultat de la simulation, TonyPlot est utilisé. De plus, des fichiers journaux de sortie ont été produits. Les entrées et sorties de l'Atlas Silvaco sont illustrées à la figure III.5.

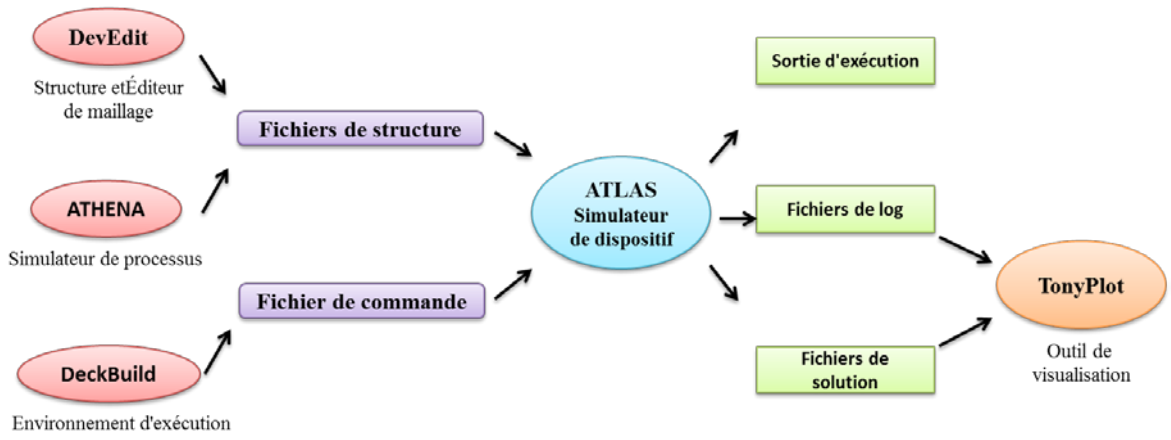


Figure III.5: Entrées et sorties de logiciel Atlas [18]

III.7.3DECKBUILD :

Deckbuild est le programme principal qui exécute la simulation et appelle les programmes associés (voir la figure III.6). Deckbuild utilise le code en ligne de commande pour désigner ce qu'il faut exécuter et comment. Pour exécuter Atlas:

- **GO ATLAS**

Ceci exécute le programme Atlas dans Deckbuild. Une fois Atlas lancé, l'étape suivante consiste à régler les paramètres de dispositif. Atlas a un ordre spécifique dans lequel les instructions doivent être placées (voir Figure III.7), sinon le programme risque de ne pas

fonctionner correctement. Même s'il fonctionne, il est possible que certains paramètres ne soient pas utilisés, ce qui entraîne des résultats erronés. Généralement, le format des commandes est :

<STATEMENT><PARAMETER>=<VALUE>

Les instructions peuvent avoir plus d'un paramètre défini. Deckbuild fournit de nombreux exemples intégrés de différents dispositifs qui permettent à un utilisateur d'exécuter la simulation et de visualiser les résultats.

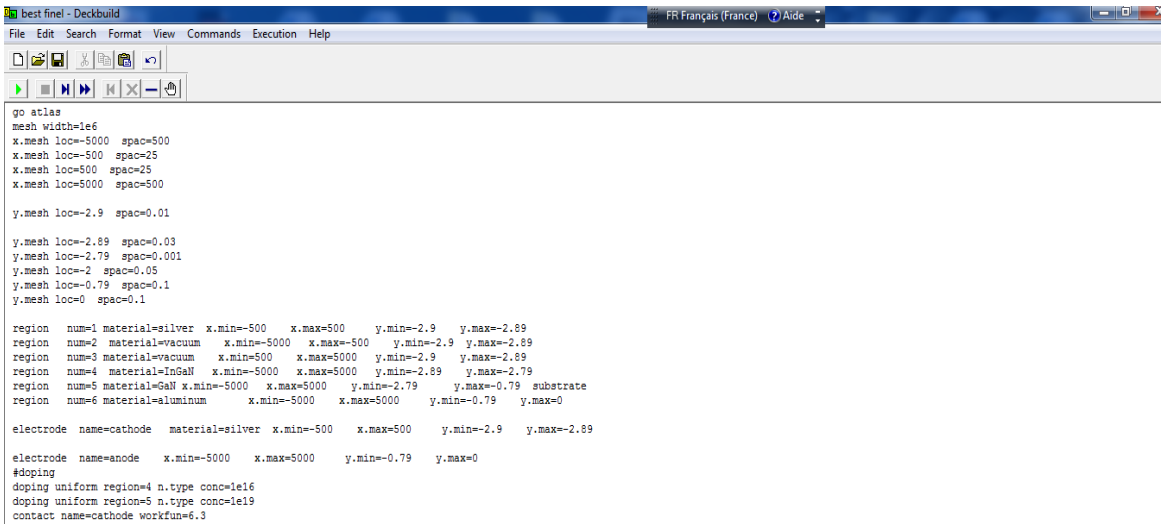


Figure III.6: Capture d'écran de Deckbuild.

Group	Statements
1. Structure Specification	MESH REGION ELECTRODE DOPING
2. Material Models Specification	MATERIAL MODELS CONTACT INTERFACE
3. Numerical Method Selection	METHOD
4. Solution Specification	LOG SOLVE LOAD SAVE
5. Results Analysis	EXTRACT TONYPLOT

Figure III.7: Groupes de commandement de l'Atlas avec les déclarations primaires dans chaque groupe.

III.7.4Construction du dispositif :

III.7.4.a Définition du maillage :

Lors de la construction du dispositif à simuler, la première chose à faire est de définir le maillage qui servira de cadre au modèle. Un maillage est une collection de triangles qui recouvre le dispositif (voir Figure III.8). Chaque coin du triangle est appelé " nœud". Les nœuds sont les points où sont calculées les équations utilisées pour résoudre une solution. Lors de l'exécution de simulations pour un dispositif 2D, il y a une limite de 100.000 nœuds et pour un dispositif 3D il y a une limite de 40 000 000 nœuds. Un maillage plus fin donne plus de triangles, ce qui donne plus de nœuds et augmente la résolution de la solution pour donner des résultats plus précis. L'inconvénient est que le plus grand nombre de calculs nécessite une augmentation du temps nécessaire à l'exécution de la simulation. Un maillage plus grossier a l'effet contraire. Moins de triangles, moins de nœuds et moins de précision, mais le temps d'exécution est plus court. La clé de la mise en place d'un maillage est de reconnaître l'endroit où les phénomènes se produisent dans la structure du dispositif (par

exemple notre structure (voir Figure III.8)). Dans ces zones, un maillage plus fin est souhaité afin de ne pas perdre d'informations. Si les triangles sont trop grands et que les caractéristiques du dispositif changent trop, les calculs ne refléteront pas les conditions réelles.

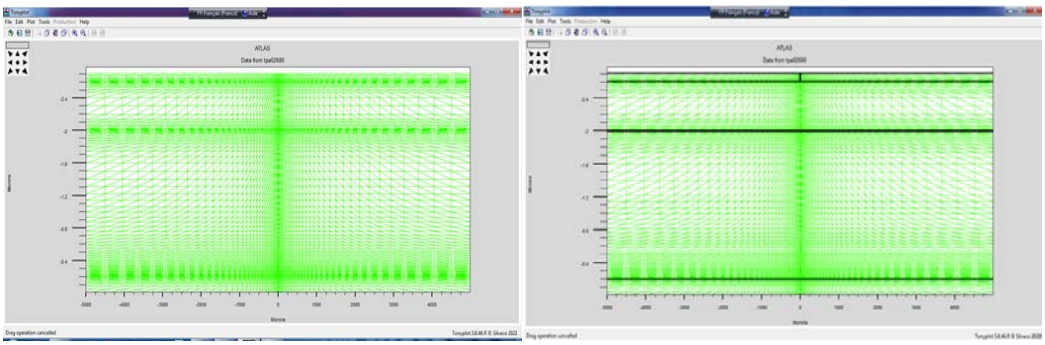


Figure III.8: maillage pour une structure Métal/n-InGaN/n-GaN en2D.

Les instructions suivantes définissent l'emplacement des lignes de maillage dans les directions x, y et z :

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

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

Z.MESH LOCATION=<value> SPACING=<value>

Ces deux instructions de ligne de commandes énoncées précisent l'emplacement de la ligne et l'espacement en microns. Au moins deux énoncés x et deux énoncés y sont nécessaires pour définir le maillage. Si un espacement différent est utilisé, Deckbuild insère automatiquement des lignes supplémentaires pour permettre une transition progressive.

III.7.4.b Définition des régions :

Une fois le maillage défini, l'étape suivante consiste à définir les régions. Une déclaration typique de la région est :

REGION NUMBER=<integer><material_type><position_parameters>

Lors de l'utilisation de la ligne de commande, ces régions sont numérotées, en commençant par 1, jusqu'à un maximum de 1000 pour un dispositif. Si un utilisateur a mal numéroté les régions, Deckbuild les numérote automatiquement avec des numéros consécutifs. Une

numérotation compliquée peut prêter à confusion lors de l'observation des résultats. Le paramètre type de matériau définit le type de matériau pour la région. Les propriétés de nombreux matériaux sont déjà stockées dans le programme. Ils peuvent être modifiés dans une déclaration de matière dans le code une fois que tout le maillage est terminé et que les concentrations de dopage sont définies.

Le paramètre position définit l'emplacement en microns de la région. Une façon de définir l'emplacement consiste à utiliser des instructions x.min, x.max, y.min et y.max ressemblant à ceci:

X.MIN=<location> X.MAX=<location> Y.MIN=<location> Y.MAX=<location>

x.min est la position minimale dans la direction x et x.max est la position maximale dans la direction x. Il en va de même pour l'axe des y. Il convient de noter que l'axe des abscisses commence à zéro à gauche et est maximal à droite, tout comme un système de coordonnées cartésien standard x-y. L'axe des y, cependant, est opposé à ce à quoi on pourrait s'attendre. Le y.min commence à zéro en haut. Il est important de garder à l'esprit la convention des axes car de nombreux aspects du programme dépendent de la position et doivent être précis pour assurer des résultats corrects.

III.7.4.c Définition des électrodes:

Une fois les régions et les matériaux spécifiés, les électrodes peuvent être définies. Il doit y avoir au moins une électrode (qui touche le matériau semi-conducteur) définie pour que le programme fonctionne. Jusqu'à 100 électrodes peuvent être spécifiées, et si l'une des électrodes définies porte le même nom, les électrodes sont considérées comme électriquement connectées. Une déclaration typique d'une électrode est :

ELECTRODE NAME=<electrodename><postion_parameter>

Si aucune coordonnée y n'est donnée, l'électrode est placée en haut du dispositif. Les paramètres en haut, en bas, à droite et à gauche peuvent également être utilisés pour définir l'emplacement.

III.7.4.d. Définition de Dopage :

Les paramètres de dopage sont ensuite spécifiés et se présentent généralement sous la forme suivante :

DOPING <distribution_type><dopant_type><postion_parameter>

Le type de distribution peut être uniforme, gaussienne ou complémentaire de fonction d'erreur. Le type de dopant peut être spécifié en tant que type n ou type p et la quantité de concentration peut être définie. Le paramètre de position peut être spécifié par le numéro de région ou les paramètres minimum / maximum.

III.7.5 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.

III.7.5.a 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 =InGaN EG300=1.51911 PERMITTIVITY=12.548/

AFFINITY=4.75892

MATERIAL MATERIAL =InGaN MUN=4188.75181 MUP=265.48724
MATERIAL MATERIAL =InGaN NC300=1.5077E18 NV300=4.999E19
MATERIAL MATERIAL =InGaN5.8697 = ALATTICE
MATERIAL MATERIAL =InGaN SOPRA=InGan57.nk

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 région et name, respectivement.

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

III.7.5.b Models :

Les modèles physiques sont répartis 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><generalparameter><model dependentparameters>

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.

III.7.5.c. 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

III.8Sélection 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 Méthode. Il existe plusieurs méthodes numériques pour calculer des solutions aux problèmes des dispositifs à semi-conducteur. Trois types de techniques de solution sont utilisés dans le simulateur Silvaco Atlas:

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

La méthode Gummel résout pour chaque inconnues 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 couplées avec convergence quadratique. L'exemple suivant montre L'utilisation de la commande Méthode.

III.8.1METHOD GUMMEL NEWTON :

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

III.9Spécification des solutions :

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

III.9.1 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.

III.9.2 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 photo-génération 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 photo-génération AC, MULT.F est la fréquence à être multiplié par FSTEP, NFSTEPS est le nombre de fois que la fréquence est incrémenté par FSTEP.

III.9.3 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

III.10 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.

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 III.9 montre la courbe de l'échantillon IV tracée par TonyPlot.

EXTRACT NAME="IV" curve (V."anode", I."cathode") /

OUTFILE="IVcurve.dat"

TONYPLOT IVcurve.dat

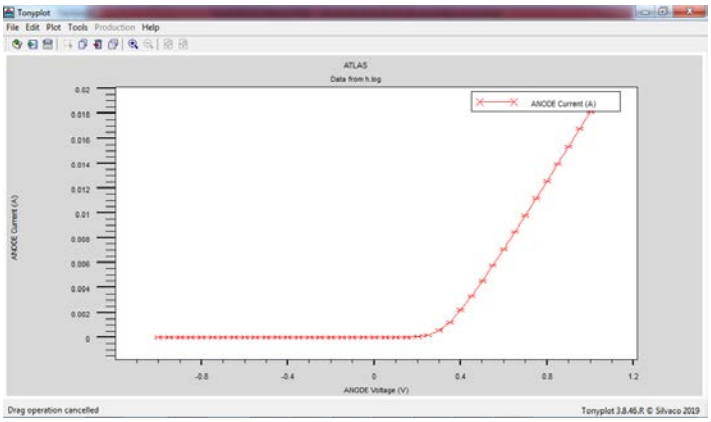


Figure III.9 : Tracé la courbe I-V par Tonyplot.

III.11 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. 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.

Référence:

[1] Nelson JA. The physics of solar cells: World Scientific Publishing Company; 2003.

[2] Hagelaar G, Pitchford L. Solving the Boltzmann equation to obtain electron transport coefficients and rate coefficients for fluid models. Plasma Sources Science and Technology. 2005;14:722.

[3] Fonash S. Solar cell device physics: Elsevier; 2012.

[4] Joyce W, Dixon R. Analytic approximations for the Fermi energy of an ideal Fermi gas. Applied Physics Letters. 1977;31:354-6.

[5] Dutton W, Yu Z. SEDAN III, A Generalized Electronic Material Device Analysis Program (July 1985) Integrated Circuits Laboratory. Stanford University.

[6] Hammersley J. Monte carlo methods: Springer Science & Business Media; 2013.

[7] Selberherr S. Analysis and simulation of semiconductor devices: Springer Science & Business Media; 2012.

[8] Caughey DM, Thomas R. Carrier mobilities in silicon empirically related to doping and field. Proceedings of the IEEE. 1967;55:2192-3.

[9] Shockley W, Read Jr W. Statistics of the recombinations of holes and electrons. Physical review. 1952;87:835.

[10] Hall RN. Electron-hole recombination in germanium. Physical review. 1952;87:387.

[11] Piprek J. Semiconductor optoelectronic devices: introduction to physics and simulation: Elsevier; 2013.

[12] Price PJ, Radcliffe JM. Esaki tunneling. IBM Journal of Research and Development. 1959;3:364-71.

[13] Yang K, East JR, Haddad GI. Numerical modeling of abrupt heterojunctions using a thermionic-field emission boundary condition. Solid-state electronics. 1993;36:321-30.

[14] Crowell C. The Richardson constant for thermionic emission in Schottky barrier diodes. Solid-state electronics. 1965;8:395-9.

[15] Lindholm F, Li S, Sah C. Fundamental limitations imposed by high doping on the performance of pn junction silicon solar cells. 11th Photovoltaic Specialists Conference1975. p. 3-12.

[16] Del Alamo J, Swirhun S, Swanson R. Measuring and modeling minority carrier transport in heavily doped silicon. Solid-state electronics. 1985;28:47-54.

[17] Bennett HS, Wilson CL. Statistical comparisons of data on band-gap narrowing in heavily doped silicon: Electrical and optical measurements. Journal of Applied Physics. 1984;55:3582-7.

[18] Int S. ATLAS user's manual a 2D numerical device simulator, 2004. 2016.

Chapitre IV

Simulation et optimisation

Introduction :

Dans ce quatrième chapitre, nous présentons les simulations de cellules solaires Schottky à base d'InGaN effectuées à l'aide du logiciel Atlas de Silvaco. Nous avons étudié les performances de cellules Schottky avec différentes structures, ainsi que l'influence des paramètres. On peut trouver dans la littérature plusieurs articles rapportant des simulations de cellules photovoltaïques à base d'InGaN. Cependant, la forte densité de défauts dans l'InGaN et les phénomènes de polarisation sont rarement pris en compte. Le but de cette étude était donc de modéliser un matériau le plus proche possible de la réalité afin d'obtenir des caractéristiques réalistes. Nous allons commencer par décrire la modélisation de la cellule solaire Schottky et du matériau InGaN, avant la présentation des résultats de la nouvelle structure de la cellule solaire Schottky avec couche graduelle.

IV.1 Cellule solaire sans couche P :

Dans ce nouveau chapitre, nous présentons l'étude de nouvelles structures de cellules solaires. Certains des enjeux technologiques majeurs dans la réalisation des cellules solaires à base d'InGaN sont la difficulté de réaliser le dopage de type P et la maîtrise des procédés de fabrication des contacts métal-semi-conducteur, particulièrement dans le cas d'une couche dopé P [1, 2]. Afin de palier à ces problèmes liés à la couche P, nous avons simulé et optimisé les performances de structures de cellules solaires sans la couche P (structure Schottky). Il s'agit de structures dans lesquelles la jonction PN est remplacée par une jonction métal-semi-conducteur. En effet, nous avons vu dans le deuxième chapitre que pour créer un courant électrique à partir d'une cellule solaire, il faut dissocier les paires électron-trou photo-générées et les collecter dans un circuit électrique extérieur avant leurs recombinaisons au sein du matériau semi-conducteur. La séparation des paires électron-trou se fait généralement par la création d'une barrière de potentiel dans le semi-conducteur, cela par le biais d'une jonction PN, mais également par le biais d'une jonction métal-semi-conducteur. Elle avait en effet tendance à suggérer l'utilisation de couches P ultra fines, à la limite basse imposée. Nous avons donc testé la solution consistant à la supprimer purement et simplement.

IV.2 Cellule solaire Schottky :

Une Cellule solaire Schottky est constituée d'une couche d'InGaN sur un substrat de GaN de type N, sur lequel est déposée une couche mince métallique, généralement de l'or. On réalise ainsi une barrière de Schottky. Lorsque le rayonnement crée des paires électron-trou dans la zone de charge d'espace du semi-conducteur, la diode est le siège d'un photo-courant de génération analogue à celui de la photodiode à jonction pn.

L'avantage de la photodiode Schottky réside dans le fait que la couche métallique, lorsqu'elle est suffisamment mince, est transparente au rayonnement dans le domaine du proche ultraviolet.

a. Semi-conducteur de type n :

Les électrons qui passent du semi-conducteur vers le métal, entraînent des modifications énergétiques dans chacun des matériaux. Dans le semi-conducteur, une zone de déplétion se crée, les ions donneurs N_d^+ ne sont plus compensés par les électrons, il apparaît une charge d'espace positive. D'autre part la distance bande de conduction-niveau de Fermi, qui traduit la population électronique, est plus grande au voisinage de l'interface que dans la région neutre du semi-conducteur $\varphi_F' > \varphi_F$. Le niveau de Fermi étant horizontal, il en résulte une courbure des bandes vers le haut (Figure IV.6). Dans le métal, il apparaît une accumulation d'électrons à l'interface. Le niveau du vide varie à cause de ces zones chargées. A cette double charge d'espace sont associés un champ électrique et une tension de diffusion V_d qui, comme dans le cas de la jonction *pn*, équilibrent les forces de diffusion et déterminent l'état d'équilibre[3].

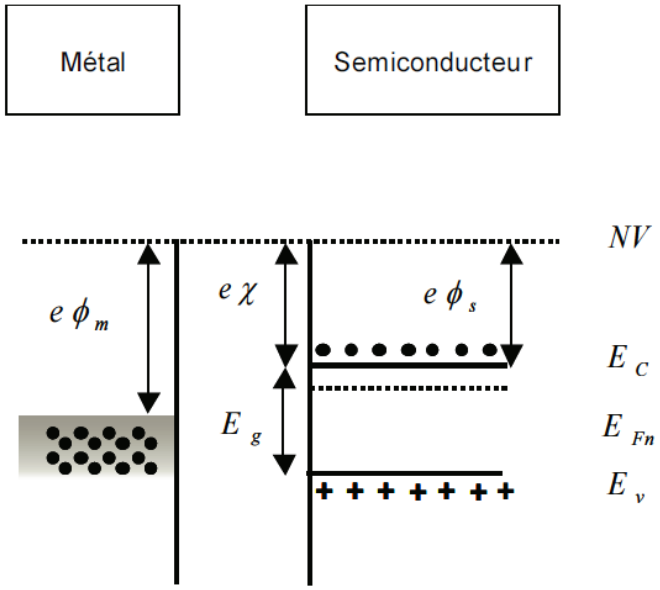


Figure IV.1 : Travaux de sortie différents

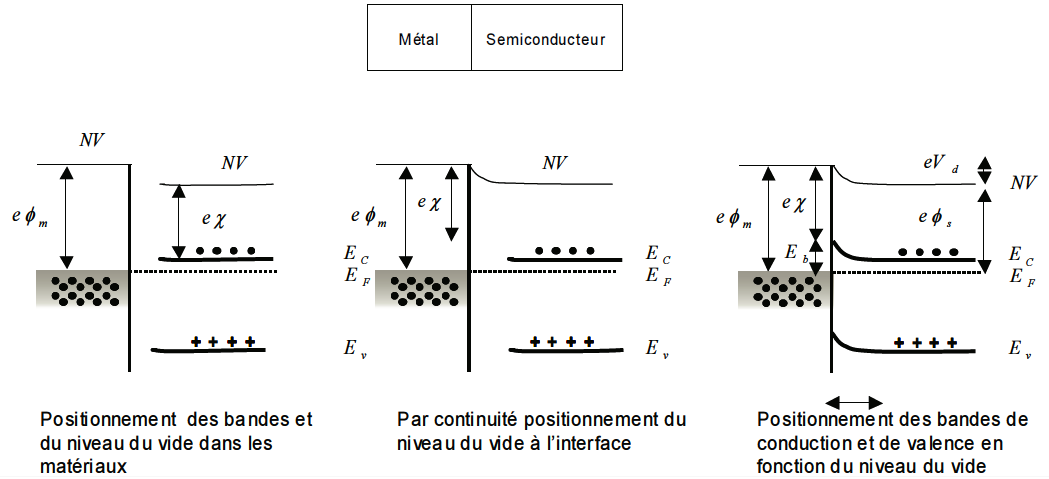


Figure IV.2: Contact métal-semi-conducteur(n) avec $\varphi_m > \varphi_s$ à l'équilibre thermodynamique

Notons que le nombre de charges positives développées dans le semi-conducteur est égal au nombre de charges négatives développées dans le métal. Ces dernières sont des charges d'accumulation, la densité d'états dans le métal étant de l'ordre de 10^{22} cm^{-3}, ces charges se développent à la surface du métal. Dans le semi-conducteur, ces charges sont des charges de déplétion dues aux ions donneurs, la densité de ces donneurs étant typiquement de l'ordre de 10^{16} à 10^{18} cm^{-3}, cette charge d'espace est relativement étalée à l'intérieur du semi-conducteur, ce qui entraîne une extension des courbures de bandes.

Polarisons la structure avec une tension négative (Figure IV.3.a). La bande de conduction du semi-conducteur s'élève, la courbure diminue. Ainsi la barrière semi-conductrice /métal diminue alors que la barrière métal /semi-conducteur reste inchangée. L'équilibre est rompu, les électrons diffusent du semi-conducteur vers le métal et créent un courant I du métal vers le semi-conducteur. Si on augmente encore la tension de polarisation on atteint le régime de bandes plates lorsque $V=V_d$

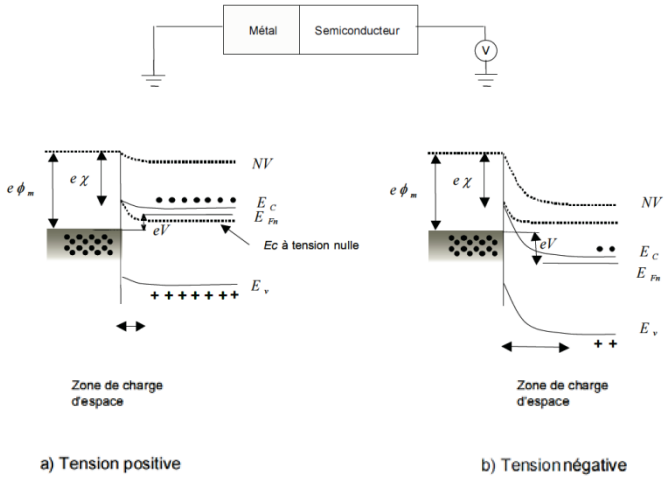


Figure IV.3: Contact métal-semi-conducteur(n) avec $\varphi_m > \varphi_s$ sous polarisation.

a) V_{sc}-V_m< 0. b) V_{sc}-V_m> 0.

Polarisons la structure par une tension positive (Figure IV.3.b). La bande de conduction du semi-conducteur est abaissée, ce qui augmente la hauteur de la barrière qui s'opposait à la diffusion des électrons. La structure est polarisée en inverse. La structure métal-semi-conducteur (n) avec $\varphi_m > \varphi_{sc}$ constitue donc un contact redresseur. C'est une diode Schottky. Notons que la différence des niveaux de Fermi est la différence de potentiel appliquée.

Avec : $\varphi_m > \varphi_{sc}$: le contact métal-semiconducteur N est redresseur ;

métal-semiconducteur P est ohmique.

$\varphi_m < \varphi_{sc}$: le contact métal-semiconducteur N est ohmique ;

métal-semiconducteur P est redresseur.

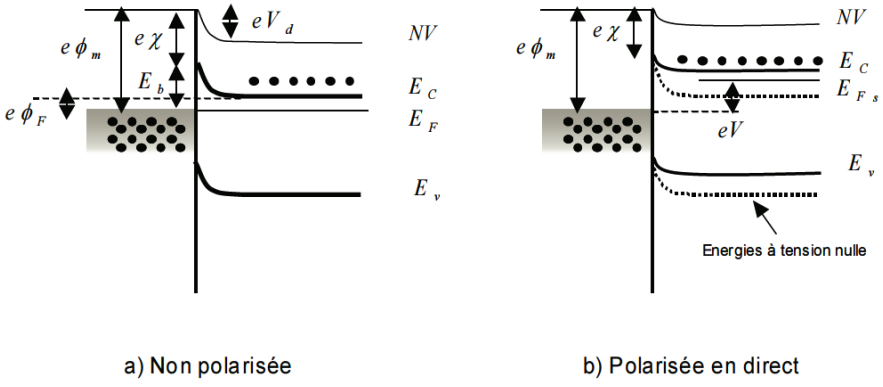


Figure IV.4: Diode Schottky[4].

IV.3 Description de la structure et des modèles utilisés :

IV.3.1 ATHENA : est un simulateur désigné pour la création des structures avec une bonne résolution des mailles, fait aussi l'implantation ionique et la diffusion des impuretés et l'oxydation, les épaisseurs des couches, dopage ainsi que certains paramètres électriques, La Figure *IV.5* représente La structure de la cellule simulée ,nous nous sommes basés sur des valeurs expérimentales prises des travaux effectués sur différentes structures de cellules Schottky [1] pour la simulation de nos cellules Schottky.

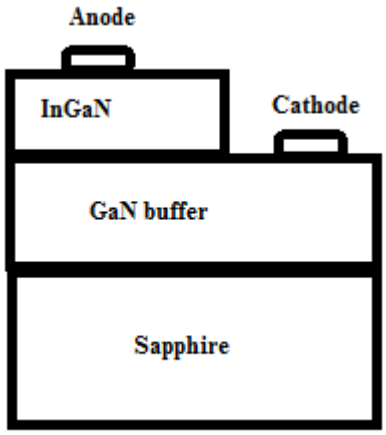


Figure *IV.5*:La structure de la cellule simulée

La croissance de l'InGaN est un point critique pour le développement de ce matériau. En effet, il n'est pas possible de le fabriquer de manière massive comme pour le silicium. Il est donc déposé en film fin sur un substrat. Le problème est qu'il n'existe pas de substrat possédant un paramètre de maille proche de celui de l'InGaN. Une fine couche tampon est alors utilisée pour adapter les paramètres du substrat et de la couche déposée. Traditionnellement, le saphir (Al_2O_3) est utilisé comme substrat pour les couches d'InGaN avec une couche tampon de GaN.

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

IV.3.2. Définition du substrat

Dans la première étape nous avons défini le substrat de départ (figure *IV.6*), nous avons choisi le substrat saphir d'orientation (0001) fait qu'il est le plus utilisé dans la fabrication des cellules Schottky.

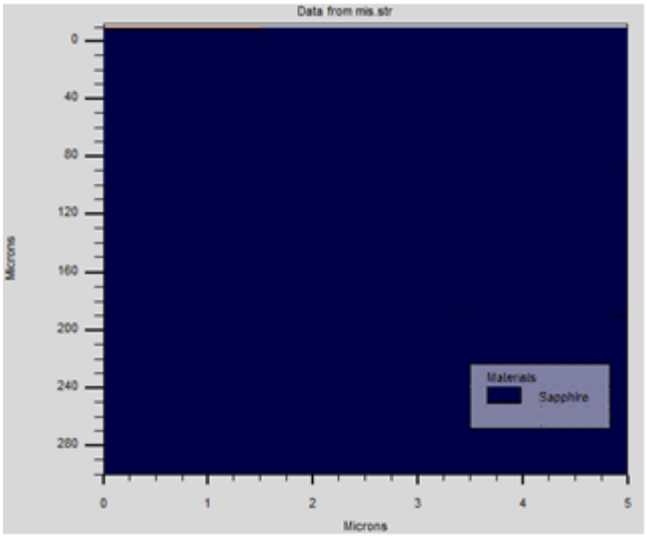


Figure *IV.6*: Définition de substrat saphir

IV.3.3. Dépôt et gravure :

Le GaN épitaxié sur saphir par *MOCVD***,** avant la croissance de la couche de GaN proprement dite est la croissance d'une couche tampon de GaN à basse température (500-550°C contre 800-1000°C pour la croissance du GaN à haute qualité cristalline).

La Figure (*IV.7*) représente le dépôt et la gravure des couches de GaN et d'InGaN de type N, d'abord nous avons déposé une couche de nitrure de gallium d'une épaisseur de 4 µm dopé N par (*MOCVD*), à une température de dépôt égale à 550 °C pour améliorer la qualité du substrat. Cette température permet d'obtenir une distribution homogène des atomes sur la surface du substrat saphir. Dans ces conditions de dépôt la couche (buffer) est amorphe, ce n'est que lors de la croissance de la couche principale à température 1050 °C qu'elle va cristalliser. L'étape suivante est l'épitaxie par la méthode (*MOCVD*) d'une couche de (InGaN) dopé uniformément sous une température de 630 °C, dont l'épaisseur est de l'ordre de 0.6 µm. L'InN ne peut pas être déposé à des températures supérieures à 630 °C sinon il se dissocie. Au-dessus de cette température, l'indium s'intègre donc mal dans le GaN et il peut former des goutes. De plus, du fait de la faible miscibilité du GaN et de l'InN, il n'est pas rare de voir des ségrégations de Phase dans les couches d'InGaN.

Dans la phase finale, le dépôt des électrodes nécessite une gravure sèche sur une partie de la couche d'InGaN.

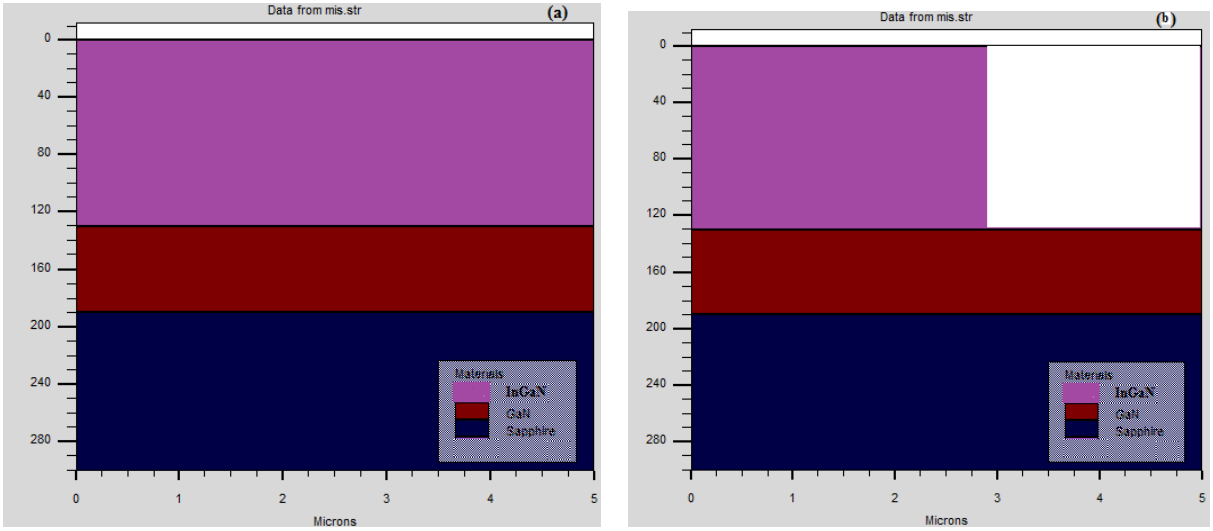


Figure *IV.7 :* Dépôt et gravure de couche d'InGaN.

IV.3.4. Dépôt des contacts

La Figure (*IV.8*) représente La dernière étape technologique qui consiste à déposer les contacts de la cellule Schottky. Le premier contact Schottky déposé est de palladium (Pd) et Le deuxième contact Ohmique qu'on va déposer est de (Au), les deux contacts sont déposé par la méthode d'évaporation thermique.

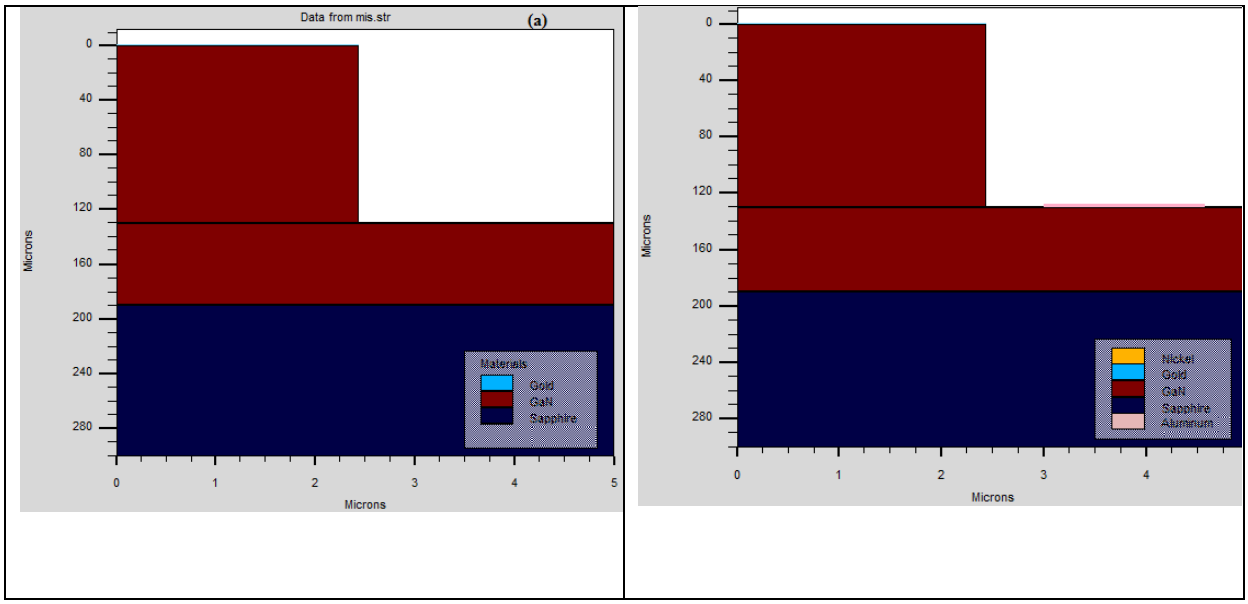


Figure *IV.8*: Dépôt des contacts

Il existe des commandes pour définir une structure de périphérique dans Atlas il y a des groupes d'instructions qui doivent apparaître dans un ordre correct (Ordres des groupes des

commandes dans un programme Atlas) comme nous l'avons montré dans le chapitre précédent.

IV.4.1 La structure Metal/n-InGaN/n-GaN :

La structure est basée sur la couche active n-InGaN d'une épaisseur de (0,6 µm) et d'une concentration de dopage de (8×10^{16} cm^{-3}), déposée sur la couche tampon n-GaN fortement dopée (1×10^{19} cm^{-3}). Notamment, la structure présentée pourrait être réalisée en pratique sur un substrat isolant de saphir [5]. Concernant le contact Schottky, c'est une fine couche métallique (5 nm) pour obtenir une couche semi-transparente qui facilite l'absorption d'une grande partie des photons incidents. Le contact ohmique est réalisé sur une surface n^+-GaN fortement dopée qui représente un champ de surface arrière pour assurer une collecte efficace des photo-porteurs [6]. La surface éclairée de la cellule solaire, y compris le contact Schottky, est de 1 μm^2. La figure IV.9 montre un diagramme schématique de la structure simulée. La simulation est étudiée sous le spectre solaire AM1.5 avec P = 100 mW/cm^2 à température ambiante.

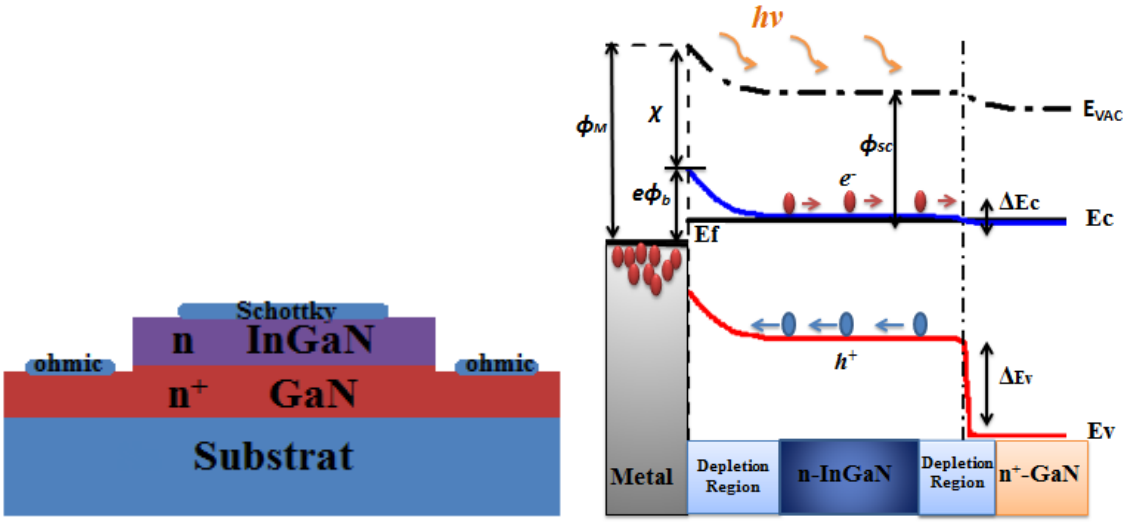


Figure IV.9 : Structure de la cellule solaire Schottky n-InGaN/n-GaN utilisée pour la première simulation numérique (gauche). Diagramme de bande de la structure sous illuminations AM1.5 [7, 8] (Droite).

La conversion photovoltaïque provient de la séparation des porteurs photo-générés par une zone de charge d'espace dont la longueur dépend de la hauteur de la barrière de potentiel qui s'oppose au passage des électrons du métal au semi-conducteur. Lorsque la cellule est éclairée, les photons avec une énergie plus élevée que l'énergie de la bande interdite du semi-conducteur créeront les paires électron-trou. Ces derniers sont séparés par un champ

électrique interne produit dans la zone de charge d'espace. La cellule sera la source d'un photo-courant, qui est dû à la génération de porteurs majoritaires (électrons) (i.e. on parle d'un dispositif Schottky à porteurs majoritaires, contrairement à la jonction p-n : les porteurs minoritaires) [8]. Ces porteurs photo-générés diffusent du n-InGaN au n-GaN et sont collectés. Concernant la métallisation des contacts ohmiques, c'est l'une des étapes les plus importantes dans la fabrication des cellules solaires Schottky. Car il y a forcément des résistances de contact qui peuvent dégrader les performances de la cellule solaire [9-11] sur la couche n-GaN [9, 12]. Pour cela, le contact ohmique est réalisé sur une surface GaN fortement dopée pour réduire la résistance de contact série et faciliter l'effet tunnel des porteurs de charge [13].

Ce travail a été réalisé par simulation à l'aide du simulateur Silvaco-Atlas. Ce logiciel est basé sur une méthode des éléments finis et peut résoudre les équations de Poisson et de Continuité en utilisant le modèle de dérive-diffusion standard. Il comprend les méthodes de Gummel découplées et les méthodes couplées de Newton-Raphson.

En conséquence, le maillage dense doit être utilisé dans les zones critiques (les interfaces entre les différents matériaux) pour obtenir une bonne résolution et convergence. Pour obtenir les meilleures performances des cellules solaires, notre stratégie consiste à faire varier un seul paramètre et à fixer les autres (composition en Indium, épaisseur, concentration de dopage de la couche active (InGaN) et fonction de travail du métal du contact Schottky).
Enfin, nous avons utilisé les statistiques de Fermi-Dirac [14], la recombinaison Shockley-Read-Hall (SRH) pour modéliser les pertes dans notre structure [15], le rétrécissement de Bandgap [15], le modèle kP [16, 17], la recombinaison Auger [14] et les modèles de mobilité dépendant du dopage et de la température [15].

IV.4. 2 Paramètres de simulation :

L'InGaN et GaN, sont les matériaux utilisés dans notre travail, dont les paramètres sont rassemblés dans le tableau IV.1.

Electric properties	E_g (eV) Energie de gap	N_c (cm^{-3}) Densités des états *dans BC*	N_v (cm^{-3}) Densités des états *dans BV*	χ (eV) *Affinité électronique*	E *Permittivité électrique*
GaN	3.42 [5, 6]	2.3×10^{18} [7]	4.6×10^{19} [8]	4.1 [8, 9]	8.9 [10]
InN	0.7 [5, 6]	9.1×10^{17} [7]	5.3×10^{19} [8]	5.6 [8, 9]	15.3 [10]

Tableau IV.1: Les paramétrés expérimentaux de GaN et d'InGaN. [18]

Cette innovation est largement utilisée pour les dispositifs de puissance et les photodétecteurs à base de nitrure III [19]. Alors qu'il est exceptionnellement nouveau pour la technologie photovoltaïque basée sur InGaN. Il y a eu quelques recherches faisant autorité qui ont rapporté la réalisation de cellules solaires Schottky fonctionnelles [7, 20-22]. Récemment, Sid Ould Saad et al. [23] et Abdoulwahab Adaine et al. [15] ont réalisé les premières simulations numériques. Cependant, ils n'ont pas pris en compte le problème de discontinuité de bande [24-27] et l'effet du grand désaccorde de maille réseau entre GaN et InGaN [16].

Expérimentalement, la couche d'InGaN devrait être plus épaisse que 400 nm visant à la fois à assurer une absorption importante de photons et un rendement élevé pour les applications solaires [27]. Néanmoins, les couches épaisses d'InGaN impliquent une concentration élevée en indium qui présente une limitation dans le processus expérimental [27]. En effet, l'Indium a conduit à l'accumulation des porteurs dans la couche actif et un large décalage de bande de valence apparaît et réduit les performances des cellules [24, 27-28]. La teneur en Indium est fondamentalement sélectionnée par la sélection d'offset de bande entre GaN et InN de 0,5eV [29] à 1,1eV [30]. Cette large portée est affirmée expérimentalement et théoriquement, ce qui indique une détermination difficile de la teneur où une collection des porteurs et des caractéristiques JV sont influencés [31]. Une technique numérique avancée et différents modèles physiques sont étudiés pour approcher notre structure de la réalité. Cette étude est axée sur les effets (i) du champ piézoélectrique, (ii) du décalage de réseau et (iii) la recombinaison de porteurs photo-générés dans l'hétéro-interface sur les performances des cellules solaires Schottky.

IV.5 Optimisation des paramètres :

Nous avons optimisé quatre paramètres de la structure : le dopage de type N (N_d) de la couche InGaN, son épaisseur (d_n), la concentration d'indium dans $In_xGa_{1-x}N$ et le travail de sortie (W_f) de la couche métallique.

Ces paramètres doivent cependant être contraints dans des intervalles de variation dans lesquels ils sont significatifs notamment en termes physiques et technologiques. La composition d'indium, les épaisseurs de couche et le travail de sortie sont normalisés à 1. Pour le dopage, il est normalisé de manière logarithmique (log10) à sa valeur maximale.

Nous avons choisi le dopage de type N, entre un dopage résiduel minimal de $10^{16}cm^{-3}$et un dopage maximal de $10^{19}cm^{-3}$. Nous avons alors, $N_d \in [10^{16}\text{-}10^{19}]\ cm^{-3}$.

La valeur minimale de l'épaisseur de la couche InGaN a été prise à 100 nm, ce qui garantit l'absorption d'une partie importante des longueurs d'ondes du spectre. Sa valeur maximale est

de 1 µ*m*. Nous avons alors, $d_n \in$ [0,1- 1,0] µ*m*. La valeur maximale de l'épaisseur est naturellement contrainte par l'intervalle de composition d'indium choisi: plus la composition d'indium dans InGaN est grande (sur un substrat de GaN), plus l'épaisseur maximale réalisable sera faible.

La variation de la concentration d'indium dans $In_xGa_{1-x}N$ est autorisée sur toute la gamme des concentrations : $x \in [0 - 0{,}75]$.

Enfin, pour le travail de sortie du métal, nous avons choisi de le contraindre entre les forts travaux de sortie de métaux et alliages existants. Nous avons donc, $W_f \in$ [5,1 - 6,3] *eV*.

Le programme d'optimisation doit donc trouver le quadruplet optimal (N_d; d_n; x;W_f) donnant le rendement de conversion maximal de la cellule solaire.

Nous avons vu dans le chapitre II la description des nitrures que les phénomènes de polarisations spontanée et piézoélectrique sont importants dans ce type de matériau. C'est pourquoi il est important de les prendre en compte dans nos simulations afin de modéliser une cellule qui tend le plus possible vers une cellule réelle.

Nous allons ajouter aussi dans la structure la polarisation piézoélectrique à la polarisation spontanée. Pour cela, nous avons utilisé les valeurs des binaire données dans le chapitre II et sont déduites d'une interpolation linéaire (loi de Vegard) entre les valeurs de l'InN et du GaN pour calculer les propriétés de l'InGaN. Le paramètre de maille du substrat est laissé par défaut comme étant des couches en dessous de la couche étudiée.

IV.5.1La première partie :

IV.5.1.1La variation de la composition d'indium et du travail de sortie.

Tout d'abord, nous avons optimisé deux paramètres : La teneur en Indium dans $In_xGa_{1-x}N$ ($0 < x < 0{,}75$) et le travail de sortie du contact Schottky (5,1 eV $< W_f <$ 6,3 eV), dont les courbes sont normalisées à 1. Les autres paramètres tels que la concentration de dopage et l'épaisseur sont fixes.

La figure IV.10 illustre le rendement des cellules solaires Schottky métal/n-InGaN/n-GaN par rapport à la teneur en Indium pour différentes travaux de sortie. À première vue, l'augmentation de la teneur en indium entraîne initialement une augmentation de l'efficacité des cellules solaires. Ce résultat est dû à la bonne absorption du spectre lumineux, qui résulte du rétrécissement de la bande interdite (c'est-à-dire que lorsque x_{In} augmente, l'énergie de la bande interdite diminue) [23]. Or, lorsque la teneur en Indium dépasse 54 % la courbe chute fortement et devient finalement non significative à partir de (x_{In} = 60 %).

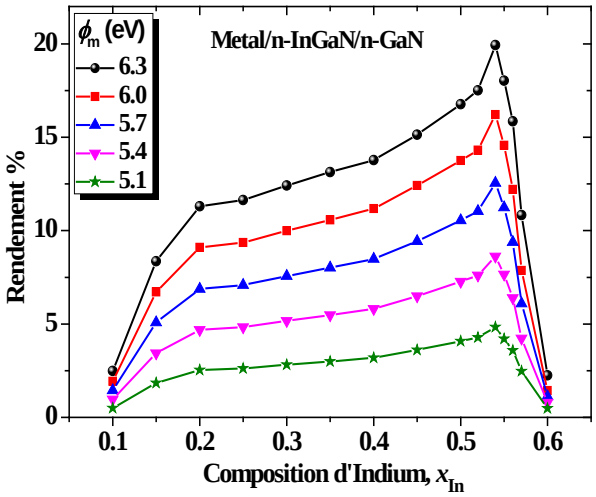


Figure IV.10 : Efficacité des cellules solaires Schottky Métal/n-InGaN/n-GaN en fonction de la teneur en Indium pour différentes travaux de sortie.

Pour $x_{In} \geq 60$ %, avec un travail du métal inférieur ou égal à 5,4 eV, le rendement devient nul. Ce comportement est probablement dû à la diminution de la hauteur de barrière de potentiel (ϕ_b) entre la couche métallique et la couche d'InGaN. Par conséquent, le contact peut évoluer du contact Schottky vers un contact ohmique ($\phi_m<\phi_{sc}$) où une accumulation d'électrons se produit à la surface du semi-conducteur [14].

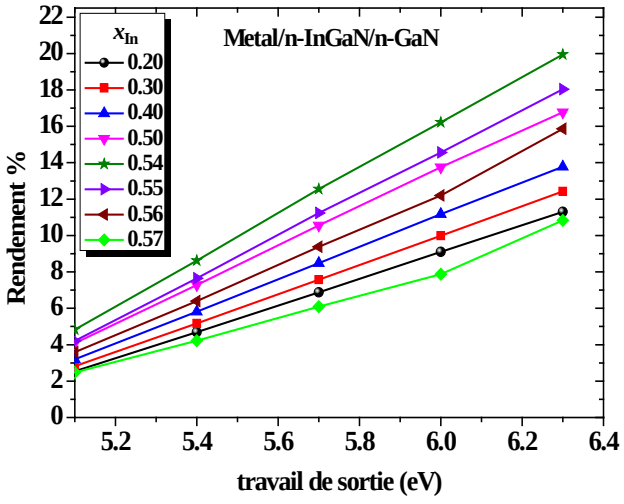


Figure IV.11 : Rendement des cellules solaires Schottky Métal/n-InGaN/n-GaN en fonction du travail de sortie pour différentes teneurs en Indium.

Sur la figure IV.11, nous avons rapporté l'efficacité par rapport à la fonction de travail du métal pour différentes teneurs en indium. A noter que la courbe croît linéairement, alors que la cellule perd de son efficacité pour x_{In}> 54 %.

Les paramètres électriques de la cellule solaire Schottky tels que la densité du courant de court-circuit (*Jsc*), la tension en circuit ouvert (*Vco*), le facteur de remplissage (*FF*) et le rendement (η) sont extraits des figures IV. 12 et IV.13.

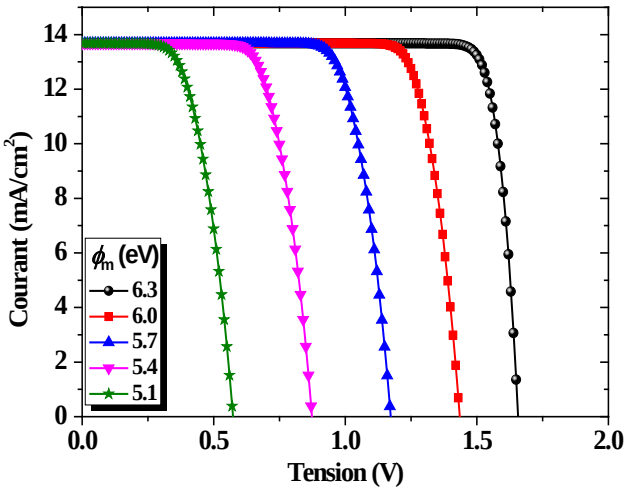


Figure IV.12 : Caractéristiques courant-tension pour différentes travaux de sortie pour une teneur en Indium x_{In} = 54 %.

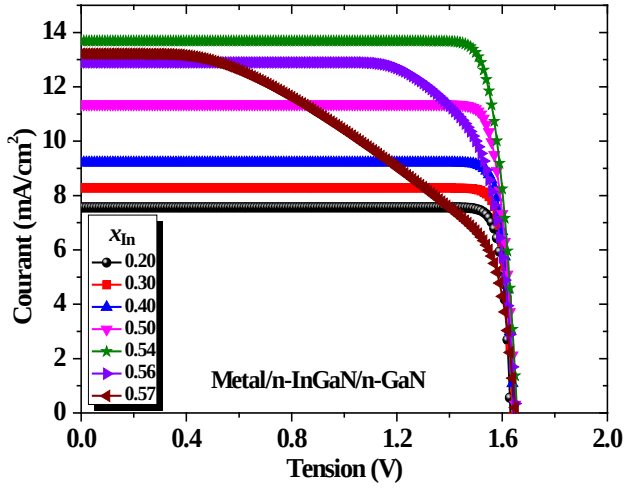


Figure IV.13 : Caractéristiques courant-tension pour différentes compositions d'Indium pour un travail de sortie du métal W_f = 6,3 eV.

Pour x_{In} = 54 % (l'efficacité optimale), le tracé en médaillon de la figure IV.12 montre les caractéristiques de densité de courant-tension (*J-V*) pour différentes fonctions de travail. On peut voir que, la tension en circuit ouvert *Voc* est proportionnel à la fonction de travail du métal Schottky W_f, tandis que la densité de courant-tension *Jsc* reste stable. Ce résultat est probablement dû à l'augmentation de la barrière de Schottky ϕ_b. Nous avons également étudié l'effet de la teneur en indium sur les caractéristiques *J-V*. Les tracés des courbes sont représentés sur la figure IV.13. On note que pour W_f = 6,3 eV, la teneur en Indium n'affecte pas la tension en circuit ouvert *Vco* mais elle influence principalement la densité de courant-tension *Jsc*. Nous avons enregistré un seuil pour x_{In} = 54 % à partir duquel le courant *Jsc* diminue. Ces résultats peuvent être expliqués comme suit : lorsque x_{In} augmente, la bande interdite d'InGaN diminue et un photo-courant supplémentaire peut être généré, ce qui conduit à une bonne absorption de la lumière [23].

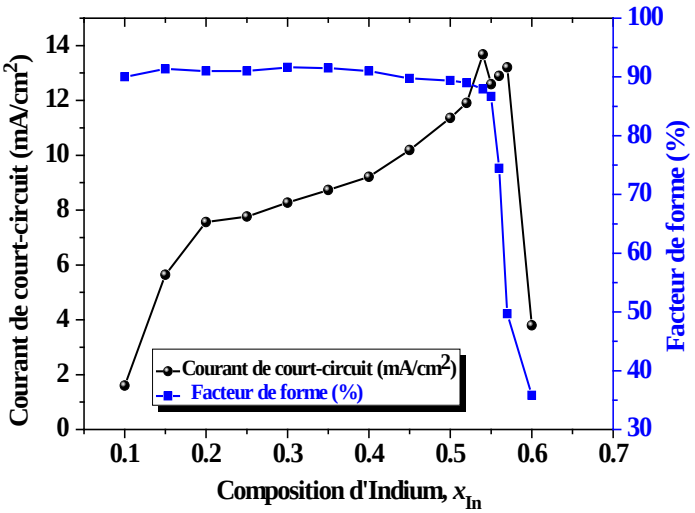


Figure IV.14 : Facteur de forme (FF) et courant de court-circuit (Jsc) des cellules Schottky Métal/n-InGaN/n-GaN respectivement en fonction de composition d'Indium pour ϕ_m = 6,3 eV.

Concernant la forte déformation des courbes *J-V*, lorsque le x_{In} dépasse 54 %, cela peut être expliqué par l'augmentation de la résistance série [32]. Les porteurs générés dans la couche supérieure sont bloqués et empêchés de diffuser du n-InGaN au contact ohmique pour la collection, comme indiqué sur la figure IV.14. D' un autre côté, les porteurs générés sont recombinés avant la collection [32-35]. Ces résultats conduisent à une diminution du courant de court-circuit (*Jsc*) (Figure IV.14) et du rendement de la cellule (η) (Figure IV.10) [24, 27,36]. Approximativement, dans la même gamme (x_{In}> 54 %), le facteur de remplissage (*FF*) chute fortement en raison de l'augmentation de la résistance série [7] et du grand décalage de

maille aux hétéro-interfaces [37,38]. Cela peut être lié à des défauts profonds qui ont réagi comme des centres de recombinaison pour les porteurs générés en réduisant leur concentration et leur mobilité [35, 39, 40]. Ceux-ci ont un impact direct sur les performances de la cellule [41].

La variation de ce dernier en fonction du x_{In} pour différentes fonctions de travail est présentée sur la figure IV.15. La hauteur de la barrière Schottky est inversement proportionnelle au x_{In}. Néanmoins, la plus élevée est donnée pour W_f = 6,3 eV. L'augmentation du x_{In} entraîne une augmentation de l'affinité électronique selon la loi de Vegard. Ce qui réduit la hauteur de barrière Schottky [42]. Cela confirme ce que nous pensions dans la figure IV.10.

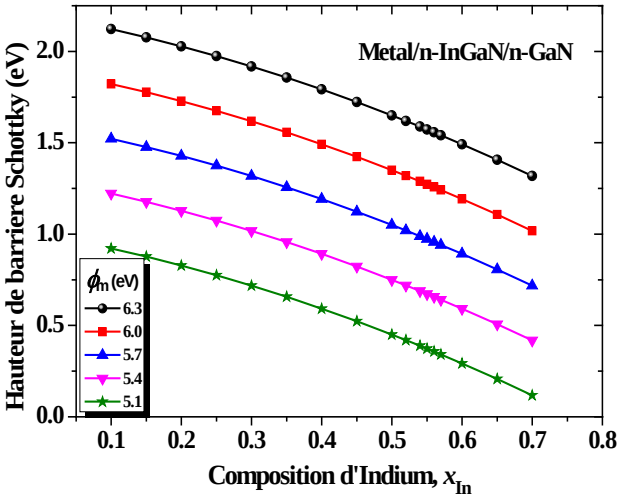


Figure IV.15 : Effet de la composition d'Indium sur la hauteur de barrière Schottky de la structure Métal/n-$In_xGa_{1-x}N$/n-GaN pour différents travaux de sortie.

Nous montrons ainsi la bande du diagramme et la variation du champ électrique pour différentes fonctions de x_{In} et de travail du métal, comme le montrent les figures IV.16 et IV.17, respectivement. On constate que l'augmentation de la fonction de travail du métal pour une teneur en Indium donnée (x_{In} = 54 %) étend la région de charge d'espace à l'interface métal/n-InGaN, et augmente l'amplitude du champ électrique (Figure IV.17) [23]. Ce résultat est attribué à l'augmentation de la hauteur de la barrière Schottky [23].

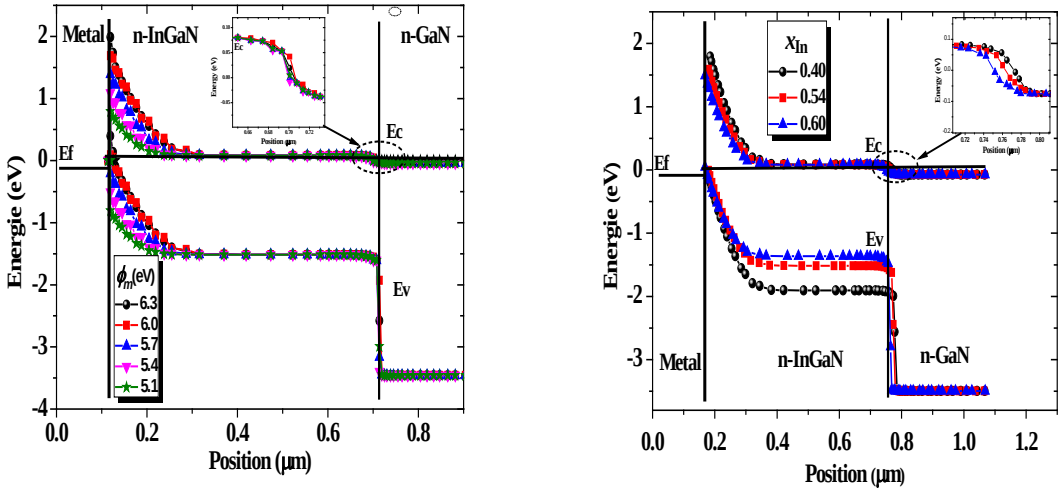


Figure IV.16 : Diagramme de bande d'une structure Métal/n-$In_xGa_{1-x}N$/n-GaN pour différentes travaux de sortie (à gauche) et différentes compositions d'Indium (à droite).

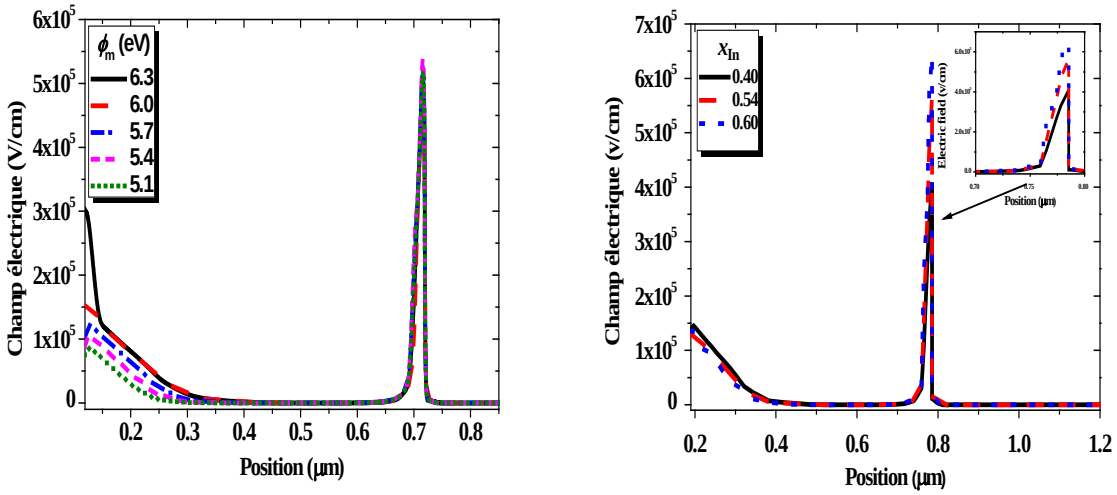


Figure IV.17 : Champ électrique d'une structure Métal/n-$In_xGa_{1-x}N$/n-GaN pour différentes travaux de sortie (à gauche) et différentes compositions d'Indium (à droite).

Après avoir défini le travail de sortie optimal (W_f = 6,3 eV), nous étudierons l'impact de la teneur en Indium sur la bande du diagramme et le champ électrique. En se référant aux figures IV.16 et IV.17, l'augmentation de x_{In} réduit la hauteur de barrière Schottky qui diminue l'amplitude du champ électrique comme indiqué sur la figure IV.15. Ainsi, le décalage de la bande de valence devient plus élevé dans l'interface n-InGaN/n-GaN. Ce décalage de la bande de valence devient un obstacle pour les porteurs générés et bloque leur passage, de sorte que la majorité des porteurs générés dans la couche active sont perdus par la recombinaison [24]

et dégradent le facteur de remplissage (Figure IV.10). Comme le montre la figure IV.17, le champ électrique dans l'interface InGaN/GaN est plus dominant que celui dans l'interface métal/InGaN ce qui complique la collecte des porteurs photo-générés. Ce résultat justifie la diminution du rendement (FigureIV.10) et du la densité de courant-tension *Jsc* (Figure IV.14) lorsque le x_{In} dépasse 54 %. De plus, le champ électrique présenté sur la figure IV.17 atteint 0,65 MV/cm pour la structure n-InGaN/n-GaN (près de 1 MV/cm) [43]. L'étude expérimentale d'un dispositif à base d'InGaN/GaN, développé par la technique MBE, révèle un phénomène de polarisation piézoélectrique significatif à l'interface d'hétérojonction III-N qui induit des champs électriques élevés dans ces matériaux (III-N) [34, 44] menant à la minimisation de la collection des porteurs photo-générés [45].

De point de vue expérimental, ces défauts se présentent sous forme de dislocations et de fissures dues au grand décalage de réseau généré dans les hétéro-interfaces, ce qui dégrade les performances des cellules solaires [46-48].

IV.5.1.2.L'effet d'implémentation de la polarisation sur cette structure :

Dans un premier temps, nous avons pris en compte la polarisation spontanée et la polarisation piézoélectrique. La Figure VI.16 présente le diagramme de bande de la structure. On observe que les bandes de valence et de conduction dans la couche active d'InGaN avec les deux polarisations sont plus planes que dans la structure à faible composition d'Indium. On passe de 18.48 % de rendement à 2.25 %. Par ailleurs, on observe que le courant de court-circuit est réduit, ce qui est dû à la barrière de potentiel au niveau de l'interface InGaN/GaN qui limite la collecte des électrons.

Il est possible que ceci soit dû à une création d'un champ opposée dans le matériau, qui gêne le passage des porteurs photo-générés et ainsi diminuer la collecte du courant. Cependant, des barrières sont également présentes aux interfaces Figure (IV.16). Cela est probablement dû à l'implémentation de la polarisation dans Silvaco. En effet, le logiciel va calculer la polarisation pour chacune des couches créant une forte concentration de porteur aux interfaces qui ne devrait se trouver qu'aux extrémités de la structure. On remarque également la présence d'un fort champ à l'interface entre le GaN et InGaN qui est dû à la différence de paramètre de maille et de constantes piézoélectriques entre ces deux matériaux. Ce fort champ va créer une barrière de potentiel pour les électrons au niveau de l'interface, comme le montre la Figure IV.17. Enfin, une augmentation de la concentration des porteurs

au niveau des interfaces n-InGaN/n-GaN dû au fort champ électrique opposée dans le matériau InGaN, ainsi qu'une accumulation des électrons au niveau de l'interface.

Pour remédier à cet échec, nous proposons d'introduire une couche graduée entre GaN et InGaN. Cette couche doit être fine (Nanométrique), à faible composition en Indium et dopée tout comme la couche active.

IV.5.1.3.L'effet de la couche graduelle :

L'injection de la couche graduelle nous permet de faire toute l'analyse afin d'identifier la composition critique pour laquelle l'efficacité atteindra la valeur maximale pour une telle structure. Cela fournira des informations supplémentaires pour les expériences afin de choisir la concentration d'Indium approprié. Cette étude prend en considération les défauts de l'interface entre la fenêtre et la couche absorbante. Théoriquement, ces défauts dégradent les performances des cellules solaires pour des compositions d'Indium élevés.

Concernant l'utilisation de la couche graduée, son avantage est d'améliorer l'interface entre n-InGaN/n-GaN, dans le but de réduire le désaccord de maille qui peut être expliqué expérimentalement par l'adaptation des déformations et la réduction des dislocations [49, 50, 51, 52]. Cela peut réduire considérablement la recombinaison des porteurs générés, entraînant une augmentation du la densité de courant-tension Jsc et du rendement de la cellule (c'est-à-dire que la couche graduée nous a permis d'élargir la plage d'absorption en atteignant une composition d'Indium élevés).

Cette technique est courante et utilisable dans le développement de dispositifs optoélectroniques pour minimiser les dislocations, les fissures et les réflexions dans les interfaces [20, 21,31].

La figure IV.18 présente l'effet de la couche interfaciale graduée. Le décalage de la bande de valence est réduit, de même que le champ électrique dans l'interface n-InGaN/n-GaN. De plus, il assure une transition en douceur des porteurs photo-générés à l'interface InGaN/GaN. Une amélioration de l'efficacité des cellules solaires Schottky est mise en évidence sur la figure IV.19 (a) après l'ajout de la couche graduée qui facilite le passage des porteurs générés en raison de la réduction drastique du champ électrique à l'interface n-InGaN/n-GaN d'environ 1.5×10^5 V/cm (voir Figure IV.18).

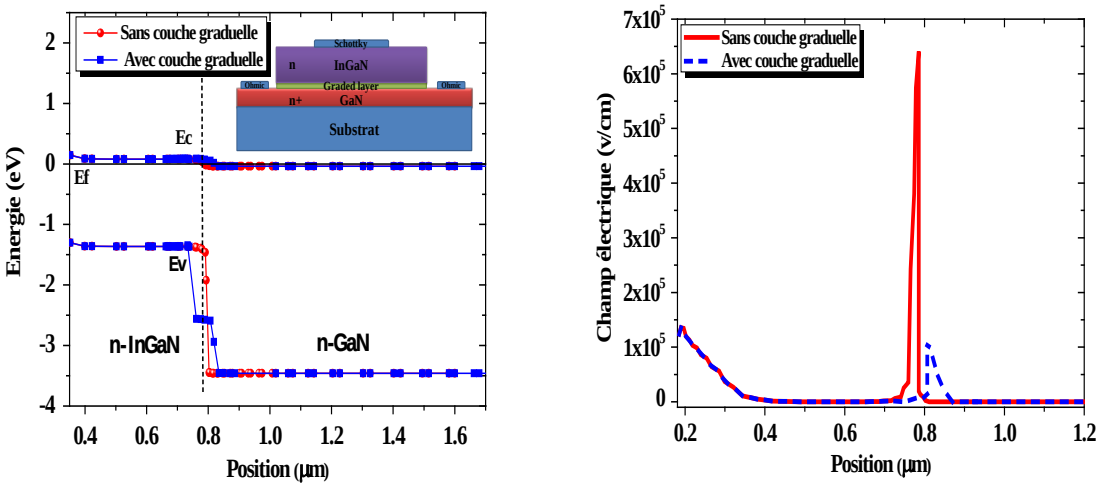


Figure IV.18 : Diagramme de bande (a) et champ électrique (b) de la cellule solaire Schottky n-InGaN/n-$In_xGa_{1-x}N$/n-GaN à couche intermédiaire mince est graduée d'InGaN en haut à GaN en bas (Bleu) et sans couche interfaciale graduée n-InGaN/n-GaN (Rouge) pour x_{In} = 60 % et ϕ_m = 6,3 eV.

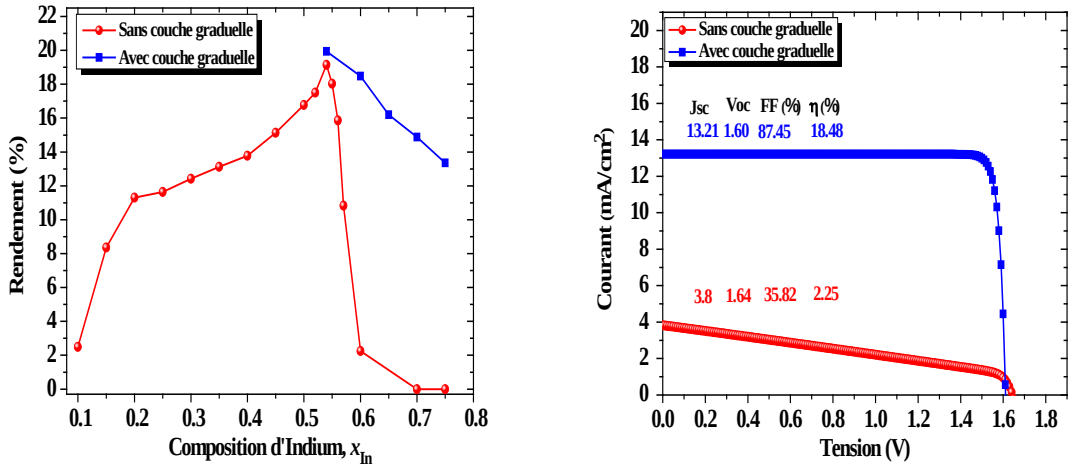


Figure IV.19 : (a) Efficacité de la cellule solaire Schottky à couche graduée en fonction des compositions d'Indium. (b) Courbe J-V pour le solaire Schottky avec (Bleu) et sans couche graduée (Rouge) sous illuminations AM1.5.

Nous présentons également des caractéristiques courant tension *JV* de la structure avec et sans la couche graduée de la figure IV.19 (b) à partir de laquelle nous extrayons les paramètres photovoltaïques de base, donnés dans le tableau IV.2 Nous notons une amélioration remarquable principalement dans le rendement (10 fois supérieur) même pour des composions d'Indium plus élevés dû à l'augmentation de la densité de courant-tension *Jsc*

(c'est-à-dire minimiser la recombinaison des porteurs), et la disparition de l'effet de résistance série.

Parameters électrique	*Jsc* (mA/cm^2)	*Vco* (V)	*FF* (%)	η (%)
Sans couche graduelle	3.8	1.64	35.82	2.25
Avec couche graduelle	13.21	1.60	87.45	18.48

Tableau IV.2 : Rendement optimal (η), facteur de remplissage (FF), tension en circuit ouvert (Vco) et courant de court-circuit (Jsc) obtenus pour la structure Schottky avec et sans couche graduée pour x_{In} = 60 % et ϕ_m = 6,3 eV.

Comme la concentration en Indium, x_{In} = 54 % et la fonction de travail du métal W_f = 6,3 eV sont les valeurs optimales obtenues dans notre simulation numérique, nous avons atteint une efficacité maximale de η = 19,93 % pour la structure Schottky n-InGaN/n-GaN avec une couche graduée.

L'injection de la couche graduelle nous permet de faire toute l'analyse pour l'identification de la composition critique, où l'efficacité atteindra la valeur maximale pour une telle structure. Cela fournira des informations supplémentaires pour les expériences afin de choisir la composition d'Indium x_{In} approprié. Cette étude prend en considération les défauts de l'interface entre la fenêtre et la couche absorbante. Théoriquement, ces défauts dégradent les performances des cellules pour des x_{In} élevés. Cette couche graduée améliore la densité de courant (*Jsc*) ce qui conduit à une augmentation de l'efficacité des cellules en raison de la diminution de la recombinaison des porteurs photo-générés (diminution des défauts d'interface). De plus, une réduction du champ électrique entre les deux régions est également observée. Cela peut s'expliquer par la diminution de la barrière de décalage de bande de cantonnière et le décalage de réseau. Cette technique est courante et utilisable dans le développement de dispositifs optoélectroniques pour minimiser les dislocations, les fissures et les réflexions dans les interfaces [53,54]. Plus pour réaliser une telle structure avec une couche graduée qui permet l'amélioration de l'interface.

Concernant le choix du contact Schottky, il est nécessaire de choisir un métal dont la fonction métallurgique est élevée telle que le platine (6,3 eV) pour créer une région de charge d'espace avec un champ suffisant pour réaliser une collecte efficace des porteurs photo-générés. Malheureusement, il y a un manque de valeurs expérimentales associées à un travail de sortie du platine. Récemment, certaines publications ont rapporté une fonction de travail du platine supérieure à 6,3 eV [55,56]. Cependant, les plus rapportés sont 5,65, 5,93 et 6,10 eV

[57-59]. D'autre part, le calcul *ab initio* montre que selon l'orientation cristallographique, le travail de sortie du platine peut être de 6,74 eV ou 6,97 eV [18].

IV.5.1.4.Résume :

Lorsqu'on a intégré une couche graduelle à l'interface entre n-InGaN/n/GaN on observe que la structure sous polarisations et avec une couche graduelle est très proche de la courbe de référence. Ce résultat confirme notre hypothèse. On constat que les polarisations piézoélectrique et spontanée sont donc dans le sens opposé au passage des porteurs, compensant cette dernière. Nous concluons que la couche graduelle a un effet significatif dans cette structure dû au a la diminution de l'effet de polarisation piézo-électrique et spontané qui interviennes au grand désaccord de maille entre le GaN et L'InGaN à haute composition.

Si on regarde les performances de la structure sous les deux types de polarisations et avec une couche graduelle, on constate qu'elle présente de meilleures caractéristiques que la courbe à faible composition d'Indium avec un rendement de 18.48%. Cette valeur est principalement due à un meilleur facteur de forme. Les deux types de polarisation n'améliorent donc pas la collection du courant dans cette structure. Elle s'oppose au transport des charges.

IV.5. 2 La deuxième partie :

Afin d'optimiser les performances de notre cellule pour une concentration de **54%** d'Indium dans L'InGaN, nous avons calculé les paramètres technologiques (dopage et épaisseur) pour chacune de ces régions. Ces dernières 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.

IV.5.2.1 L'effet de variation de dopage et de l'épaisseur :

Dans cette partie, nous étudierons l'impact de l'épaisseur de la couche d'InGaN (T_{InGaN}) et de la concentration de dopage d'InGaN (N_d) sur le rendement.

La concentration de dopage de la couche d'InGaN sera également ajustée pour assurer le contact Schottky ($\phi_m > \phi_{sc}$) en minimisant la valeur de (E_c - E_f), sachant que $\phi_{sc} = \chi + (E_c - E_f)$ [60]. De plus, pour améliorer l'absorption des photons, nous faisons varier l'épaisseur de la couche active d'InGaN jusqu'à ce qu'elle soit relativement inférieure à la longueur de diffusion

des porteurs générés, qui est estimée à environ 0,2 µm pour le matériau n-InGaN. Ce résultat est en bon accord avec la mesure EBIC [61]. Cette expérience montre que la longueur de diffusion des porteurs générés est légèrement affectée par la composition d'Indium. De plus, permet la génération des porteurs dans la couche de GaN. Compte tenu de tous ces facteurs, nous parvenons à optimiser les paramètres photovoltaïques de la structure Schottky contenant la couche graduée, comme présenté dans le tableau IV.3, et à augmenter le rendement de 19,93 % à 21,69 % pour x_{In} = 54 %, W_f= 6,3 eV, T_{InGaN} = 0,18 µm et $N_d = 2 \times 10^{17}$ cm^{-3}.

	x	W_f(eV)	T_{InGaN}(µm)	N_d(cm^{-3})	η (%) *FF* (%) *Voc* (V) *Jsc*(mA/cm^2)
Interval	[0 - 0.75]	[5.1 - 6.3]	[0.1 - 1.0]	[1×10^{16}- 1×10^{18}]	
Les valeurs des paramètres optimaux	0.54	6.3	0.18	2×10^{17}	21.69 87.92 1.64 1.49

Tableau IV.3 : Paramètres photovoltaïques optimaux des cellules solaires Schottky à base d'InGaN avec une couche à gradient de composition : rendement η, facteur de remplissage FF, tension en circuit ouvert Vco et courant de court-circuit Jsc avec les paramètres et intervalles de contrainte correspondants.

Ce rendement défie les rendements de conversion obtenus pour les cellules solaires avec des structures p-n et p-i-n. Ceux-ci ont un énorme problème pour réaliser le dopage de type p du matériau InGaN, le contact ohmique et ont souffert de phénomènes de dislocation qui se sont produits à haut composition d'Indium. Pour ces raisons, nous avons proposé une cellule solaire Schottky avec une couche graduée comme solution conciliante. En conséquence, le contact Schottky peut remplacer efficacement la fonctionnalité de la couche p et les applications du contact ohmique. De plus, la couche graduée est utilisée pour améliorer l'interface et élever le courant de court-circuit *Jsc* en minimisant la recombinaison des porteurs générée et les défauts interfacial. En outre, il peut minimiser le désaccord de maille et les luxations, comme indiqué dans [53, 54, 62-65]. Concernant l'augmentation de la composition d'Indium x_{In}, il est important d'atteindre un rendement élevé des cellules solaires en élargissant la plage d'absorption. Expérimentalement, de nos jours une concentration

d'Indium supérieur à 54 % peut être atteinte. En particulier, les techniques d'épitaxie à modulation de métal (MME) et d'épitaxie par faisceau moléculaire (MBE) ont été utilisées pour améliorer les interfaces [37, 66, 67]. La présente étude a démontré que le rendement des cellules solaires Schottky peut être augmenté grâce au développement technologique et à l'amélioration de l'interface InGaN/GaN.

IV.6. Conclusion :

La nouvelle cellule solaire Schottky avec une couche graduelle est étudiée à l'aide d'une technique numérique avancée et de modèles physiques réalistes. Notre étude s'est concentrée sur l'effet de décalage de bande entre n-GaN/n-InGaN et l'amélioration de la qualité de l'interface. En utilisant des paramètres extraits de travaux publiés récemment, nous avons obtenu une efficacité importante de 21,69 % pour les valeurs optimales de W_f = 6,3 eV, x_{In} = 54 %,T_{InGaN} = 0,18µm et $N_d = 2 \times 10^{17}$ cm^{-3}. De plus, il est à noter que le dispositif étudié rivalise avec le rendement des InGaN typiques p-n et p-i-n à un coût raisonnable. Cela encourage la communauté scientifique à concevoir de nouvelles cellules solaires InGaN Schottky dans lesquelles la qualité de l'interface est améliorée en ajoutant une couche graduée et en prenant en considération les paramètres donnés dans cette étude numérique.

Références :

[1] Wu L, Zhao D, Jiang D, Chen P, Le L, Li L, et al. Effects of thin heavily Mg-doped GaN capping layer on ohmic contact formation of p-type GaN. Semiconductor Science and Technology. 2013;28:105020.

[2] Morrow WK, Lee C, DenBaars SP, Ren F, Pearton SJ. Role of graphene interlayers in mitigating degradation of Ni/Au ohmic contact morphology on p-type GaN. Vacuum. 2016;128:34-8.

[3] Adaine A. Optimisation numérique de cellules solaires à très haut rendement à base d'InGaN 2018.

[4] Mathieu H, Fanet H. Physique des semiconducteurs et des composants électroniques-6ème édition: Cours et exercices corrigés: Dunod; 2009.

[5] Matsuoka T. Progress in nitride semiconductors from GaN to InN—MOVPE growth and characteristics. Superlattices and Microstructures. 2005;37:19-32.

[6] Marouf Y, Dehimi L, Bouzid F, Pezzimenti F, Della Corte F. Theoretical design and performance of InxGa1-xN single junction solar cell. Optik. 2018;163:22-32.

[7] Li Y, Yang W, Tu Z, Liu Z, Yang F, Zhang L, et al. Schottky junction solar cells based on graphene with different numbers of layers. Applied Physics Letters. 2014;104:043903.

[8] Mathieu H, Fanet H. Physique des semiconducteurs et des composants électroniques-6ème édition: Cours et exercices corrigés: Dunod; 2009.

[9] Fan Z, Mohammad SN, Kim W, Aktas Ö, Botchkarev AE, Morkoç H. Very low resistance multilayer Ohmic contact to n-GaN. Applied Physics Letters. 1996;68:1672-4.

[10] Lin M, Ma Z, Huang F, Fan ZF, Allen L, Morkoc H. Low resistance ohmic contacts on wide band-gap GaN. Applied Physics Letters. 1994;64:1003-5.

[11] Kim JK, Lee J-L, Lee JW, Eoi Shin H, Jo Park Y, Kim T. Low resistance Pd/Au ohmic contacts to p-type GaN using surface treatment. Applied Physics Letters. 1998;73:2953-5.

[12] Song JO, Ha J-S, Seong T-Y. Ohmic-contact technology for GaN-based light-emitting diodes: Role of p-type contact. IEEE Transactions on electron devices. 2009;57:42-59.

[13] Zhou L, Lanford W, Ping A, Adesida I, Yang J, Khan A. Low resistance Ti/Pt/Au ohmic contacts to p-type GaN. Applied Physics Letters. 2000;76:3451-3.

[14] Delaney KT, Rinke P, Van de Walle CG. Auger recombination rates in nitrides from first principles. Applied Physics Letters. 2009;94:191109.

[15] Adaine A, Hamady SOS, Fressengeas N. Simulation study of a new InGaN p-layer free Schottky based solar cell. Superlattices and Microstructures. 2016;96:121-33.

[16] Zhao Y, Yan Q, Feezell D, Fujito K, Van de Walle C, Speck J, et al. Optical polarization characteristics of semipolar (303¯1) and (303¯1¯) InGaN/GaN light-emitting diodes. Optics Express. 2013;21:53.

[17] Chuang S, Chang C. k· p method for strained wurtzite semiconductors. Physical Review B. 1996;54:2491.

[18] Skriver HL, Rosengaard N. Surface energy and work function of elemental metals. Physical Review B. 1992;46:7157.

[19] Polyakov VM, Schwierz F. Low-field electron mobility in wurtzite InN. Applied Physics Letters. 2006;88:032101.

[20] Jun-Jun X, Dun-Jun C, Bin L, Zi-Li X, Ruo-Lian J, Rong Z, et al. Au/Pt/InGaN/GaN heterostructure schottky prototype solar cell. Chinese Physics Letters. 2009;26:098102.

[21] Mahala P, Behura SK, Dhanavantri C, Ray A, Jani O. Metal/InGaN Schottky junction solar cells: an analytical approach. Applied Physics A. 2015;118:1459-68.

[22] Chern KT, Allen NP, Ciarkowski TA, Laboutin OA, Welser RE, Guido LJ. GaInN/GaN solar cells made without p-type material using oxidized Ni/Au Schottky electrodes. Materials Science in Semiconductor Processing. 2016;55:2-6.

[23] Hamady SOS, Adaine A, Fressengeas N. Numerical simulation of InGaN Schottky solar cell. Materials Science in Semiconductor Processing. 2016;41:219-25.

[24] Brown G, Ager III J, Walukiewicz W, Wu J. Finite element simulations of compositionally graded InGaN solar cells. Solar Energy Materials and Solar Cells. 2010;94:478-83.

[25] Schubert E, Tu L, Zydzik G, Kopf R, Benvenuti A, Pinto M. Elimination of heterojunction band discontinuities by modulation doping. Applied Physics Letters. 1992;60:466-8.

[26] Miller N, Jones R, Yu K, Ager J, Liliental-Weber Z, Haller E, et al. Low-temperature grown compositionally graded InGaN films. physica status solidi c. 2008;5:1866-9.

[27] Jeng M-J. Simulation of Nonpolar p-GaN/iN/n-GaN Solar Cells. International Journal of Photoenergy. 2012;2012.

[28] Kushwaha AS, Mahala P, Dhanavantri C. Optimization of p-GaN/InGaN/n-GaN double heterojunction pin solar cell for high efficiency: simulation approach. International Journal of Photoenergy. 2014;2014.

[29] Ernst W. The Large Optics Of Carbon. Advances in Fabrication and Metrology for Optics and Large Optics: International Society for Optics and Photonics; 1989. p. 277-83.

[30] Martin G, Botchkarev A, Rockett A, Morkoc H. Valence-band discontinuities of wurtzite GaN, AlN, and InN heterojunctions measured by x-ray photoemission spectroscopy. Applied Physics Letters. 1996;68:2541-3.

[31] Wu J. When group-III nitrides go infrared: New properties and perspectives. Journal of Applied Physics. 2009;106:5.

[32] Xie C, Zhang X, Wu Y, Zhang X, Zhang X, Wang Y, et al. Surface passivation and band engineering: a way toward high efficiency graphene–planar Si solar cells. Journal of Materials Chemistry A. 2013;1:8567-74.

[33] Aleksiejūnas R, Sūdžius M, Gudelis V, Malinauskas T, Jarašiūnas K, Fareed Q, et al. Carrier transport and recombination in InGaN/GaN heterostructures, studied by optical four-wave mixing technique. physica status solidi (c). 2003:2686-90.

[34] Smiri B, Fraj I, Saidi F, Mghaieth R, Maaref H. Effect of piezoelectric field on type II transition in InAlAs/InP (311) alloys with different substrate polarity. Journal of Alloys and Compounds. 2018;736:29-34.

[35] Smiri B, Saidi F, Mlayah A, Maaref H. Effect of substrate polarity on the optical and vibrational properties of (311) A and (311) B oriented InAlAs/InP heterostructures. Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures. 2019;112:121-7.

[36] Bochkareva N, Zhirnov E, Efremov A, Rebane YT, Gorbunov R, Shreter YG. Tunnel-recombination currents and electroluminescence efficiency in InGaN/GaN LEDs. Semiconductors. 2005;39:594-9.

[37] Fabien CA, Gunning BP, Doolittle WA, Fischer AM, Wei YO, Xie H, et al. Low-temperature growth of InGaN films over the entire composition range by MBE. Journal of crystal growth. 2015;425:115-8.

[38] Egley J, Chidambarrao D. Strain effects on device characteristics: Implementation in drift-diffusion simulators. Solid-state electronics. 1993;36:1653-64.

[39] Smiri B, Fraj I, Bouzidi M, Saidi F, Rebey A, Maaref H. Effect of V/III ratio on the optical properties of (3 1 1) A and (3 1 1) B oriented InAlAs/InP heterostructures. Results in Physics. 2019;12:2175-82.

[40] Smiri B, Saidi F, Mlayah A, Maaref H. Power-and temperature-dependent photoluminescence investigation of carrier localization at inverted interface transitions in InAlAs/InP structures. Japanese journal of applied physics. 2020;59:022001.

[41] Lyons JL, Van de Walle CG. Computationally predicted energies and properties of defects in GaN. NPJ Computational Materials. 2017;3:1-10.

[42] Sharma B. Metal-semiconductor Schottky barrier junctions and their applications: Springer Science & Business Media; 2013.

[43] Neufeld CJ, Cruz SC, Farrell RM, Iza M, Lang JR, Keller S, et al. Effect of doping and polarization on carrier collection in InGaN quantum well solar cells. Applied Physics Letters. 2011;98:243507.

[44] Zhang H, Miller E, Yu E, Poblenz C, Speck J. Measurement of polarization charge and conduction-band offset at In x Ga 1− x N/GaN heterojunction interfaces. Applied Physics Letters. 2004;84:4644-6.

[45] Li Z, Lestradet M, Xiao Y, Li S. Effects of polarization charge on the photovoltaic properties of InGaN solar cells. physica status solidi (a). 2011;208:928-31.

[46] Kumakura K, Makimoto T, Kobayashi N, Hashizume T, Fukui T, Hasegawa H. Minority carrier diffusion length in GaN: Dislocation density and doping concentration dependence. Applied Physics Letters. 2005;86:052105.

[47] Cuevas A, Kerr MJ, Samundsett C, Ferrazza F, Coletti G. Millisecond minority carrier lifetimes in n-type multicrystalline silicon. Applied Physics Letters. 2002;81:4952-4.

[48] Ju J, Loitsch B, Stettner T, Schuster F, Stutzmann M, Koblmüller G. Trade-off between morphology, extended defects, and compositional fluctuation induced carrier localization in high In-content InGaN films. Journal of Applied Physics. 2014;116:053501.

[49] Wu J, Walukiewicz W, Yu KM, Ager III J, Haller E, Lu H, et al. Small band gap bowing in In 1− x Ga x N alloys. Applied Physics Letters. 2002;80:4741-3.

[50] Polyakov AY, Pearton S, Frenzer P, Ren F, Liu L, Kim J. Radiation effects in GaN materials and devices. Journal of Materials Chemistry C. 2013;1:877-87.

[51] Bhuiyan AG, Sugita K, Hashimoto A, Yamamoto A. InGaN solar cells: present state of the art and important challenges. IEEE Journal of photovoltaics. 2012;2:276-93.

[52] Brown G, Ager III J, Walukiewicz W, Schaff W, Wu J. Probing and modulating surface electron accumulation in InN by the electrolyte gated Hall effect. Applied Physics Letters. 2008;93:262105.

[53] Tersoff J. Dislocations and strain relief in compositionally graded layers. Applied Physics Letters. 1993;62:693-5.

[54] Yuan X, Sekiguchi T, Niitsuma J, Sakuma Y, Ito S, Ri S. Inhomogeneous distribution of dislocations in a SiGe graded layer and its influence on surface morphology and misfit dislocations at the interface of strained Si⁄ Si 0.8 Ge 0.2. Applied Physics Letters. 2005;86:162102.

[55] Chen H-W, Ku Y, Kuo Y-L. Effect of Pt/TiO2 characteristics on temporal behavior of o-cresol decomposition by visible light-induced photocatalysis. Water Research. 2007;41:2069-78.

[56] Haridas D, Chowdhuri A, Sreenivas K, Gupta V. Effect of thickness of platinum catalyst clusters on response of SnO2 thin film sensor for LPG. Sensors and Actuators B: Chemical. 2011;153:89-95.

[57] Rotermund H, Jakubith S, Kubala S, Von Oertzen A, Ertl G. Investigation of surfaces by scanning photoemission microscopy. Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena. 1990;52:811-9.

[58] Lide DR. CRC Handbook of Chemistry and Physics CRC. Boca Raton. 2008.

[59] Kaack M, Fick D. Determination of the work functions of Pt (111) and Ir (111) beyond 1100 K surface temperature. Surface science. 1995;342:111-8.

[60] Mesrane A, Rahmoune F, Oulebsir A, Mahrane A. 2D simulation study of In0. 62Ga0. 38N solar cell structure. Proceedings of the 2nd International Conference on Renewable Energy (CIER'14)2015.

[61] Kumakura K, Makimoto T, Kobayashi N, Hashizume T, Fukui T, Hasegawa H. Minority carrier diffusion lengths in MOVPE-grown n-and p-InGaN and performance of AlGaN/InGaN/GaN double heterojunction bipolar transistors. Journal of crystal growth. 2007;298:787-90.

[62] Hossain MA, Islam MR, Hossain M, Hashimoto A, Yamamoto A. Dislocation reduction in heteroepitaxial In x Ga 1-x N using step-graded interlayer for future solar cells. Materials for Renewable and Sustainable Energy. 2014;3:20.

[63] Zhang Y, Kappers M, Zhu D, Oehler F, Gao F, Humphreys C. The effect of dislocations on the efficiency of InGaN/GaN solar cells. Solar Energy Materials and Solar Cells. 2013;117:279-84.

[64] Sassi G. Theoretical analysis of solar cells based on graded band-gap structures. Journal of Applied Physics. 1983;54:5421-7.

[65] Virshup G, Ford C, Werthen J. A 19% efficient AlGaAs solar cell with graded band gap. Applied Physics Letters. 1985;47:1319-21.

[66] Fischer A, Wei Y, Ponce F, Moseley M, Gunning B, Doolittle W. Highly luminescent, high-indium-content InGaN film with uniform composition and full misfit-strain relaxation. Applied Physics Letters. 2013;103:131101.

[67] Wei Y. Structural Properties of III-Nitride Semiconductors: Arizona State University; 2014.

Conclusion générale

Conclusion Générale

Conclusion générale :

Ce travail de thèse s'est donné pour objectif de simuler et d'optimiser des structures de cellules solaires Schottky à base d'InGaN à haut rendement. Nous avons utilisé une approche de simulation rigoureuse basée, essentiellement, sur des modèles et des paramètres empiriques, associée à une nouvelle approche d'optimisation des cellules solaires. L'une des originalités de ce travail est d'avoir utilisé des méthodes d'optimisation mathématique associées à des modèles physiques empiriques pour étudier les performances optimales de différentes structures de cellules solaires Schottky à base d'InGaN.

Tout au long de notre travail, nous avons cherché à comprendre les phénomènes physiques qui se produisent dans ces dispositifs, et nous avons ainsi optimisé les modèles numériques de manière adéquate. Cette étude a été consacrée à la simulation et l'optimisation d'une cellule solaire Schottky et à l'amélioration des interfaces des cellules solaire à base des hétérostructures InGaN/GaN.

En présentant les principales propriétés de l'alliage InGaN, nous avons vu que le matériau InGaN présente plusieurs avantages, dont le plus notoire étant la large couverture spectrale de sa bande d'énergie interdite qui permet de concevoir différents types de cellules solaires à haut rendement en utilisant le même matériau. En effet, ce dernier possède aussi certains inconvénients dont les principaux sont le manque de substrats adaptés, et la difficulté d'élaborer une couche de type P. Cela constitue, ainsi, des verrous technologiques majeurs qu'il faut prendre en considération. Nous avons présenté au cours de notre travail, les différentes approches utilisées pour optimiser les structures de cellules solaires.

Afin d'éviter les contraintes technologiques liées à l'élaboration de la couche P, nous avons, présenté l'étude de cellules solaires sans couche P (cellule solaire Schottky). Dans un premier temps, nous avons simulé et optimisé une structure Schottky composée d'une couche InGaN dopée N sur une couche fortement dope de GaN et en contact avec une couche métallique de 5 nm. Quatre paramètres de la structure ont été optimisés, nous avons trouvé un rendement optimal de 18,48%obtenu avec une composition d'indium de 54% pour un travail de sortie de la couche métallique de 6,3eV. Une performance satisfaisante pour une structure à jonction simple. Nous avons aussi étudié les effets susceptibles de dégrader les performances de la cellule, notamment la polarisation et les défauts structuraux. Nous avons vu que les valeurs de la polarisation rapportées dans la littérature ont influence une sur les performances de la cellule. En revanche, l'augmentation de la polarisation entraîne une forte diminution des performances due à une accumulation de charges aux interfaces. Nous avons

également vu que si l'on inclut ces différentes contraintes, la cellule présente un rendement de 2.25% comparable à ceux obtenus à faible composition d'indium.

Pour résoudre ces problèmes nous avons montré que l'introduction de couches avec un gap graduel entre les couches de GaN et d'InGaN fait disparaître les discontinuités de bandes et améliore l'interface et significativement l'efficacité de la cellule. Nous avons ensuite fait varier les différents paramètres (épaisseurs, dopages) afin d'optimiser les performances de la cellule solaire Schottky. Nous avons effectué cette optimisation pour 75% à 10 % d'indium. Nous avons obtenu une efficacité importante de 21,69 % pour les valeurs optimales de W_f = 6,3 eV, x_{In} = 54 %,T_{InGaN} = 0,18µm et $N_d = 2 \times 10^{17}$ cm^{-3}. De plus, il est à noter que le dispositif étudié rivalise avec le rendement des InGaN typiques p-n et p-i-n à un coût raisonnable. Cela encourage la communauté scientifique à concevoir de nouvelles cellules solaires InGaN Schottky dans lesquelles la qualité de l'interface est améliorée en ajoutant une couche graduée et en prenant en considération les paramètres donnés dans cette étude numérique.

Résume

Résume :

L'alliage de Nitrure de Gallium et d'Indium (InGaN) est devenu au cours des dernières années un semi-conducteur important pour la réalisation de composants optoélectroniques, du fait de sa bande interdite modulable en fonction de la composition d'indium, entre 0.7 eV à 3.4 eV. Ceci permet l'absorption d'une grande partie du spectre solaire et fait de l'alliage InGaN un excellent candidat pour la réalisation de cellules solaires multijonctions à très haut rendement.

Ce travail de thèse a permis une investigation approfondie sur les performances de différentes structures de cellules solaire à base d'InGaN. Il s'inscrit dans le cadre d'un projet visant à associer des méthodes d'optimisation mathématique multi variée à une démarche rigoureuse de simulation s'appuyant autant que possible sur des modèles et résultats expérimentaux. Il s'agit d'une nouvelle approche qui permet d'étudier les performances des cellules solaires en optimisant simultanément plusieurs paramètres (physiques et géométriques) de la cellule solaire. Nous avons étudié pour cette thèse, une nouvelle structure sans couche P (cellule solaire Schottky). Cette étude nous permettre d'évaluer les performances optimales que pourraient avoir les cellules à base d'InGaN et seront importantes pour la conception et l'élaboration future de cellules solaires InGaN à haut rendement.

La nouvelle cellule solaire Schottky avec une couche à composition graduée est étudiée à l'aide d'une technique numérique avancée et de modèles physiques réalistes. Notre étude s'est concentrée sur l'effet de décalage de bande entre n-GaN/n-InGaN et l'amélioration de la qualité de l'interface. En utilisant des paramètres extraits de travaux récents publiés, nous avons obtenu une efficacité importante de 21,69% pour les valeurs optimales de W_f = 6,3 eV, x_{In} = 54%, TI_{nGaN} = 0,18 µm et $N_d = 2 \times 10^{17}$ cm^{-3}. De plus, il est Il est à noter que le dispositif étudié rivalise avec le rendement de l'InGaN p-n et p-i-n typique à un coût raisonnable. Cela encourage la communauté scientifique à concevoir de nouvelles cellules solaires InGaN Schottky dans lesquelles la qualité de l'interface est améliorée en ajoutant une couche graduée et en prenant en considération les paramètres donnés dans cette investigation numérique.

Mots-clés : cellules solaires Schottky ; n-GaN/n-InGaN; Hétéro-interface; Couche graduelle, amélioration de l'interface ; Optimisation; Atlas -Silvaco.

Abstract

Abstract:

In recent years, Gallium Indium Nitride (InGaN) alloy has become a semiconductor of choice for the realization of optoelectronic devices, because of its wide spectral coverage, with a bandgap that can be modulated, by changing the indium composition, between 0.7 eV and 3.4 eV. This allows the absorption of a large part of the solar spectrum and makes the InGaN alloy an excellent candidate for the realization of very high efficiency multi-junction solar cells.

This thesis work allowed an in-depth investigation of the performance of different solar cell structures based on InGaN. It is part of a project aiming to combine multivariate mathematical optimization methods with a rigorous simulation approach based as much as possible on experimental models and results. This is a new approach to study the performance of solar cells by simultaneously optimizing several parameters (physical and geometric) of the solar cell. We studied for this thesis, a new structure without P layer (Schottky solar cell). This study will allow us to assess the potential optimal performance of InGaN-based cells and will be important for the design and future development of high efficiency InGaN solar cells.

The new Schottky solar cell with a graded composition layer is investigated using advanced numerical technique and realistic physical models. Our study focused on the band shift effect between n-GaN/n-InGaN and improvement of interface quality. Using parameters extracted from recently published works, we obtained a significant efficiency of 21.69% for the optimal values of W_f = 6.3 eV, x_{In} = 54%, T_{InGaN} = 0.18 μm and $N_d = 2 \times 10^{17}$ cm^{-3}. Additionally, it is noteworthy that the investigated device rivals the performance of typical p-n and p-i-n InGaN at a reasonable cost. This encourages the scientific community to design new InGaN Schottky solar cells in which the interface quality is improved by adding a graded layer and taking into consideration the parameters given in this numerical investigation.

Keywords: Schottky solar cells; n-GaN/n-InGaN; Hetero-interface; Graded layer, Interface amelioration; Optimization; Silvaco-Atlas software.

ملخص

ملخص :

أصبحت سبيكة إنديوم جاليوم نيتريد (InGaN) في السنوات الأخيرة أحد أشباه الموصلات المهمة لإنتاج المكونات الإلكترونية الضوئية ، نظرًا لفجوة النطاق القابلة للتعديل اعتمادًا على تركيبة الإنديوم ، بين eV0.7 إلى eV3.4. يسمح ذلك بامتصاص جزء كبير من الطيف الشمسي ويجعل سبيكة InGaN مرشحًا ممتازًا لإنتاج خلايا شمسية متعددة الوصلات عالية الكفاءة.

سمح هذا العمل الخاص بالأطروحة بإجراء تحقيق متعمق في أداء هياكل الخلايا الشمسية المختلفة القائمة على InGaN. إنه جزء من مشروع يهدف إلى الجمع بين طرق التحسين الرياضية متعددة المتغيرات مع نهج محاكاة صارم يعتمد قدر الإمكان على النماذج والنتائج التجريبية. هذا نهج جديد يسمح بدراسة أداء الخلايا الشمسية من خلال تحسين العديد من المعلمات (المادية والهندسية) للخلية الشمسية في وقت واحد. درسنا لهذه الأطروحة ، بنية جديدة بدون طبقة P (خلية شمسية شوتكي). ستسمح لنا هذه الدراسة بتقييم الأداء الأمثل الذي يمكن أن تتمتع به الخلايا القائمة على InGaN وستكون مهمة للتصميم والتطوير المستقبلي لخلايا InGaN الشمسية عالية الكفاءة.

يتم فحص خلية Schottky الشمسية الجديدة بطبقة تكوين متدرجة باستخدام تقنية عددية متقدمة ونماذج فيزيائية واقعية. ركزت دراستنا على تأثير تحول النطاق بين n-GaN / n-InGaN وتحسين جودة الواجهة. باستخدام المعلمات المستخرجة من الأعمال المنشورة مؤخرًا ، حصلنا على كفاءة كبيرة تبلغ 21.69٪ للقيم المثلى لـ W_f= 6.3 eV ، x_{In} = 54% ، T_{InGaN} = 0.18 µm و $N_d = 2 \times 10^{17}$ cm^{-3}. بالإضافة إلى ذلك ، من الجدير بالذكر أن الجهاز الذي تم فحصه ينافس أداء p-n و p-i-n InGaN النموذجي بتكلفة معقولة.

يشجع هذا المجتمع العلمي على تصميم خلايا شمسية InGaN Schottky جديدة يتم فيها تحسين جودة الواجهة بإضافة طبقة متدرجة مع مراعاة المعلمات الواردة في هذا البحث الرقمي.

الكلمات المفتاحية: خلايا شوتكي الشمسية. n-GaN / n-InGaN ؛ واجهة غير متجانسة طبقة تدريجية ، تحسين الواجهة ؛ الاقوي؛ أطلس سيلفاكو.