

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et De la Recherche Scientifique
Université Djillali LIABES De Sidi Bel Abbas



Faculté de Génie Electrique
Département d'Électronique



THESE

Présentée pour l'obtention du diplôme de

DOCTORAT EN SCIENCES

Option : Microélectronique

PAR

M^{elle} BOUMESJED Aicha

THEME

**Etude, Simulation et Caractérisation des SchottkySC,
IBSC et du SSD à base de GaAsN et de GaN pour le
Photovoltaïque et l'Electronique THz**

Soutenue le

, devant le jury :

Mr Chellali Mohammed	Professeur	UDL-SBA	Président
Mme Mansour-Mazari Halima	Professeur	UDL-SBA	Directeur de thèse
Melle Ameer Kheira	MCA	UDL-SBA	co-directeur
Mr Hamdoune Abdelkader	Professeur	UAB-Tlemcen	Examineur
Mme OuldAbbas-Bensaoula Amaria	Professeur	UAB-Tlemcen	Examineur
Mr Lasri Boumediene	Professeur	UMT-Saida	Examineur
Mme Benamara Zineb	Professeur	UDL-SBA	Invitée

Année universitaire 2019-2020

Dédicaces

Tous les mots ne sauraient exprimer la gratitude, l'amour, le respect, la reconnaissance, c'est tout simplement que je dédie ce travail à:

la mémoire de mon très cher père qui était et sera toujours ma fierté

ma très chère mère

mes chères sœurs

mes chers (es) amis (es) pour tous les bons moments qu'on a passé ensemble

tous ceux qui ont contribué de près ou de loin pour que ce travail soit terminé.

Remerciements

Le travail, présenté dans cette thèse de doctorat, a été réalisé au laboratoire de Micro-Electronique Appliquée AMEL de l'université Djillali Liabes de Sidi Bel Abbes.

Je tiens à remercier en tout premier lieu notre Dieu ALLAH le Tout Puissant, Créateur de la terre et de l'univers, de m'avoir donné le courage, la volonté et la patience pour mener à terme ce présent travail.

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude et mes sincères remerciements à Monsieur M. CHELLALI, Professeur à l'Université Djillali Liabes de Sidi Bel Abbes, qui m'a fait l'honneur d'accepter la présidence du jury de cette thèse.

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude et mes sincères remerciements à Monsieur A. HAMDOUNE et à Madame A. OULDABBAS-BENSAOULA, Professeurs à l'université Abou Bakr Belkaid de Tlemcen, qui ont manifesté l'amabilité d'examiner ce travail.

J'exprime ma reconnaissance à Mr B. LASRI, Professeur à l'université Moulay Tahar de Saida, qui m'a fait un grand honneur en acceptant de juger le travail de cette thèse.

Je voudrais tout particulièrement exprimer mes sincères reconnaissances et ma profonde gratitude à Madame Z. BENAMARA, Professeur à l'Université Djillali Liabes de Sidi Bel Abbes et directrice du laboratoire AMEL, de m'avoir accueilli dans ce laboratoire de recherche. Aussi, je tiens à lui présenter mes remerciements les plus élogieux de m'avoir honoré par sa présence au jury autant qu'invitée.

Je tiens à remercier Madame H. MANSOUR-MAZARI, Professeur à l'université Djillali Liabes de Sidi Bel Abbes, pour avoir accepté de diriger cette thèse. Elle m'a fait bénéficier de son expérience et de sa rigueur scientifique. Elle m'a apporté une aide considérable tout au long de cette étude, ses conseils judicieux et ses encouragements ont été bénéfiques pour mener à bien le travail et la rédaction de cette thèse.

Je voudrais tout particulièrement exprimer mes sincères reconnaissances et ma profonde gratitude à mon Co-encadreur Melle K. AMEUR, Maitre de conférences à l'université Djillali Liabes de Sidi Bel Abbes, pour ses conseils scientifiques, sa disponibilité et son encouragement, ainsi que pour son aide précieuse pour mener ce travail à son terme.

Enfin, je tiens à remercier, tous mes amis (es) pour leurs encouragements et leurs soutiens durant nos années d'étude.

TABLE DES MATIERES

TABLE DES MATIERES

<i>Introduction générale</i>	02
------------------------------------	----

Partie I : Etude et Simulation des dispositifs types SchottkySC et IBSC à base du matériau GaAsN pour le Photovoltaïque

Chapitre 1: NOTIONS DE BASE SUR LA CONVERSION PHOTOVOLTAÏQUE

1. INTRODUCTION.....	09
1.1 CELLULES SOLAIRES DE PREMIERE GENERATION.....	13
1.2 CELLULES SOLAIRES DE DEUXIEME GENERATION.....	15
1.3 CELLULES SOLAIRES DE TROISIEME GENERATION.....	16
1.3.1 Cellules solaires multijonctions.....	16
1.3.2 Cellules solaires à bande intermédiaire (IBSC)	19
1.3.3 Cellules solaires à pérovskites.....	20
2. CONVERSION PHOTOVOLTAÏQUE.....	21
2.1 THEORIE DES CELLULES SOLAIRES A JONCTION P-N.....	21
2.2 THEORIE DES CELLULES SOLAIRES A BARRIERE SCHOTTKY.....	27
2.3 THEORIE DES CELLULES SOLAIRES A BANDE INTERMEDIAIRE	30
3. ARCHITECTURE D'UNE CELLULE PHOTOVOLTAÏQUE	33
4. CONCLUSION	35
Références.....	36

CHAPITRE 2: ÉTAT DES CONNAISSANCES SUR L'ALLIAGE GaAsN

1. INTRODUCTION	40
2. LE GaAsN, L'EXCEPTION DES SEMICONDUCTEURS III-V.....	40
3. STRUCTURE ELECTRONIQUE DES ALLIAGES GaAsN.....	43
4. PROPRIETES ELECTRONIQUES DES ALLIAGES GAASN.....	46
4.1 MOBILITE DES ELECTRONS.....	46
4.2 MOBILITE DES TROUS.....	48
5. PROPRIETES OPTIQUES DES ALLIAGES GaAsN.....	49
6. LES DEFAUTS DANS LES ALLIAGES GaAsN.....	53
7. TECHNOLOGIE DE FABRICATION DU COMPOSE TERNAIRE GaAsN.....	59
7.1 TECHNIQUE DE CROISSANCE MBE.....	60
7.2 TECHNIQUE DE CROISSANCE MOVPE.....	61
7.3 TECHNIQUE DE CROISSANCE CBE.....	62
8. CONCLUSION	63
Références	64

Chapitre 3: SIMULATION DE LA CELLULE SOLAIRE DE TYPE SCHOTTKY A BASE DE GaAsN

1. INTRODUCTION	69
2. LE SIMULATEUR SCAPS – 1D	69
3. DESCRIPTION DE LA CELLULE SOLAIRE SIMULEE	74
4. RESULTATS ET DISCUSSIONS	76
4.1 EFFET DU TRAVAIL DE SORTIE DU METAL DU CONTACT SCHOTTKY	77
4.2 EFFET DU DOPAGE DE LA COUCHE ACTIVE GaAsN	78
4.3 EFFET DE L'ÉPAISSEUR DE LA COUCHE ACTIVE	80
5. CONCLUSION	85
Références	86

CHAPITRE 4: SIMULATION DE LA CELLULE SOLAIRE A BANDE INTERMEDIAIRE IBSC A BASE DE GaAsN

1. INTRODUCTION	89
2. CONCEPT DES CELLULES SOLAIRES A BANDE INTERMEDIAIRE IBSC	90
3. IDENTIFICATION DES MATERIAUX SEMICONDUCTEURS ABOUTISSANT A DES BANDES INTERMEDIAIRES	92
4. LE SIMULATEUR AMPS – 1D	95
5. DESCRIPTION DE LA CELLULE SOLAIRE SIMULEE	97
6. RESULTATS ET DISCUSSIONS	98
6.1 ETUDE DE L'INFLUENCE DE LA BANDE INTERMEDIAIRE	100
6.1.1 Effet de la densité et du niveau énergétique de la bande intermédiaire (IB) sur les grandeurs photovoltaïques	100
6.1.2 Effet de l'épaisseur de la couche absorbante (n-GaAsN)	103
6.2 EFFET DES PARAMETRES TECHNOLOGIQUES DE L'EMETTEUR (P-GaAs)	105
6.3 EFFET DES PARAMETRES TECHNOLOGIQUES DE LA BASE (N-GaAs)	106
6.4 ETUDE DE LA CARACTERISTIQUE J-V	108
6.5 RENDEMENT QUANTIQUE	109
7. CONCLUSION	112
Références	113

Partie II : Simulation et Caractérisation du dispositif type SSD à base du matériau GaN pour l'Electronique TéraHertz

Chapitre 1: ETAT DES CONNAISSANCES SUR LES SSDS A BASE DE GAN

1. INTRODUCTION	116
2. LA TECHNOLOGIE THZ	117
2.1 SOURCES THZ	117
2.2 DETECTEURS THZ	120

3. EFFET GUNN	122
3.1 CONCEPT DE L'EFFET GUNN	122
3.1.1 Transfert électronique intervallée	122
3.1.2 Instabilité et formation de domaine	129
3.2 DIODE GUNN CONVENTIONNELLE ET LIMITATIONS	131
3.3 DISPOSITIFS GUNN PLANAIRES	132
3.4 DISPOSITIF DE COMMUTATION AUTOMATIQUE (SSD)	133
3.5 DIODES A COMMUTATION AUTOMATIQUE SSD A BASE DE GAN	136
3.5.1 Etat de l'art des SSD à base de GaN	136
3.5.2 PROPRIETE DU MATERIAU GAN UTILISE DANS LA FABRICATION DES SSD	142
3.5.2.1 Structure cristalline	142
3.5.2.2 Structure de bande	143
3.5.2.3 Densité de porteurs	143
3.5.2.4 Champ de claquage	144
3.5.2.5 Effet de polarisation	144
3.5.2.6 Substrats pour l'hétéro-épitaxie	148
3.5.2.7 Hétérostructure AlGaIn/GaN	149
4 CONCLUSION	154
Références	155

Chapitre 2: SIMULATION 2D ET 3D SOUS ENVIRONNEMENT ATLAS-SILVACO DES SSDs A BASE DE GAN

1. INTRODUCTION	161
2. LE SIMULATEUR SILVACO	162
2.1 PRESENTATION DU LOGICIEL SILVACO	162
2.1.1 DECKBUILD	162
2.1.2 ATLAS	162
2.1.3 Entrées et sorties ATLAS	164
2.1.4 TONYPLOT	165
2.2 PHYSIQUE DU DISPOSITIF	165
2.2.1 Équation de Poisson	165
2.2.2 Equations de continuité des porteurs	166
2.2.3 Equations de transport	166
2.3 MODELES PHYSIQUES	167
2.3.1 Statistiques des porteurs et du transport	167
2.3.1.1 Modèle de transport drift-diffusion	167
2.3.1.2 Modèle de transport Energy balance	169
2.3.2 MOBILITE	170
2.3.2.1 Mobilité à faible champ	170
2.3.2.2 Mobilité parallèle en fonction du champ électrique	171
2.3.3 Modèles de génération–recombinaison des porteurs	172
2.3.3.1 Recombinaison de Shockley-Read-Hall (SRH)	172
3. SIMULATION DES SSD	173
3.1 SIMULATION ATLAS DES SSDs à 2D	176
3.1.1 Influence de la densité de charges d'interface sur les caractéristiques I-V	176
3.1.2 Influence de la polarisation sur la densité des électrons, du champ électrique et du	

potentiel électrostatique dans le canal.....	179
3.1.3 Recherche de l'émission Gunn.....	183
3.2 SIMULATION ATLAS DES SSDs à 3D	184
3.2.1 Caractéristique courant-tension (I-V)	185
3.2.2 Recherche de l'émission Gunn.....	186
3.2.3 Comparaison des résultats de la simulation 3D avec des résultats Monte Carlo.....	187
3.2.3.1 Caractéristiques courant-tension (I-V)	188
3.2.3.2 Recherche de l'émission Gunn.....	189
4. CONCLUSION.....	190
Références.....	191
 <i>Conclusion générale et perspectives</i>	 194

INTRODUCTION GENERALE

INTRODUCTION GENERALE

La seconde moitié des années 90 a connu une expansion explosive de la recherche sur les semiconducteurs contenant de l'azote et s'est poursuivie sans relâche jusqu'à présent ^[1]. Les premières études sur le GaN et les composés et alliages apparentés avaient tendance à susciter un scepticisme quant à la possibilité d'utiliser des dispositifs basés sur des matériaux présentant des densités de défauts aussi élevées. Cependant, à ce jour, la plupart de ces doutes ont été dissipées par les améliorations apportées à la technologie de croissance épitaxiale, associées à une meilleure compréhension de la relation entre les défauts et les performances du dispositif.

Il existe deux classes, la classe des nitrures «classiques» GaN, AlN, InN et leurs alliages, et la classe des nitrures «dilués», dans lesquels quelques pour cent en concentration d'azote (N) sont introduits dans un semiconducteur III-V plus commun tel que GaAs, par exemple, pour former le GaAsN ou le GaInAsN. Bien que, à bien des égards, ces deux classes de matériaux III-V contenant de l'azote ne soient pas étroitement liées, elles partagent le même attribut, à savoir que les connaissances sur leurs propriétés ont évolué assez rapidement en très peu de temps.

Dans le cas des nitrures conventionnels comme les matériaux nitrurés d'éléments III : Ga(Al, In, B)N et leurs alliages ont été considérés comme des matériaux semiconducteurs très intéressants et très prometteurs pour leurs potentialités d'application en microélectronique, pour la fabrication de composants de puissance à haute fréquence, et en optoélectronique. Ceci est principalement dû au fait que l'écart d'énergie peut être réglé sur une large gamme spectrale de la région visible à la région ultraviolette du spectre électromagnétique. L'arrivée de ces matériaux à large bande interdite sur le marché des semiconducteurs, constitue une avancée sérieuse pour l'électronique de puissance. Les nitrures d'élément III présentent plusieurs avantages tels qu'une large bande interdite, une mobilité électronique raisonnable, un fort champ de claquage et une grande stabilité chimique.

Dans le cas des semiconducteurs à base de nitrure dilué III-V-N, tels que les alliages GaAs_{1-x}N_x et In_yGa_{1-y}As_{1-x}N_x, ont fait l'objet d'une attention considérable en raison de leurs propriétés physiques uniques et du large éventail de leurs applications possibles en optoélectronique, en particulier dans les diodes laser infrarouges pour 1.3 et 1.55 μm ^[2, 3] et les cellules solaires multi-jonctions à haute efficacité (MJSC) ^[4, 5] et les cellules solaire à bande intermédiaire IBSC et à multi-bande ^[6, 8]. Parmi ces alliages de nitrure dilué, on s'intéresse au nitrure d'arséniure de gallium (GaAsN) qui est un matériau optoélectronique important, car ses propriétés optiques peuvent en principe être adaptées d'un semiconducteur de type GaAs au semiconducteur de type GaN, couvrant ainsi une vaste région



optique allant du proche infrarouge à l'ultraviolet ^[9]. Cependant, contrairement aux systèmes d'alliages à base de nitrure de groupe III, le GaN et le GaAs ont une miscibilité limitée aux deux extrémités de l'axe de la composition et l'écart de miscibilité a été attribué à un déséquilibre important dans leurs constantes de réseau ^[10]. Weyers et al. ^[11] ont été les premiers à rapporter des films d'alliages GaAsN riches en arsenic contenant 2% d'azote, qui ont été réalisés par dépôt chimique en phase vapeur par procédé chimique assisté par plasma (MOCVD). Contrairement aux attentes, ils ont signalé un décalage considérable vers le rouge dans la limite d'absorption et de la photoluminescence avec l'augmentation de la teneur en azote, ce qui a été attribué à une courbure en bande interdite sévère.

Par la suite, des travaux expérimentaux et théoriques approfondis ont été menés sur les films des alliages GaAsN riches en arsenic, dont quelques références représentatives sont données ici ^[12-14]. Ces rapports ont montré que, bien que le paramètre de courbure soit important (~ 20 eV) à de petites concentrations d'azote, le changement de bande interdite était extrêmement non linéaire. Ce qui entraînait une réduction du paramètre de courbure à des concentrations plus élevées d'azote. Le comportement complexe et anormal de la bande interdite et l'incorporation d'azote dans les alliages III-N-V ont été expliqués par Shan et al. ^[15] sur la base d'un modèle de bande anti-croisement (BAC).

Les progrès des techniques de croissance ainsi que les enjeux industriels de ces alliages stimulent les activités de recherche sur les III-V-N.

Dans notre travail de recherche, on s'intéresse aux matériaux AlGaIn et GaIn du côté des semiconducteurs de l'élément III-nitruré classiques et au matériau GaAsN du côté des semiconducteurs de l'élément III-nitruré dilués. Ces semiconducteurs sont beaucoup étudiés en raison de leur important potentiel dans les dispositifs électroniques comme les diodes (SSDs), les transistors HEMTS, les capteurs et les cellules solaires.

Le manuscrit se divise en deux axes de recherche.

Le premier axe concerne le domaine du photovoltaïque. Le travail va porter sur les cellules solaires à base d'alliages III-V nitrurés ($\text{III-V}_{1-x}\text{N}_x$). Actuellement, de nombreuses recherches s'orientent vers l'amélioration de l'efficacité des cellules solaires. En effet, la variation de l'incorporation d'azote dans ces alliages ternaires permet la modification considérable de leurs propriétés physiques et optiques. Généralement, ces nouveaux matériaux sont déposés en couches minces et présentent des rendements intéressants, ce qui pourrait être un avantage pour la réduction des coûts de production. A l'heure actuelle l'étude des cellules solaires à base de GaAsN n'en est qu'à ses débuts. L'étude théorique va porter sur la simulation et l'optimisation des paramètres de sortie de la cellule photovoltaïque de types Schottky SchottkySC et à bande intermédiaire IBSC à base de matériau III-V-N dilué GaAsN.



Le deuxième axe concerne le domaine des ondes électromagnétiques TéraHertz. Le travail va porter sur les diodes auto-commutantes ou Self-Switching Diodes (SSD) en nitrure de Gallium.

Aujourd'hui, le domaine des sciences et technologies TéraHertz gagne un intérêt international en raison de ses nombreuses applications allant des systèmes de transmission sans fils ultra rapide, au diagnostic médical, au contrôle de qualité et à la sécurité industrielle.

Le domaine des ondes électromagnétiques TéraHertz est compris entre le domaine optique (infrarouge), en fabriquant des lasers dont la longueur d'onde est de plus en plus grande, et le domaine électronique, en fabriquant des composants émetteurs de micro-ondes dont la fréquence ne fait qu'augmenter. L'évolution physique de ces deux domaines les amène à se rapprocher de ce que l'on a appelé jusqu'à maintenant le Gap TéraHertz.

Le travail proposé entre dans ce cadre et va porter sur la simulation et la caractérisation des SSDs (Self-Switching Diodes) à base nitrure de Gallium. Le nouveau concept de diode est peut-être non seulement la diode la plus simple à ce jour, mais aussi le plus rapide des nanodispositifs électroniques jamais rapportés.

Les composants SSD sont des dispositifs qui, sous certaines conditions de topologies, peuvent produire sous forte polarisation des oscillations de courant. Ces comportements, modélisés et validés théoriquement pour le nitrure de gallium, peuvent produire des oscillations dans la gamme THz.

Dans ce cadre, les caractéristiques électriques des différentes structures SSDs à base de GaN sont étudiées à l'aide d'une modélisation physique. Le package de simulation ATLAS est utilisé et une comparaison des résultats obtenus avec des résultats expérimentaux fournis et des résultats de simulation Monte-Carlo publiés dans la littérature.

L'objectif fondamental de ces travaux est surtout d'apporter un regard critique sur les résultats électriques issus d'une simulation par rapport aux résultats expérimentaux qui restent indispensables. Les compétences de simulation, de croissance de matériaux, de processus technologique et de caractérisation rassemblés nous mèneront à une meilleure compréhension des phénomènes physiques et à suggérer de futures idées.

Ce manuscrit est organisé en deux parties

La partie I: Etude et simulation des cellules solaire à base des matériaux III-N dilués (GaAsN)

Le premier chapitre est destiné aux personnes qui n'ont pas de connaissance dans le domaine photovoltaïque (PV). C'est la raison pour laquelle nous allons introduire les principes du PV de manière la plus simple possible. Ce chapitre présente les notions fondamentales sur les cellules solaires à jonction PN tels que l'effet photovoltaïque, les paramètres de sortie (courant de court-circuit, rendement, tension de circuit ouvert et facteur de forme) et la réponse spectrale.



Un bref aperçu sera donné sur les variantes de cellules solaires telles que les cellules solaires à barrière Schottky (SchottkySC) et les cellules solaires à bande intermédiaire (IBSC). Ces notions vont servir dans la suite de ce travail.

Le deuxième chapitre aborde le portrait des connaissances actuelles sur les alliages GaAsN, traite la particularité de la structure de bandes des alliages III-V_{1-x}N et présente une revue des études théoriques de la structure de bande de GaAsN. Ce chapitre résume les connaissances théoriques et expérimentales actuelles des propriétés électroniques et optiques des alliages GaAsN en incluant les types des défauts existant dans l'alliage GaAsN.

Le troisième chapitre présente une simulation numérique complète concernant la cellule SchottkySC à l'aide du simulateur SCAPS. Cette simulation nous permettra d'en tirer les paramètres géométriques et physiques optimaux permettant d'obtenir le meilleur rendement énergétique possible de la cellule solaire Schottky à base de matériau GaAs_{1-x}N_x.

Le quatrième chapitre présente une simulation numérique à l'aide d'un simulateur d'analyse de la structure microélectronique et photonique (AMPS) concernant la cellule IBSC. Cette simulation nous permettra d'explorer la possibilité d'accroître le rendement de la nouvelle conception de cellule solaire IBSC à base du matériau GaAs_{1-x}N_x.

La partie II: Etude et simulation des SSDs à base de GaN

Le premier chapitre présente l'intérêt de la technologie térahertz et l'intérêt des diodes Gunn planaires (SSD) comme émetteur et détecteur dans ce domaine. Ce chapitre aborde un état de l'art des travaux réalisés dans ce contexte ainsi qu'un passage en revue des principales propriétés électroniques du GaN et de l'AlGaN.

Le deuxième chapitre présente une simulation à 2D et à 3D sous environnement ATLAS-SILVACO des SSD à base de GaN. Le but est d'étudier les caractéristiques électriques de ces différentes structures et de les comparer avec les résultats expérimentaux disponibles pour valider le modèle de simulation configuré. La validation du modèle configuré nous permettra de tester la capacité d'émettre un rayonnement THz pour les différentes structures des SSDs étudiées.

Enfin, on terminera notre étude par une conclusion générale et des perspectives.



REFERENCES

- [1] **Vurgaftman** , J. R. Meyer, "Band Parameters for Nitrogen-Containing Semiconductors", J. Appl. Phys. 94, 3675 (2003). doi: 10.1063/1.1600519
- [2] **KONDOW M., UOMI K., NIWA A., KITATANI T., WATAHIKI S., YAZAWA Y.**, Japan. J. Appl. Phys., 35, 1273, (1996).
- [3] **NAKAHARA K., KONDOW M., KITATANI T., LALSON M. C., UOMI K.**, IEEE Photonics Technol. Lett., 10, 487, (1998).
- [4] **FRIEDMAN D.J., GEISZ J.F., KURTZ S.R., OLSON J.M.**, J. Cryst. Growth, 195, 409, (1998).
- [5] **KURTZ S. R., MYERS D., OLSONET J. M.**, Proceedings of 26th IEEE PVSEC, IEEE, New York, 875, (1997).
- [6] **N. Lopez, L. A. Reichertz, K. M. Yu, K. Campman, and W. Walukiewicz**, "Engineering the Electronic Band Structure for Multiband Solar Cells", PHYSICAL REVIEW LETTERS, PRL 106, 028701 (2011).
- [7] **N. Ahsan, N. Miyashita, M. Monirul Islam, K. Man Yu, W. Walukiewicz and Y. Okada**, "photon excitation in an intermediate band solar cell structure", APPLIED PHYSICS LETTERS 100, 172111 (2012).
- [8] **Y. Okada, N. J. Ekins-Daukes, T. Kita, R. Tamaki, M. Yoshida, A. Pusch, O. Hess, C. C. Phillips, D. J. Farrell, K. Yoshida, N. Ahsan, Y. Shoji, T. Sogabe, and J.-F. Guillemoles**, "Intermediate band solar cells: Recent progress and future directions", Applied Physics Reviews 2, 021302 (2015). doi: 10.1063/1.4916561
- [9] Special issue on III-N-V semiconductor alloys, Semicond. Sci. Technol. 17, 741, (2002).
- [10] **J. Neugebauer, C.G. Van de Walle**, Phys. Rev. B 51, 10568, (1995).
- [11] **M. Weyers, M. Sato, H. Ando**, Jpn J. Appl. Phys. 31, L853, (1992).
- [12] **W.G. Bi, C.W. Tu**, Appl. Phys. Lett. 70, 1608, (1997).
- [13] **U. Tisch, E. Finkman, J. Salzman**, Appl. Phys. Lett. 81, 463, (2002).
- [14] **R. Chtourou, F. Bousbih, S.B. Ben Bouzid, F.F. Charfi, J.C. Harmand, G. Ungaro, L. Largeau**, Appl. Phys. Lett. 80, 2075, (2002).
- [15] **W. Shan, W. Walukiewicz, J.W.I.I.I. Ager, E.E. Haller, J.F. Geisz, D.J. Friedman, J.M. Olson, S.R. Kurtz**, Phys. Rev. Lett. 82, 1221, (1999).





PARTIE I

**Etude et simulation des dispositifs types SchottkySC
et IBSC à base du matériau GaAsN pour le
photovoltaïque**

CHAPITRE 1:

NOTIONS DE BASE SUR LA CONVERSION PHOTOVOLTAÏQUE

SOMMAIRE

1. INTRODUCTION	09
2. CONVERSION PHOTOVOLTAÏQUE	21
2.1 THEORIE DES CELLULES SOLAIRES A JONCTION P-N	21
2.2 THEORIE DES CELLULES SOLAIRES A BARRIERE SCHOTTKY	27
2.3 THEORIE DES CELLULES SOLAIRES A BANDE INTERMEDIAIRE	30
3. ARCHITECTURE D'UNE CELLULE PHOTOVOLTAÏQUE	33
4. CONCLUSION	35



1. INTRODUCTION

L'approvisionnement suffisant en énergie est une condition importante pour assurer la continuité du progrès humain. Il est donc judicieux de se préoccuper des sources d'énergie durables. Les combustibles fossiles aux ressources limitées sont le principal secteur qui contribue à la production d'énormes quantités d'énergie. Actuellement, le pétrole couvre environ 40% de la consommation énergétique mondiale et un quart de l'offre provient du gaz naturel et du charbon. L'énergie restante est fournie par le bois, la fission nucléaire et l'hydroélectricité dans cet ordre.

La difficulté et le coût de la sécurité de l'élimination des matières radioactives et des déchets toxiques rendent l'utilisation de l'énergie nucléaire et chimique une solution discutable. Il existe en fait une croyance massive selon laquelle l'utilisation de combustibles fossiles est un facteur contribuant à la cause du réchauffement planétaire, qui aboutira finalement à la disparition de la planète. La combustion de combustibles fossiles nuit également à la santé publique en contribuant à la formation d'ozone troposphérique qui augmente considérablement le risque de décès prématuré. De plus, chaque perte de 1% de l'ozone total due à la pollution de l'environnement entraîne une augmentation de 3 à 5% des cas de cancer de la peau ^[1]. Ces préoccupations en matière de qualité de vie sont toutefois minimes par rapport aux dégâts considérables du gaz à effet de serre (GES) à notre environnement. La communauté scientifique est largement d'accord que les émissions de gaz à effet de serre (GES) sont la cause la plus probable du réchauffement planétaire, que les dommages causés à l'environnement sont irréversibles sur une échelle de temps de plusieurs centaines d'années et la réduction des émissions de CO₂ devrait être une priorité ^[1-3]. Les niveaux d'émission de dioxyde de carbone que nous générons par l'utilisation constante de combustibles fossiles sont littéralement en train de tuer notre planète. La question fondamentale est donc de savoir pourquoi ne pas les stocker et utiliser quelque chose de plus utile. Heureusement, notre planète offre de nombreuses sources d'énergie renouvelables telles que l'énergie solaire, éolienne, hydraulique, marémotrice, géothermique et la biomasse. À l'heure actuelle, les sources d'énergie renouvelables représentent une partie négligeable de l'approvisionnement énergétique mondial ^[4]. Les sources d'énergie renouvelables ont besoin d'être considérées sérieusement. Par conséquent, le moment est venu de changer l'habitude d'utiliser des sources d'énergie conventionnelles et d'offrir une meilleure qualité de vie aux générations futures.

Le soleil est l'une des plus importantes sources d'énergie renouvelable. En effet, l'énergie solaire reçue au sommet de l'atmosphère en une heure (1.7×10^5 térawatts) est remarquablement bien supérieure à la consommation annuelle d'énergie du monde ^[5]. L'enquête de Nathan Lewis ^[6] sur les sources d'énergie révèle que seule l'énergie solaire a une base de ressources suffisamment importante pour répondre à la demande énergétique mondiale sans contribuer à la présence du gaz



à effet de serre dans l'atmosphère. La puissance de la lumière du soleil atteignant la surface de la terre représente presque 6000 fois de la puissance moyenne consommée par les humains.

Ces chiffres nous incitent à rechercher des moyens d'exploiter l'énergie solaire et de la convertir en d'autres formes pratiques. Le processus direct de conversion de la lumière solaire en électricité est appelé processus photovoltaïque (PV). C'est le moyen le plus écologique et le plus fiable d'exploiter l'énergie. La lumière solaire est décrite comme une lumière à spectre complet et comprend la gamme de longueurs d'onde nécessaires au maintien de la vie sur Terre: infrarouge, visible et ultraviolet (UV) (Figure 1). La lumière du jour (spectre visible), chaque jour, ne représente qu'une fraction de l'énergie totale émise par le soleil incident sur la Terre.

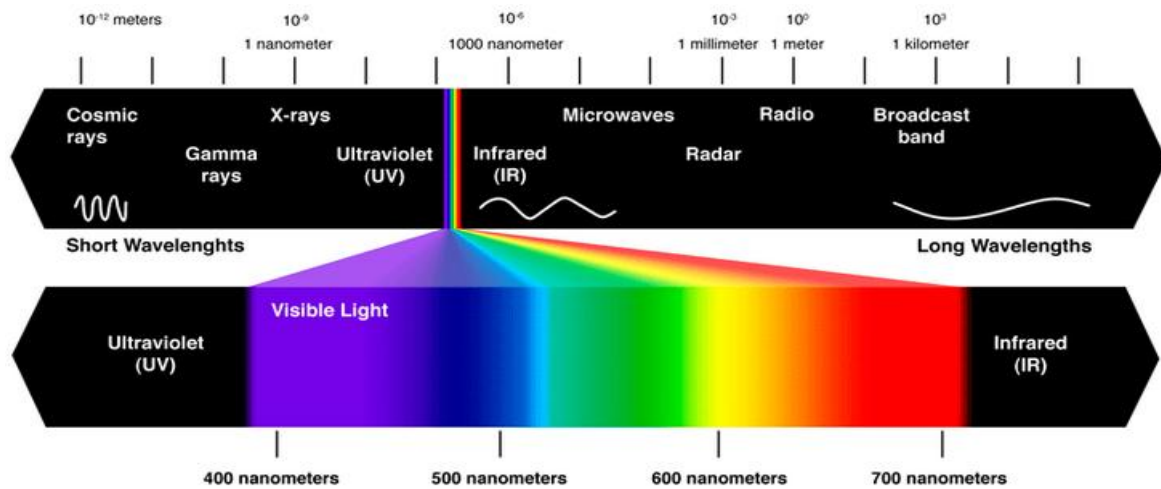


Figure 1: Le spectre solaire [7].

Le rendement de conversion d'énergie d'une cellule solaire est sensible aux variations de deux paramètres, la puissance et le spectre de la lumière incidente. Par conséquent, pour une comparaison précise du rendement mesuré des cellules solaires à différents endroits, c'est-à-dire à la surface de la Terre et/ou en dehors de l'atmosphère terrestre, le spectre solaire standard et la densité de puissance ont été définis. Les spectres solaires standards font référence à des emplacements génériques. Les spectres solaires portent le préfixe "AM", qui signifie "masse d'air", suivi d'un nombre faisant référence à la longueur du chemin à travers l'atmosphère par rapport à la plus courte longueur si le soleil était au sommet. La figure 2 montre une comparaison des différents spectres de masse d'air à différents endroits. La figure 3 montre l'irradiance spectrale de la lumière solaire en fonction de l'énergie des photons pour les normes standard AM0 et AM1.5 G dont la densité spectrale d'un spectre solaire standard AM0 et AM1.5 G est respectivement de 136 mW/cm^2 et 100 mW/cm^2 .



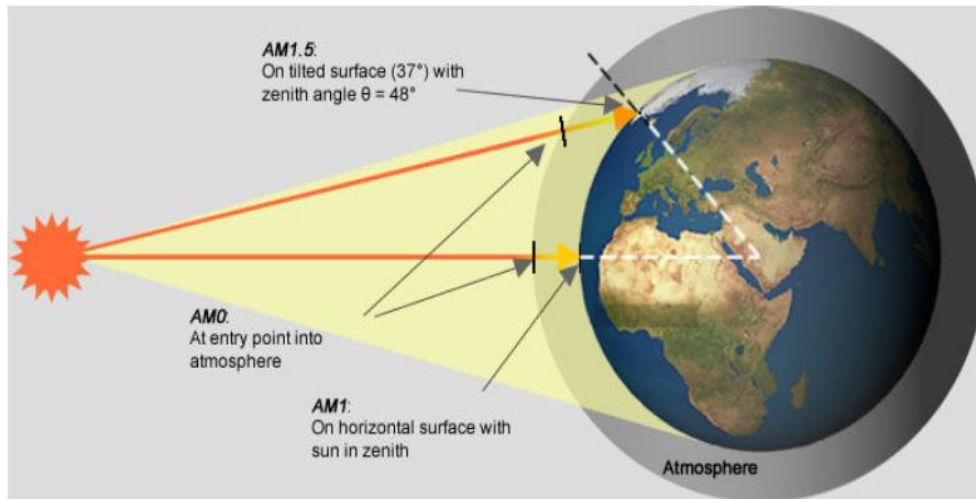


Figure 2: Nombre de masse d'air AM en fonction de la position géographique [8].

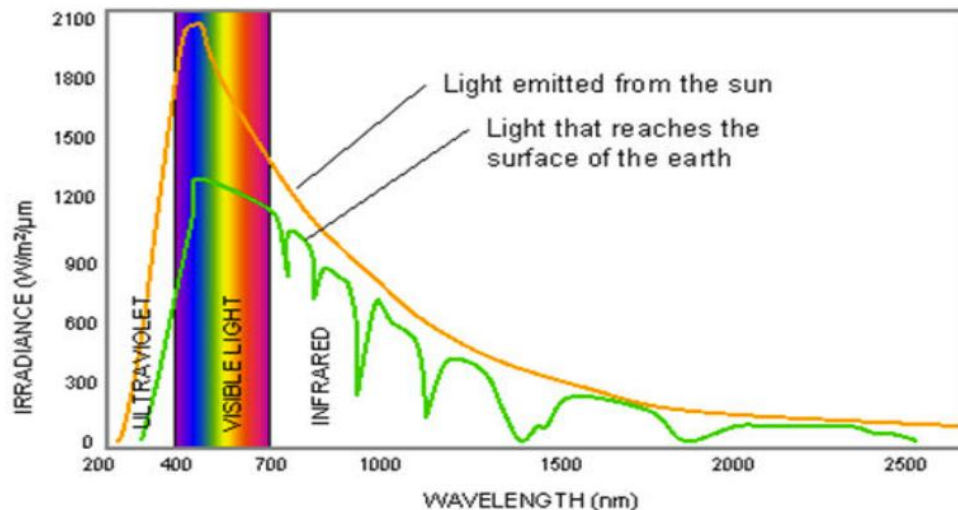


Figure 3: Variation spectrale de la puissance émise par le soleil et de celle reçue par la terre [6].

La cellule solaire moderne a été réalisée pour la première fois aux laboratoires Bell en 1954 sous la forme d'un dispositif à silicium cristallin (c-Si) avec un rendement de 6%. Les cellules solaires au silicium ont une part dominante de 80% sur le marché du photovoltaïque, car les dispositifs à base de silicium cristallin sont bien compris et le processus de fabrication est mature [9]. En raison de la technologie bien établie des cellules solaires au silicium cristallin, les améliorations du produit final en termes de rendement sont généralement obtenues par des améliorations progressives de la chaîne de production, au lieu d'avancées révolutionnaires [6]. L'inconvénient majeur des cellules solaires au silicium disponibles dans le commerce est leurs faibles rendements de conversion. Depuis 2009, l'industrie des cellules solaires connaît une croissance rapide supérieure à 30% par an. Malgré l'augmentation rapide, la production d'énergie solaire représente moins de 1% de l'énergie totale



produite. L'Allemagne est capable de générer 50.6% de l'électricité en utilisant l'énergie solaire. En 2014, la production totale d'énergie photovoltaïque de 35.2 TWh couvrait environ 6.9% de la consommation nette d'électricité de l'Allemagne [10]. L'utilisation limitée de l'énergie solaire est en partie liée à son coût élevé.

Levelized Cost Of Electricity (LCOE) est une technique de calcul et de comparaison des prix de l'énergie électrique généré par différentes sources. Elle représente le rapport entre le coût attendu du système durant sa vie (construction, financement, carburant, entretien, taxes, assurances, etc...) et la durée de vie de ce système pour une technologie donnée. La figure 4 montre la comparaison des coûts de différentes sources énergétiques par rapport à l'énergie solaire en Allemagne pour différentes sources d'électricité. En 2013, le LCOE pour les panneaux photovoltaïques variait de 0.078 à 0.142 €/kWh¹, soit deux fois plus cher que le charbon (0.142 €/kWh–0.053 €/kWh). Les valeurs LCOE pour la technologie de concentrateur PV (CPV) qui contrairement aux cellules PV conventionnelles utilisent des lentilles et des miroirs incurvés pour focaliser la lumière du soleil sur de petits dispositifs, elles varient de 0.10 €/kWh à 0.15 €/kWh à des emplacements avec un DNI² de 2 000 kWh/(m²a) et 0.08 €/kWh à 0.12 €/kWh avec 2500 kWh/(m²a). L'analyse montre que le CPV a un potentiel de réduire le LCOE, ce qui encourage le développement continu de cette technologie. Le coût et la performance des panneaux solaires dépendent directement du rendement de conversion d'énergie des cellules PV constituées d'un matériau semiconducteur qui capte et transforme la lumière du soleil.

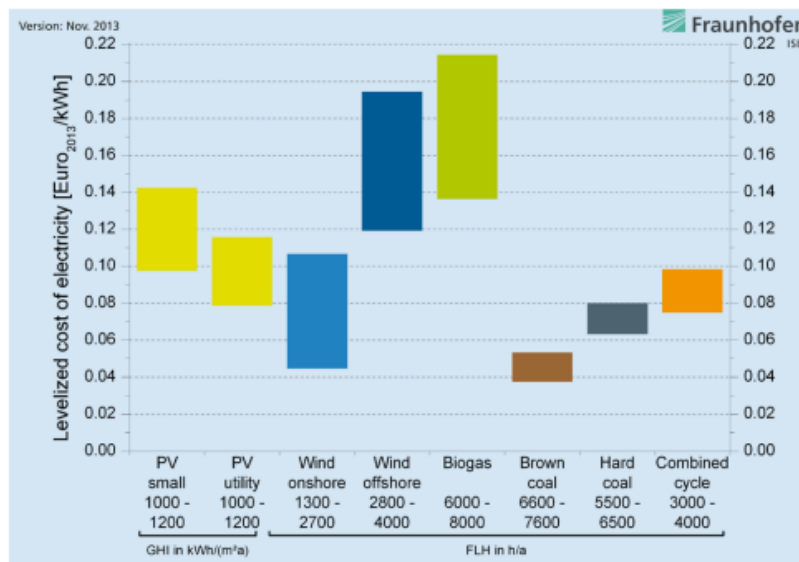


Figure 4: Coût nivelé de l'électricité des centrales conventionnelles et technologies énergétiques nouvelles, pour 2013 et 2014 en Allemagne [10].

¹ kWh (kilowatt-heure) : une unité d'énergie.

² DNI (Direct Normal Irradiance) à un endroit est la quantité d'énergie solaire qui tombe par m² par an à cet endroit avec unité de mesure kWh/ (m²a).



La fiabilité, la durabilité, le coût et le rendement de la conversion d'énergie photovoltaïque développé en utilisant différents matériaux ont amené la communauté solaire à les désigner en trois générations, comme le montre la figure 5. La première génération contient des cellules solaires dont la production est relativement coûteuse et dont le rendement est faible. La deuxième génération contient des types de cellules solaires qui ont un rendement encore plus faible, mais sont beaucoup moins chères à produire, de sorte que le coût par watt est inférieur à celui des cellules de première génération. Le terme troisième génération est utilisé pour désigner les cellules très efficaces. La plupart des technologies de cette génération ne sont pas encore commercialisées, mais il y a beaucoup de recherches en cours dans ce domaine. Ces trois générations de cellules solaires développées au fil du temps sont décrites ci-dessous.

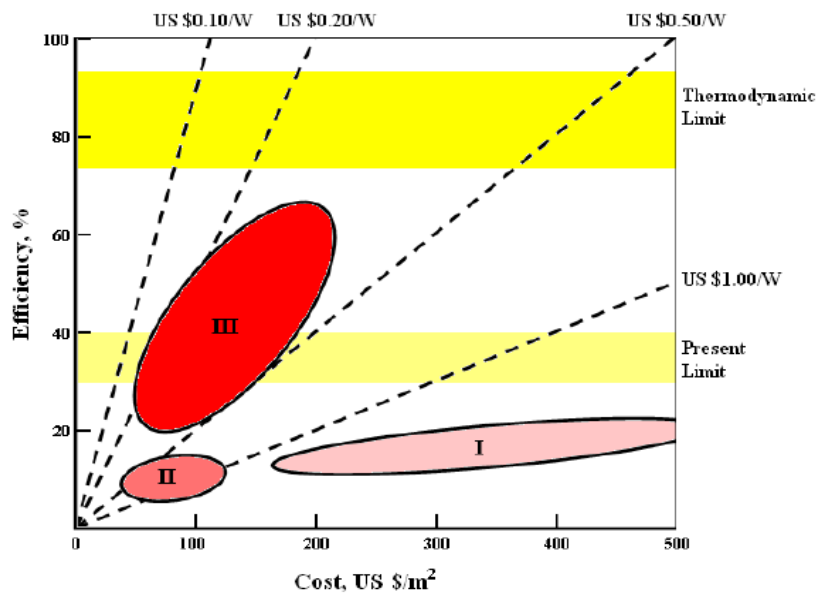


Figure 5: Projections d'efficacité et de coûts pour les systèmes photovoltaïques de première, deuxième et troisième générations ^[11].

1.1 CELLULES SOLAIRES DE PREMIERE GENERATION

Les cellules solaires de première génération sont constituées de dispositifs à grande surface, de haute qualité et à jonction unique, composés principalement de silicium. Le silicium a une bande interdite indirecte de 1.12 eV, qui permet l'absorption de la lumière visible. Le rendement le plus élevé de conversion d'énergie obtenu avec une cellule solaire en silicium cristallin est de 25% sous une puissance solaire sans concentrateur et de 27.6% sous concentrateur (92x) sous Amonix³. Cette

³ Amonix, Inc. est un développeur de systèmes d'énergie solaire basé à Seal Beach, en Californie. L'entreprise fabrique des modules photovoltaïques à concentrateur (CPV) conçus pour être installés dans des climats ensoleillés et secs. Les systèmes Amonix CPV utilisent des lentilles de Fresnel réfringentes pour concentrer 92 fois (92x) la lumière du soleil sur des cellules solaires.



génération de cellules solaires domine le marché, elle est utilisée principalement sur les toits. Cependant, elles sont rigides et demande beaucoup d'énergie dans la production, ce qui les rend relativement coûteux, comme le montre la figure 5. Les principaux défis de cette génération de cellules solaires sont ^[12]:

- a) L'énergie lumineuse inférieure à la bande interdite (gap) n'est pas absorbée et elle est perdue.
- b) L'énergie lumineuse supérieure à la bande interdite est perdue et l'énergie excédentaire apparaît sous forme de chaleur.

Cette génération de cellules solaires présente un rendement de conversion de 24.5%. Cette valeur est très proche de la valeur maximale théorique de 31% ^[12], ce qui laisse peu de place à l'amélioration, et pour cette raison, différentes approches des cellules solaires sont proposées.

Les figure 6 (a) et 6 (b) montrent des exemples des cellules solaires de la première génération.

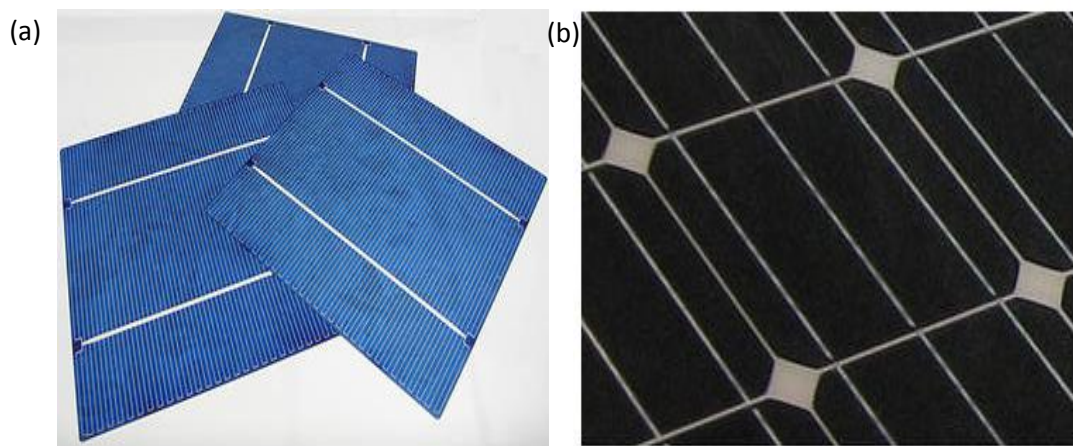


Figure 6: Cellules solaires de première génération, (a) Cellules polycristallines, (b) Cellules monocristallines ^[13].

Lors de la fabrication des cellules polycristallines, le refroidissement du silicium en fusion est effectué dans des creusets parallépipédiques à fond plat. Par cette technique, des cristaux orientés de manière irrégulière se forment. Cela donne l'aspect caractéristique de ces cellules bleutées présentant des motifs générés par les cristaux comme montre la figure 6 (a). Les cellules monocristallines sont constituées de cristaux très purs obtenus par un contrôle strict et progressif du refroidissement du silicium.



1.2 CELLULES SOLAIRES DE DEUXIEME GENERATION

La deuxième génération de cellules solaires (cellules solaires à couche mince) a émergé en raison de leurs faibles coûts de production (Figure 5) et une consommation minimale de matériau, ce qui rend ces cellules attrayantes pour l'utilisation. Ces cellules solaires également appelées cellules photovoltaïques à couche mince, sont à base de silicium amorphe, de silicium microamorphe, de cuivre indium gallium diséléniure (CuInGaSe_2 , CIGS) et de tellure de cadmium (CdTe), avec un rendement de conversion d'énergie typique de 10 à 20%. Les cellules solaires à base de silicium amorphe sont les cellules solaires les plus courantes et les plus utilisées dans le commerce, dans cette génération de cellules PV. Les cellules solaires au silicium amorphe sont rapportées avec un rendement de conversion maximal de 13.6%. Ces cellules solaires présentent plusieurs défis, notamment la dégradation des dispositifs dans le temps et une faible absorption de la lumière, ce qui entraîne un faible rendement de conversion par rapport aux autres cellules solaires au silicium.

Cependant, les cellules solaires à base de matériaux CIGS et CdTe sont plus stables et permettent un rendement de conversion d'énergie supérieure. Par exemple, le centre national de recherche sur les énergies renouvelables (NREL) des États-Unis a atteint un rendement de 23.3% pour les cellules solaires basées sur le CIGS sous une lumière concentrée (14.7x) et de 22.3% par Solar Frontier⁴ sous une lumière non concentrée, alors que le rendement maximal de conversion rapporté pour la première cellule PV à base de CdTe est de 22.1%. Les cellules PV de deuxième génération ont un avantage concurrentiel sur les cellules PV de première génération, par exemple, les cellules PV CIGS et CdTe offrent un rendement élevé à un coût inférieur à celui du silicium. L'avenir de cette technologie pourrait connaître des difficultés en raison de l'utilisation de matériaux rares et toxiques^[14-16]. Ces inconvénients ont incité la communauté photovoltaïque à rechercher une nouvelle génération de cellules solaires.

Un exemple des cellules solaires de la deuxième génération à base de CIGS est représenté sur La figure 7.

⁴ **Solar Frontier** est une société photovoltaïque japonaise qui développe et fabrique des cellules solaires à couches minces utilisant la technologie CIGS. Il s'agit d'une filiale à part entière de Showa Shell Sekiyu et située à Minato, Tokyo, Japon.



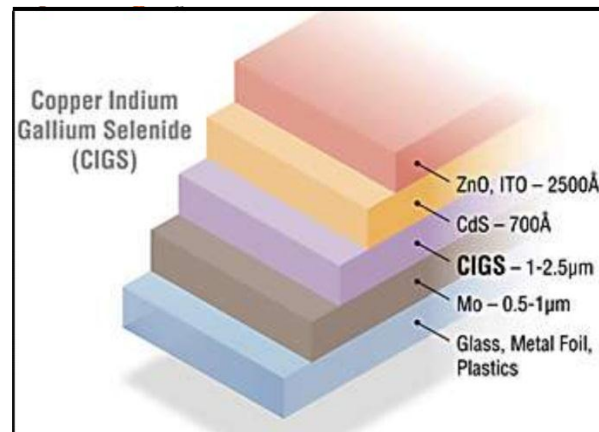


Figure 7: Cellule photovoltaïque au CIGS ^[17].

Cette figure montre la composition couche par couche d'une cellule photovoltaïque au CIGS. Les structures assemblées sur du verre (sglass) sont rigides. À l'inverse, celles construites sur des feuilles métalliques (metal foil) ou sur du plastique (plastics) sont souples.

1.3 CELLULES SOLAIRES DE TROISIEME GENERATION

Les technologies de troisième génération visent à améliorer l'efficacité de la conversion d'énergie de la deuxième génération (technologies à couche mince) tout en maintenant des coûts de production très bas. Cette génération de cellules solaires a le potentiel d'atteindre l'objectif de 1 \$/W, comme le montre la figure 5, ce qui équivaut au prix de l'électricité d'origine fossile.

1.3.1 Cellules solaires multijonctions

Les cellules solaires multijonctions sont constituées de matériaux présentant différentes bandes interdites pouvant absorber les différentes énergies utiles des photons. Il élimine en grande partie le processus de thermalisation et de non absorption par les photons avec des énergies supérieures à la bande interdite du matériau. Dans les cellules solaires multijonctions (cellules multiples), chaque cellule absorbe une plage étroite de photons proche de sa bande interdite, comme le montre la figure 8.



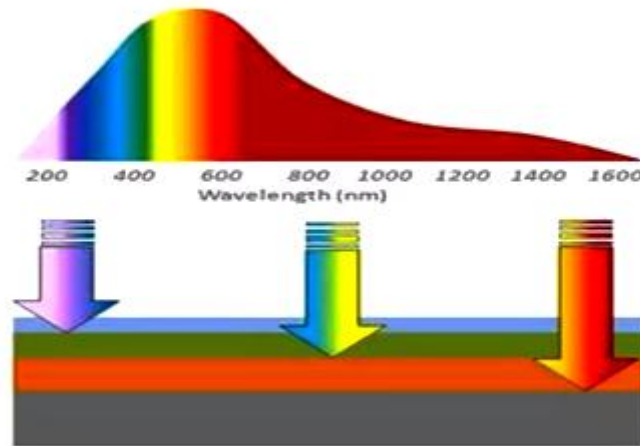


Figure 8: Schéma de l'absorbance de la cellule solaire multijonction.

Les cellules solaires multijonctions sont l'une des solutions les plus prometteuses pour obtenir un rendement élevé, car elles réduisent les pertes de transmission en divisant le spectre et en absorbant efficacement différentes sections en empilant plusieurs cellules présentant des intervalles de bande différents. Cette génération de cellules solaires est actuellement utilisée avec succès dans les technologies de photovoltaïque à concentration (CPV), dans lesquelles les lentilles et les miroirs focalisent la lumière du soleil sur une cellule solaire de petite surface, ce qui réduit considérablement la quantité de matériau nécessaire et, par conséquent, le coût global du dispositif photovoltaïque. Ces cellules solaires ont été largement utilisées dans les applications spatiales en raison de leur efficacité de conversion de puissance élevée, de leurs petites tailles, de leur faible poids et de leur résistance aux radiations supérieures.

Le rendement de conversion d'énergie actuel de 46% est détenu par les cellules solaires en GaAs à quatre jonctions (GaInP/GaAs/GaInAsP/GaInAs) sous lumière concentrée (508 soleils) ^[18]. Boeing Spectrolab a obtenu une efficacité de 38.8% pour une cellule solaire à cinq jonctions dans des conditions sans concentrateur. Un rendement de conversion d'énergie de 44.4% en lumière concentrée (302x) et de 37.8% en lumière non concentrée est obtenu en utilisant une multijonction à trois jonctions par Sharp. Pour une cellule solaire à deux jonctions, un rendement de conversion d'énergie de 31.6% sous concentrateur est obtenu par Alta Devices⁵ et de 34.1% est obtenu sous concentrateur (467x) par NREL⁶.

⁵ **Alta Devices** est un ancien fabricant de PV spécialisé dans l'arséniure de gallium basé aux États-Unis, qui prétend avoir atteint un record d'efficacité de conversion des cellules solaires de 29,1%, tel que certifié par Fraunhofer ISE Callab en Allemagne.

⁶ **National Renewable Energy Laboratory (NREL)** (en français : « Laboratoire national sur les énergies renouvelables »), situé à Golden, Colorado aux États-Unis est le principal laboratoire national du département de l'Énergie des États-Unis. Il est consacré à la recherche et au développement sur les énergies renouvelables et l'efficacité énergétique.



Au cours des années 1980 et au début des années 90, divers laboratoires ont principalement amélioré l'efficacité des cellules PV, principalement à l'Université de New South Wales (UNSW-Australie) et à l'Université de Stanford (États-Unis). Ceci est illustré dans le graphique des meilleures efficacités de cellules de recherche par les laboratoires internationaux d'énergie renouvelable représentés sur la figure 9. Les données NREL montrent que le rendement de conversion de la première génération des cellules solaires a été améliorée jusqu'en 1995, qu'elle sature sans autres améliorations évidentes. La chronologie des cellules solaires de deuxième génération (technologies à couches minces) montre que l'efficacité de la conversion d'énergie de ces cellules PV s'est améliorée jusqu'en 2000, avec une légère amélioration au cours de la dernière décennie. Ces cellules solaires sont moins chères que les cellules solaires de première génération, mais le rendement de conversion d'énergie reste inférieur à celui des cellules solaires au silicium.

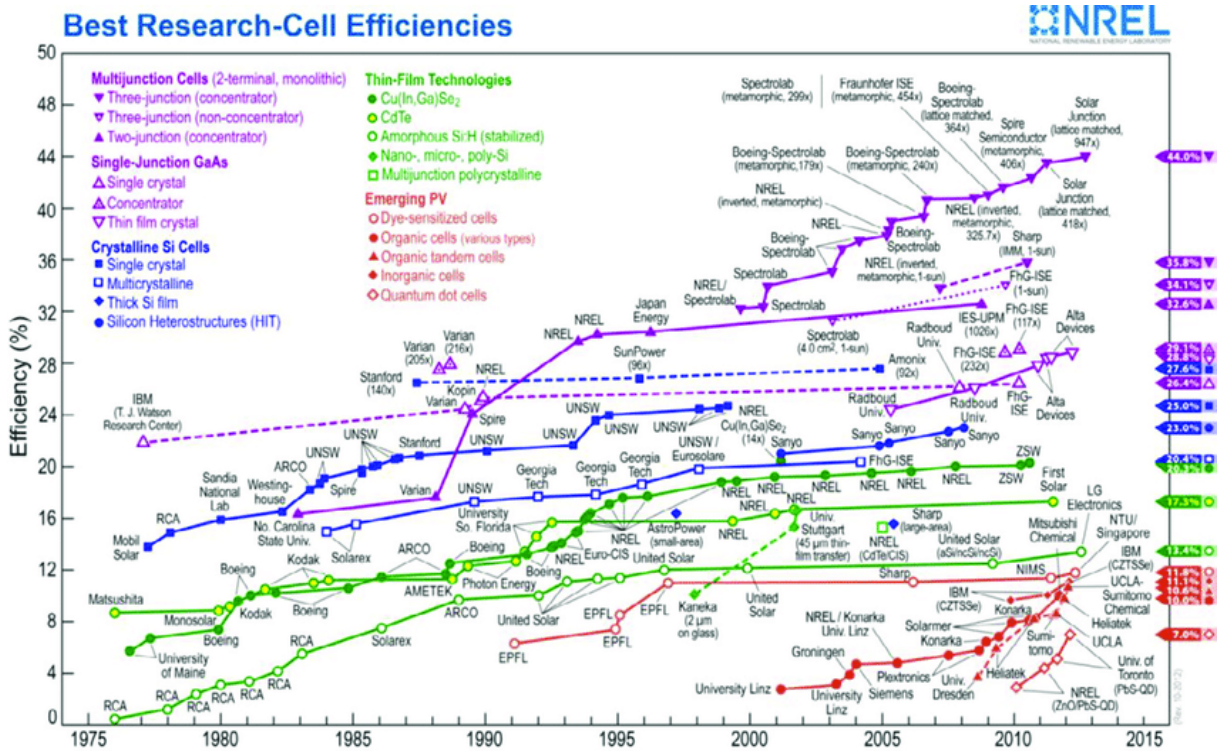


Figure 9: Evolution de la performance des cellules solaires de 1977 à 2015 illustrée par NREL [19].

Les concentrateurs multijonctions ont montré une augmentation spectaculaire du rendement de conversion d'énergie par rapport aux autres technologies, ils offrent un rendement de conversion d'énergie plus élevé par rapport aux cellules solaires traditionnelles constituées de matériaux semiconducteurs avec une seule couche. Les technologies émergentes illustrées en figure 9 ont suscité une attention considérable de la part du public, en particulier après les résultats obtenus dans la recherche sur les cellules pérovskites, leur rendement ayant récemment dépassé les 20% [20,21]. Les cellules solaires de troisième génération (multijonctions) sont généralement



constituées de semiconducteurs composés des groupes III-V du tableau périodique, car ces alliages ont des bandes interdites allant de 0.3 à 2.3 eV, couvrant la majeure partie du spectre solaire. Néanmoins, les recherches actuelles se sont orientées vers l'utilisation d'un modèle monolithique capable de convertir la lumière solaire en électricité avec des rendements réels supérieurs à 50% [22]. Pour atteindre cet objectif, de nouvelles approches des cellules solaires comprenant au moins quatre bandes interdites sont nécessaires, comme le montre la figure 10. De ce fait, le rendement actuel obtenu avec les cellules solaires multijonctions est très élevé par rapport aux cellules solaires à base de silicium. Cependant, pratiquement, il existe une très petite gamme de matériaux qui pourraient être utilisés pour fabriquer ces cellules. Les cellules solaires multijonctions reposent sur des matériaux dont la bande interdite correspond au spectre solaire, une mobilité et des durées de vie élevées, une adaptation thermique et une adaptation du réseau. Ces paramètres critiques rendent très difficile la recherche de bons matériaux de fabrication. Pour surmonter la barrière de rendement de conversion d'énergie de 50% [23], dans une cellule solaire à quatre jonctions à base de GaAs, un matériau avec une bande interdite supérieure à 2.4 eV est nécessaire. Cependant, il n'y a pas beaucoup de matériaux offrant une bande interdite supérieure à 2.4 eV. Les alliages de nitrure III font partie des rares matériaux pouvant fournir une bande interdite supérieure à 2.4 eV [24].

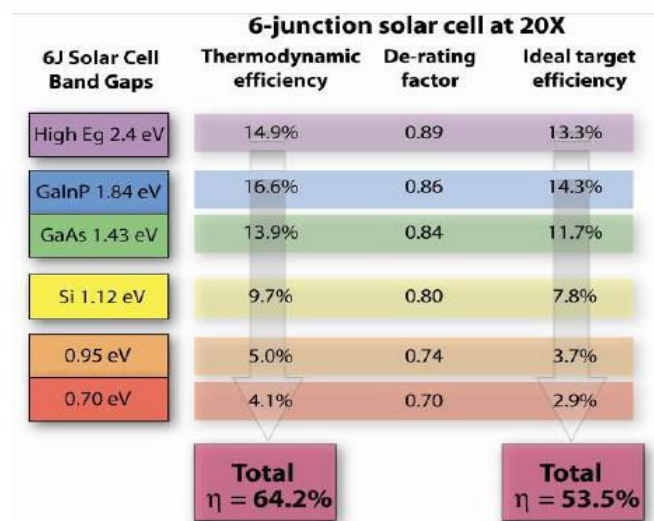


Figure 10: Contributions prévues de chaque matériau dans une cellule solaire multijonction [25].

1.3.2 Cellules solaires à bande intermédiaire (IBSC)

Le concept de cellule solaire à bande intermédiaire (Intermediate Band Solar Cell, IBSC) fournit un moyen d'obtenir des rendements de conversion photovoltaïque supérieurs à la limite d'efficacité de Shockley-Queissar (SQ) pour une cellule solaire à jonction unique en fournissant un photocourant supérieur tout en maintenant une tension de sortie élevée [26, 27]. Dans une cellule solaire à bande



intermédiaire (IBSC), une bande d'énergie partiellement occupée, ou "bande intermédiaire" (IB), située dans la région de la bande interdite d'un semiconducteur, sert de "tremplin" pour l'absorption de photons de plus basse énergie, inaccessibles par ailleurs à la conversion par photocourant. Contrairement aux cellules à multijonctions, la cellule solaire IB permet d'extraire le photocourant à travers une seule jonction P-N, simplifiant énormément l'architecture du dispositif. Des calculs de bilan détaillés montrent qu'une seule cellule de jonction formée dans un matériau avec un emplacement approprié d'une bande intermédiaire (IB) peut atteindre un rendement de conversion de puissance maximal théorique de 63% ^[28].

1.3.3 Cellules solaires à pérovskites

Une cellule photovoltaïque à pérovskites est 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. L'efficacité des cellules photovoltaïques utilisant ces matériaux est en constante augmentation depuis la fin des années 2000. Elle est passée de 3.8% en 2009 à 24.2% en 2019, et 28% pour le tandem de pérovskite et de silicium, soit une efficacité supérieure aux cellules photovoltaïques à simple jonction en silicium. Les cellules à pérovskites sont donc la technologie solaire ayant eu le développement le plus rapide de l'histoire. À ce jour, des problèmes de stabilité structurale n'ont pas été encore résolus. Cependant avec un potentiel encore important d'amélioration de la performance et des coûts de production faibles, les cellules à pérovskite sont devenues commercialement attractives ^[29].

Les matériaux qui constituent les cellules solaires photovoltaïques n'absorbent qu'une partie du spectre de la lumière solaire. Ce qui limite leurs rendements. Mais des chercheurs de l'université de Californie à Berkeley (UC Berkeley) pourraient avoir trouvé une solution dans une technique nouvelle dite de la bande interdite graduelle. L'idée est de combiner deux semiconducteurs aux bandes interdites décalées afin de permettre à la cellule d'absorber un maximum de photons. Et si ces semiconducteurs sont constitués de pérovskites, cette cellule pourrait en plus se révéler bon marché et facile à produire.

Un sandwich de pérovskites et de nitrure de bore ^[30]

Classiquement, lorsque deux pérovskites sont associées, leurs performances respectives ont tendance à se dégrader. Pour contourner le problème, les chercheurs d'UC Berkeley ont employé la méthode du sandwich (Figure 11):

- La première pérovskite est composée de molécules organiques de méthyle et d'ammoniac et contient de l'étain et de l'iode ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$). Elle absorbe préférentiellement les infrarouges et la chaleur.



- Une couche de nitrure de bore (BN) de seulement un atome d'épaisseur la sépare de la seconde pérovskite.
- La seconde pérovskite est composée des mêmes molécules organiques et d'iode, mais contient aussi du plomb et est dopée au brome ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Br}_x$). Elle absorbe ainsi des photons plus énergétiques du spectre visible.

Pour protéger le sandwich de l'humidité, car les pérovskites y sont particulièrement sensibles, un aérogel de graphène est utilisé. Et pour finir, des électrodes d'or et de nitrure de gallium (GaN). Le résultat est une efficacité moyenne de 18.4% avec des pics pouvant atteindre les 26%. De quoi rivaliser d'ores et déjà avec les meilleures cellules au silicium du marché alors que les chercheurs promettent n'en être encore qu'aux tout premiers stades de leur développement.

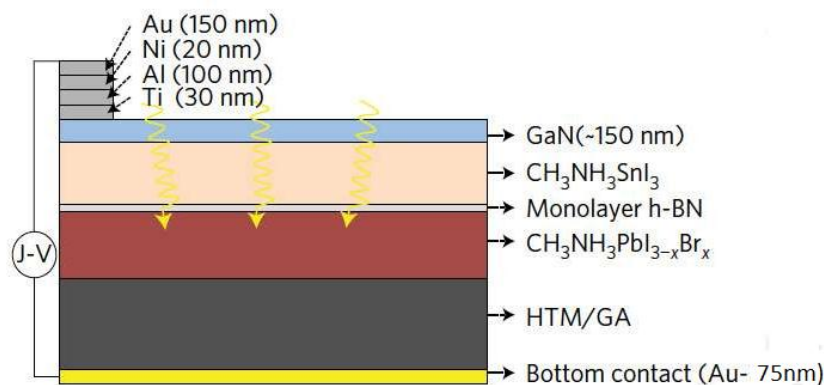


Figure 11: Cellule solaire à pérovskites ^[30].

La figure 11 montre que la couche active de la cellule solaire imaginée par les chercheurs d'UC Berkeley, cette cellule ne dépasse pas les 400 nanomètres d'épaisseur, l'électrode de nitrure de gallium en bleu, les deux pérovskites en beige et en rouge séparées par une couche de nitrure de bore en gris clair, l'aérogel de graphène en gris foncé et enfin, l'électrode d'or en jaune.

2. CONVERSION PHOTOVOLTAÏQUE

2.1 THEORIE DES CELLULES SOLAIRES A JONCTION P-N ^{[31] [32]}

Une cellule solaire est un dispositif qui convertit la lumière du soleil en électricité. La cellule est un dispositif terminal qui se comporte comme une diode dans l'obscurité et génère un photocourant en présence de la lumière. Le principe de base de son fonctionnement est l'effet photovoltaïque. Lorsque la lumière constituée de paquets d'énergie, appelés photons, frappe la surface de la cellule, les photons d'énergies supérieures à la bande interdite E_g du matériau sont absorbés tandis que les photons d'énergies inférieures traversent le matériau. Chaque photon absorbé par la cellule solaire excite un électron de la bande de valence à la bande de conduction, créant ainsi une paire



électron-trou. Les électrons générés dans le matériau de type p et les trous dans le matériau de type n sont des "porteurs minoritaires" et existeront donc pendant une durée égale à la durée de vie du porteur minoritaire avant leur recombinaison. Si une recombinaison se produit, aucun courant électrique ne sera généré. L'objectif est plutôt de faire en sorte que ces porteurs minoritaires se diffusent à travers les régions quasi neutres jusqu'à ce qu'ils atteignent la jonction, comme illustré à la figure 12. Les porteurs sont ensuite balayés à travers la jonction P-N par l'action du champ électrique existant dans la région d'appauvrissement. Les électrons se déplacent vers la région n, tandis que les trous se déplacent vers la région p. Une fois que les électrons photo-générés (trous) atteignent la région n (région p) de la jonction, ils contribuent à la création des courants porteurs dans ces régions. L'action photovoltaïque résulte essentiellement de trois étapes: la génération de charges (photons générant des paires électron-trou), la séparation de charges et le transport de charges. En raison de la présence de ces porteurs en excès, une tension est mise en place à travers la jonction qui sépare l'équilibre de niveau Fermi en deux quasi-niveaux de Fermi, l'un pour les électrons (E_f, n) et l'autre pour les trous (E_f, p) comme indiqué dans la figure 12. Lorsque les contacts de la cellule sont isolés, la différence de potentiel à travers la diode a sa valeur maximale qui est égale à la tension de circuit ouvert (V_{oc}). Si la cellule solaire est court-circuitée, la densité de courant qui circule est appelée densité de courant de court-circuit (J_{cc}).

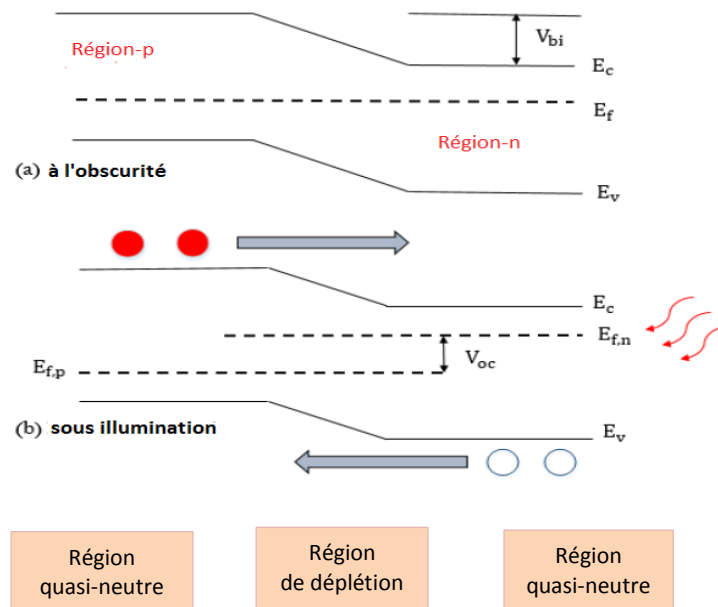


Figure 12: Diagramme de bande d'énergie d'une cellule solaire à jonction P-N non polarisée, (a) à l'obscurité (b) sous illumination.



La densité de courant nette fournie, J , par une cellule solaire débitant dans une charge résistive est donnée par la relation suivante:

$$J(V) = J_{cc} - J_{obs}(V) \quad \text{Eq.1}$$

Où J_{obs} est la densité de courant d'obscurité. Pour une diode non idéale, J_{obs} est donnée par:

$$J_{obs}(V) = J_0(e^{qV/nk_B T} - 1) \quad \text{Eq.2}$$

Ainsi, J devient:

$$J(V) = J_{cc} - J_0(e^{qV/nk_B T} - 1) \quad \text{Eq.3}$$

Où V est la tension aux bornes de la diode, J_0 la densité du courant de saturation, n le facteur d'idéalité de la diode, k_B la constante de Boltzmann et T la température. La condition de «circuit ouvert» est définie par $J(V_{co}) = 0$ et nous pouvons donc réorganiser l'équation 3 pour déterminer, V_{co} selon l'équation:

$$V_{co} = \frac{nk_B T}{q} \ln\left(\frac{J_{cc}}{J_0} + 1\right) \quad \text{Eq.4}$$

L'équation 4 montre la relation entre la tension à vide et le courant de court-circuit. La tension de circuit ouvert peut également être considérée comme la différence entre les quasi-niveaux de Fermi à travers la jonction P-N, et est donc limitée par la bande interdite du semiconducteur, comme le montre la figure 12.

La figure 13 montre les courbes $J(V)$ pour une jonction P-N à l'obscurité et sous illumination, ainsi que le modèle électrique idéal pour une jonction sous illumination. Dans ce modèle, la jonction est représentée par une diode, et la densité de courant photogénéré est représentée par une source de courant. La zone avec une puissance négative en convention récepteur, est la zone où la jonction se comporte comme un générateur d'énergie électrique. C'est cette zone-là qui nous intéresse pour la caractérisation d'une cellule solaire.



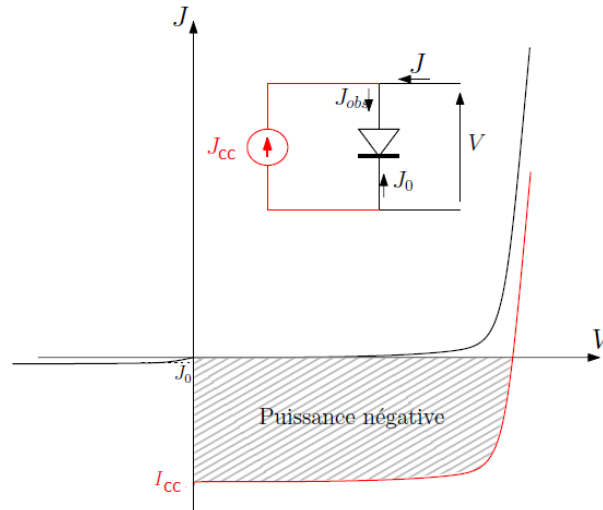


Figure 13: Courbes J(V) dans l'obscurité (noire) et sous illumination (rouge). Inset : modèle électrique pour une cellule solaire idéale.

Un modèle de circuit équivalent plus réaliste, comprenant des résistances en série et en parallèle, est présenté à la figure 14.

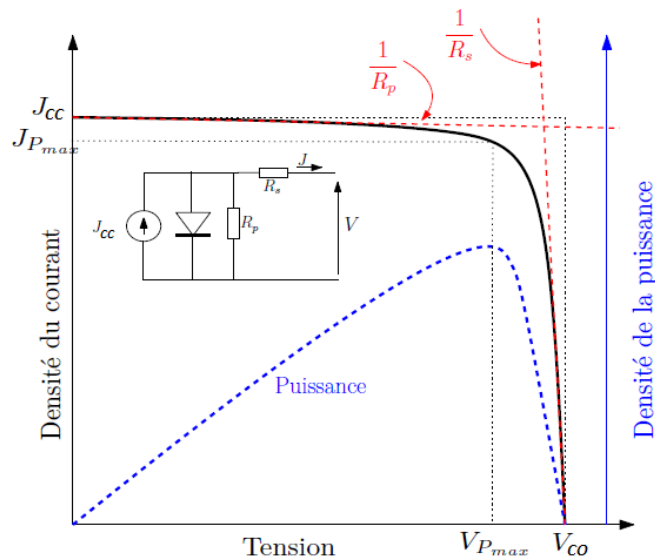


Figure 14: Caractéristiques J(V) et P(V) pour une cellule solaire sous illumination. Inset : modèle électrique simple pour une cellule solaire non idéale.

La densité de courant nette en tenant compte de la résistance série R_s et de la résistance parallèle R_p est donnée par l'équation suivante:

$$J = J_{cc} - J_0 \left(e^{\left(\frac{q(V - J R_s)}{n k_B T} \right)} - 1 \right) + \frac{V - J R_s}{R_p} \tag{Eq.5}$$



Où R_s et R_p représentent des résistances spécifiques en $\Omega.cm^2$. Dans les cellules solaires non idéales, l'énergie est dissipée par les résistances en série et parallèle incluses dans l'équation 5. La résistance série totale a des contributions du matériau semiconducteur massif, de la résistance de contact associée à l'interface semiconducteur/métal et de la résistance des électrodes métalliques avant et arrière. La résistance parallèle découle principalement de défauts électriquement actifs introduits soit lors de la synthèse des matériaux, soit lors de la fabrication du dispositif. Les résistances série et parallèle ont un impact négatif sur le facteur de forme (voir paragraphe suivant) et donc sur le rendement globale d'une cellule solaire. La densité de puissance délivrée par une cellule solaire à une charge résistive est donnée par:

$$P = J \cdot V \quad \text{Eq.6}$$

La tension de circuit ouvert ($I = 0$) et le courant de court-circuit ($V = 0$) sont indiqués sur la courbe J-V de la cellule solaire prototype représentée à la figure 14. Cependant, aucun courant n'est généré à ces deux points. La densité de puissance dans une cellule solaire atteint sa valeur maximale à certaines tensions V_m avec une densité de courant correspondante J_m . La puissance maximale est donnée par :

$$P_m = V_m \cdot J_m \quad \text{Eq.7}$$

Le facteur de forme est un paramètre important qui détermine la puissance maximale pouvant être extraite d'une cellule solaire. Le facteur de forme est défini par le rapport:

$$FF = \frac{J_m \cdot V_m}{J_{cc} \cdot V_{co}} \quad \text{Eq.8}$$

Graphiquement, le facteur de forme décrit le carreau du tracé J-V en ce sens que, avec $V_m = V_{co}$ et $J_m = J_{cc}$, la courbe J-V délimiterait un rectangle et $FF = 1$. Elle représente également le plus grand rectangle pouvant être inscrit à l'intérieur. La courbe J-V est illustrée à la figure 15.



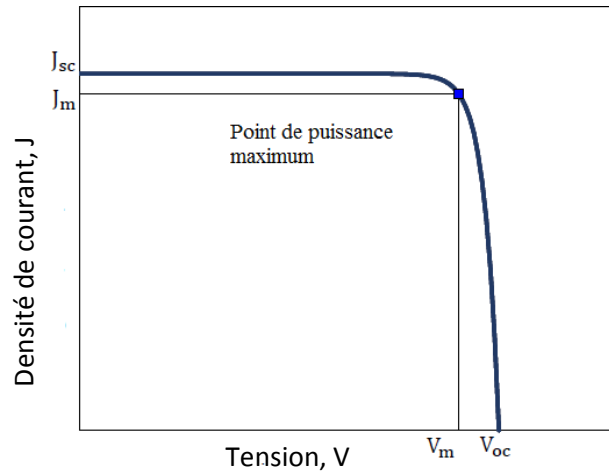


Figure 15 : Caractéristique courant-tension d'une cellule solaire idéale.

Le rendement η d'une cellule solaire est défini comme le rapport entre la densité de puissance maximale délivrée à la charge et la densité de puissance de la lumière incidente:

$$\eta = \frac{J_m \cdot V_m}{P_{inc}} = \frac{J_{cc} \cdot V_{co} \cdot FF}{P_{inc}} \quad \text{Eq.9}$$

Ces quantités J_{cc} , V_{co} , FF et η sont les paramètres de sortie essentielles d'une cellule solaire. Afin de pouvoir comparer utilement les performances des cellules solaires, ces paramètres doivent être mesurés dans des conditions d'éclairage "standard". Le spectre standard à la surface de la Terre est AM1.5 G (le G signifie global et inclut les rayonnements direct et diffus).

L'impact de la recombinaison des porteurs sur les performances des cellules solaires est représenté par deux quantités qui sont la durée de vie des porteurs minoritaires et la longueur de diffusion. La durée de vie (τ) de porteurs minoritaires est le temps moyen qu'un porteur photogénéré passe dans un état excité avant de se recombiner.

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_{radiative}} + \frac{1}{\tau_{auger}} + \frac{1}{\tau_{SRH}} \quad \text{Eq.10}$$

Où $\tau_{radiative}$, τ_{auger} et τ_{SRH} représentent la durée de vie des porteurs minoritaires suivant les mécanismes de recombinaison radiative, Auger et Shockley-Read-Hall. Dans le processus radiatif, un électron de la bande de conduction se recombine avec un trou dans la bande de valence et libère un photon. La recombinaison par défauts ponctuels se produit par le mécanisme Shockley-Read-Hall, qui se déroule en deux étapes. Un électron est piégé par un état d'énergie dans la bande interdite ceci est dû aux défauts présents dans le réseau cristallin. Si un trou passe dans le même état énergétique avant la réémission de l'électron, l'électron et le trou se recombinent. Dans la recombinaison Auger, trois particules sont impliquées. Tout d'abord, l'électron se recombine avec un trou dégageant de l'énergie qui est ensuite donnée à un électron dans la bande de conduction (trou dans la bande de



valence) le poussant dans le haut la bande de conduction (valence). L'électron excité (trou) perd progressivement cette énergie pour revenir au bord de la bande de conduction (valence).

La longueur de diffusion (L) est la distance moyenne de diffusion d'un porteur dans un gradient de concentration à partir du point de génération jusqu'à la recombinaison, elle est calculée par relation suivante :

$$L = \sqrt{D\tau} \quad \text{Eq.11}$$

Où D est le coefficient de diffusion et peut être trouvé en utilisant la relation d'Einstein. La valeur de τ dépend du nombre de défauts du matériau (bulk material) par le terme SRH de l'équation 10. De plus, comme la surface d'une cellule solaire présente une rupture du réseau, la surface est un site de recombinaison particulièrement élevée. La vitesse de recombinaison en surface est le paramètre utilisé pour quantifier la recombinaison à la surface. La recombinaison des porteurs de charge a un impact majeur sur la tension en circuit ouvert de la cellule solaire. Une recombinaison élevée augmente le courant de recombinaison de polarisation directe de la diode, ce qui diminue à son tour la tension en circuit ouvert de la cellule solaire. La figure 16 montre comment des paramètres tels que la longueur de diffusion et la recombinaison en surface affectent le rendement quantique d'une cellule solaire.

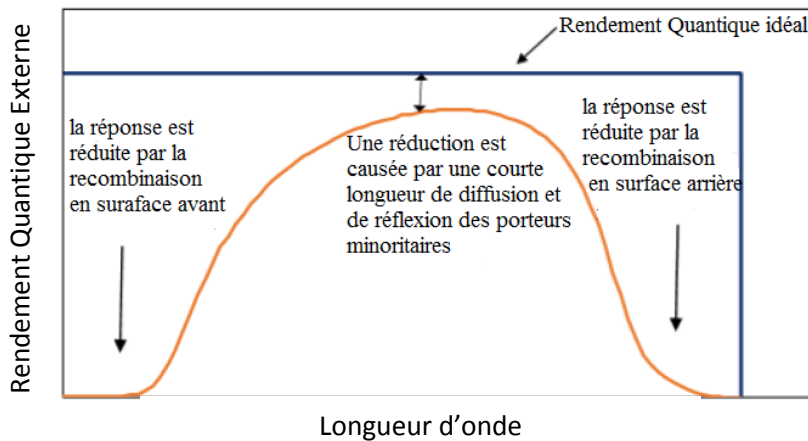


Figure 16: Rendement quantique d'une cellule solaire.

2.2 THEORIE DES CELLULES SOLAIRES A BARRIERE SCHOTTKY

Le diagramme de bande d'énergie d'une cellule solaire à barrière Schottky (Métal/n-Semiconducteur) est présenté à la figure 17. ^[31]



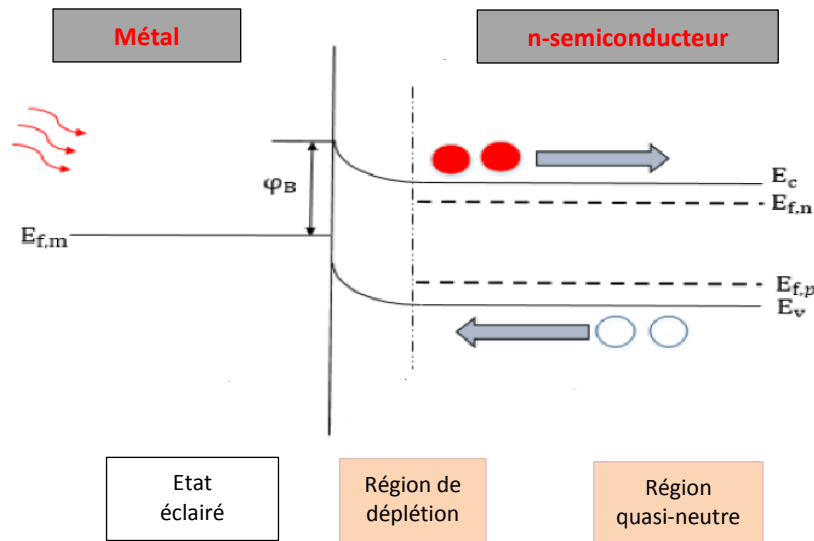


Figure 17: Diagramme des bandes d'énergie de la cellule solaire à barrière Schottky sous éclairage ($q\varphi_m > q\varphi_s$).

Le métal est déposé sous forme de film semi-transparent à travers lequel la plupart de la lumière peut passer. La lumière transmise à travers le métal dans le semiconducteur est absorbée pour générer un photocourant. Une très petite partie du photocourant provient également de l'absorption de la lumière dans la couche métallique mince (bien que ce photocourant soit négligeable et ne soit pas pris en compte dans l'analyse). La caractéristique de densité de courant en fonction de la tension d'une cellule solaire à barrière Schottky sous éclairage est similaire à l'équation 3 pour la jonction P-N (Eq.3). Sauf que la densité de courant de saturation J_0 est donnée par:

$$J_0 = A^{**} \cdot T^2 \cdot \exp(-q \cdot \varphi_b / k_B \cdot T) \tag{Eq.12}$$

Où A^{**} est connue comme la constante de Richardson et φ_b la hauteur de la barrière Schottky.

La jonction métal-semiconducteur (diode Schottky) constitue un moyen simple de préparer un dispositif photovoltaïque. L'autre avantage principal d'une cellule solaire à barrière Schottky est la présence de la région d'appauvrissement juste à côté de la surface du métal, ce qui réduit la probabilité de recombinaison en surface et améliore ainsi la réponse spectrale des photons de haute énergie. Cependant, les cellules solaires à barrière Schottky ont quelques limitations. Une cellule solaire à barrière Schottky ne peut pas produire de tensions de circuit ouvert élevées car la valeur maximale est limitée par la différence d'énergie potentielle entre le travail de sortie du métal et l'affinité électronique du semiconducteur. Tandis que, pour une cellule solaire à jonction P-N, la tension de circuit ouvert peut correspondre à environ 75% de la bande interdite du semiconducteur.



Deuxièmement, dans le cas de semiconducteur fortement dopés, des couches de barrière minces peuvent entraîner un effet tunnel des porteurs, ce qui réduira le photocourant. De plus, l'interface matérielle entre le semiconducteur et le métal contient des états d'interface qui peuvent piéger la charge et réduire la tension de circuit ouvert.

Le diagramme de la bande d'énergie d'un contact métal-semiconducteur à l'équilibre est présenté à la figure 18. Les contacts métalliques à semiconducteurs constituent une partie importante de tous les dispositifs à semiconducteurs. Une jonction métal-semiconducteur donne lieu à un contact ohmique ou à une barrière de Schottky. Dans un contact ohmique, il existe une relation linéaire entre le courant et la tension (pour les deux polarités de tension) et l'objectif est de minimiser la chute de tension pour un flux de courant souhaité. La résistance de contact doit être aussi faible que possible par rapport à la résistance apparente du semiconducteur. La courbe courant-tension d'un contact «ohmique» devrait idéalement être linéaire. Cependant, dans la pratique, la caractéristique courant-tension d'un contact ohmique ne doit pas nécessairement être exactement linéaire pour être utile. Dans une barrière Schottky ou un contact de redressement, le courant est bloqué pour une polarité de tension. Ainsi, la courbe tension-courant d'un contact Schottky devrait être de nature à rectifier comme une diode ^[33].

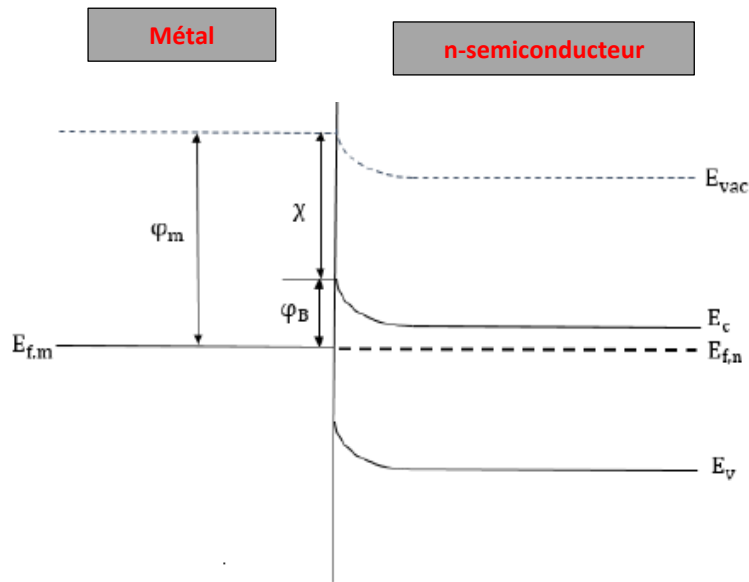


Figure 18: Diagramme des bandes d'énergie d'un contact métal-semiconducteur.

La hauteur de barrière Schottky d'une interface métal /semiconducteur de type n est donnée par :

$$q \cdot \varphi_{Bn} = q \cdot (\varphi_M - \chi) \tag{Eq.13}$$



Où φ_{Bn} est la hauteur de la barrière, φ_M le travail de sortie du métal et χ l'affinité électronique du semiconducteur. Pour un semiconducteur de type n, pour établir un contact ohmique, le travail de sortie du métal doit être plus petit que l'affinité électronique du semiconducteur. Pour un semiconducteur de type p, la formation d'un contact ohmique nécessite que le travail de sortie du métal soit plus grand que la somme de l'affinité électronique et de l'énergie de la bande interdite du semiconducteur. Pour le contact Schottky du GaAsN type n, on utilise généralement l'alliage Ti-Au (Titane-Or) ^{[34] [35]} où seulement le Cu (Cuivre) ^[36] et pour le contact Schottky du GaAsN type p, on utilise le Au (Or) ^[37].

2.3 THEORIE DES CELLULES SOLAIRES A BANDE INTERMEDIAIRE

Une cellule solaire à bande intermédiaire (Intermediate Band Solar cell IBSC) est un nouveau dispositif photovoltaïque qui pourrait dépasser la limite du rendement de conversion des cellules solaires monogaps. Dans une cellule solaire à bande intermédiaire, les électrons sont excités dans la bande intermédiaire, comme illustré sur la figure 19. Les cellules solaires à bande intermédiaire fournissent une augmentation de l'absorption en raison d'absorptions supplémentaires à la fois à partir de la bande de valence (BV) à la bande intermédiaire (IB) et de la bande intermédiaire (IB) à la bande de conduction (BC). Par conséquent, dans ce type de cellules, le courant de court-circuit (J_{cc}) peut être augmenté, ce qui conduit à une amélioration du rendement de conversion. La limite de Shockley-Queisser (SQ) des cellules solaires classiques ne permettait pas d'espérer un rendement supérieur à 41%. Mais pour des cellules solaires de troisième génération à bande intermédiaire, un rendement de conversion de plus de 63%, fut rapporté en 1997 ^[30]. En outre, ils peuvent être facilement fabriqués sur un substrat non cristallin et offrent un moindre coût par unité de puissance. ^{[38] [39]}

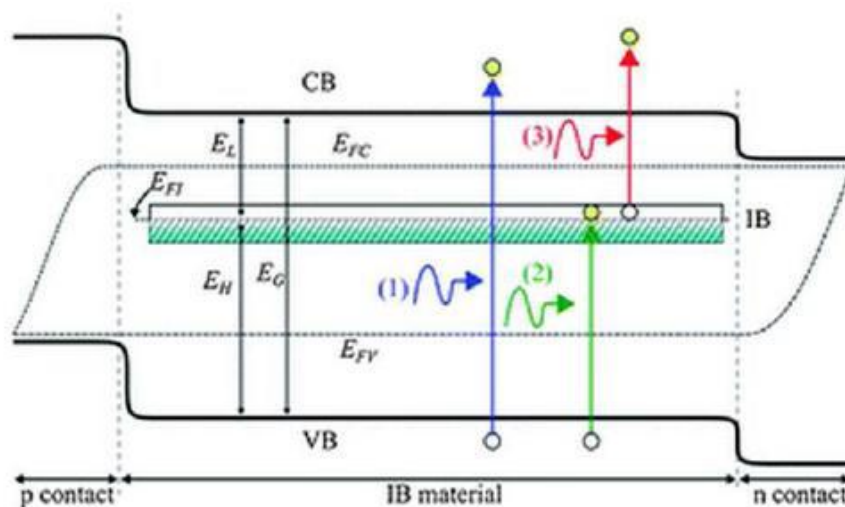


Figure 19: Schéma de transitions optiques dans les cellules solaires à bande intermédiaire (BC: bande de conduction; IB: bande intermédiaire; BV: bande de valence) ^[38].



Le concept d'une cellule solaire à bande intermédiaire IBSC dépasse la limite d'efficacité de Shockley-Queisser (SQ) par la récupération des pertes dues à l'existence de la bande intermédiaire tout en maintenant la tension de fonctionnement de SQ. La cellule solaire à bande intermédiaire IBSC utilise la lumière qui a une énergie inférieure à l'énergie de la bande interdite pour générer des porteurs via deux transitions radiatives à travers une bande intermédiaire dans la bande interdite (E_g). En supposant que les transitions sont radiatives et aucun contact électrique n'est appliqué, la limite maximale de la tension de circuit ouvert (V_{co}) reste E_g/q . L'absorption de deux photons est un procédé optique non linéaire, dans lequel deux photons sont absorbés simultanément.^{[38] [39]} L'énergie de l'atome ou de la molécule excitée est égale à la somme de l'énergie des deux photons.

$$hv_1 + hv_2 = E \tag{Eq.14}$$

Où h est la constante de Planck, v_1 et v_2 sont les fréquences du photon absorbé et E est la différence d'énergie entre le niveau d'énergie supérieur et inférieur. Dans le processus de deux photons, la molécule absorbe les photons simultanément, par la médiation de ce qu'on appelle «état virtuel», selon la mécanique un schéma représentatif de processus d'absorption de deux photons (Figure 20)^[38].

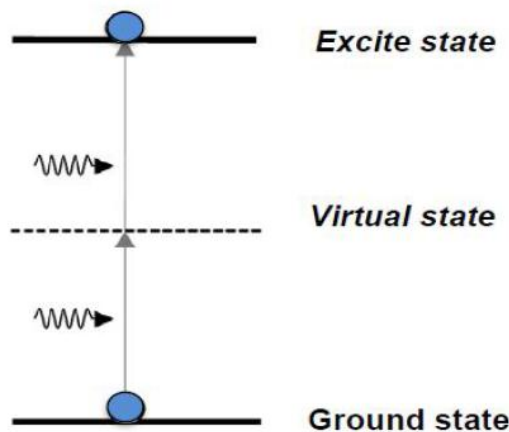


Figure 20: Schéma représentatif d'absorption de deux photons (Two-photon absorption, TPA) simultanément.

Le concept de l'introduction de bande intermédiaire pour augmenter au maximum le photocourant a été introduit par Wolf en 1960^[38]. En raison de la présence d'une impureté ou un défaut dans la bande interdite, provoqué par des joints de grains, dislocations, ou d'autres imperfections du réseau, qui pourrait agir comme des centres de recombinaison non-radiative pour les porteurs de charges, si elle est à la fois capable de piéger l'électron et le trou. En 1970, Gutter et



Queisser ^[38] ont observé une amélioration du courant de court-circuit dans une cellule solaire de silicium avec impureté. Ils ont découvert que le niveau de Fermi divisé en trois quasi-niveaux de Fermi distincts peut maintenir la haute tension de sortie d'une cellule solaire. Plus tard, la prévision sur la cellule solaire à bande intermédiaire a suggéré que, globalement, leur puissance de rendement de conversion théorique pourrait être jusqu'à 63%, ce qui dépasse largement la limite de Shockley-Queisser. La limite du rendement de conversion est basée sur l'hypothèse que tous les transports des porteurs de charge pour les électrons sans recombinaison non-radiative des charges, et des bandes de transition d'absorption ne se chevauchent pas avec les autres. La formation de la bande intermédiaire est due à la forte désadaptation dans les alliages. Des calculs *Ab initio*⁷ ont également été effectués pour identifier les matériaux à bande intermédiaire. La première cellule solaire à bande intermédiaire a été fabriquée par Phillips et al. utilisant de ZnTe dopé avec de l'oxygène en 2009 ^[38].

Pour que cette cellule fonctionne, il faut que la bande intermédiaire soit partiellement remplie. Si la bande est pleine, l'absorption entre la bande de valence et la bande intermédiaire est impossible car celle-ci ne peut plus accepter d'électrons. Si la bande intermédiaire est vide, aucune absorption n'est possible entre elle et la bande de conduction ^[39].

Une cellule solaire à bande intermédiaire optimale est obtenue dans la condition que l'énergie du photon absorbé couvre la majeure partie du spectre solaire. Dans ces conditions, les largeurs des bandes interdites entre la bande de valence (BV) et la bande intermédiaire (IB), et entre la bande de valence (BV) et la bande de conduction (BC) doivent être supérieures à la largeur de la bande de conduction. En outre, la bande interdite entre la bande intermédiaire (IB) et la bande de conduction (BC) doit être supérieure à la largeur de la bande de valence (BV) ^[38].

En 1997, Luque et Martí ont défini sept conditions nécessaires pour atteindre un IBSC idéal, qui servent de base au calcul de la performance de limitation théorique d'un IBSC idéal ^[28]. Ces conditions sont résumées dans le tableau 1. Ainsi, du point de vue des matériaux, l'absorbeur IBSC idéal aurait une recombinaison non radiative négligeable (C1), une mobilité élevée (C2) et un coefficient d'absorption élevé (C4). Du point de vue de la conception du dispositif, la structure IBSC idéal aurait un circuit IB isolé électriquement avec des contacts ohmiques parfaits (C3), une épaisseur de cellule suffisante pour assurer une absorption totale (C4), un miroir de haute qualité (C5) et un fonctionnement en concentration élevée avec concentrateur idéal (C7), tandis que l'absorbeur maintient une température de fonctionnement de 300K.

⁷ Un calcul est qualifié de calcul **ab initio** (ou « depuis les premiers principes ») s'il repose sur les lois physiques de base et établies sans postulats additionnels ou modèles spéciaux.



	Condition	implication de conception
C1	Seules les transitions radiatives entre les bandes sont considérées	Maintenir la recombinaison non radiative faible
C2	Mobilité infinie des porteurs	Utiliser des matériaux à haute mobilité
C3	Aucun électron n'est extrait de la bande intermédiaire vers le circuit externe	IB doit être isolé électriquement
C4	Absorption totale des photons	Utiliser des matériaux possédant un coefficient d'absorption élevé
C5	Diminution de la réflexion du rayonnement focalisé sur la cellule	Un miroir de haute qualité doit être placé à la face arrière de la cellule
C6	Pour chaque gamme d'énergies, une seule longueur d'onde des trois longueurs d'absorption est importante	Les matériaux ont des coefficients d'absorption optique élevés
C7	Un fonctionnement en concentration élevée utilisant un concentrateur idéal	Utiliser la concentration solaire maximale

Tableau 1: Conditions nécessaires pour un IBSC idéal [28].

3. ARCHITECTURE D'UNE CELLULE PHOTOVOLTAÏQUE

Dans une cellule photovoltaïque à base d'une jonction P-N, on dépose des électrodes métalliques de chaque côté de la jonction afin de collecter les charges photogénérées. Sur la face avant, celle qui reçoit la lumière, l'électrode a une forme de grille afin d'optimiser la collecte des porteurs tout en laissant passer la lumière. Si la grille est trop espacée, la lumière pourra passer facilement, de nombreuses charges seront créées, néanmoins, une partie des porteurs n'aura pas le temps d'être collectée avant de se recombiner. A l'opposé, si la grille est trop resserrée, tous les porteurs pourront être collectés, cependant moins de lumière pourra passer et être absorbée par le matériau créant ainsi moins de charges.

Pour certaine technologie, il est possible d'utiliser des électrodes transparentes comme l'ITO (oxyde d'indium-étain) ou le ZnO. Dans ce cas, le problème de la grille ne se pose plus puisque cette couche recouvre toute la face avant de la cellule.

Sur la face arrière, un contact métallique « plein » est déposé. Cette couche sert également de couche réfléchissante pour les photons qui n'ont pas été absorbés à leur premier passage.

Pour le GaAsN et le GaAs, les contacts sont des alliages de matériaux. Pour de type n, on utilise généralement l'alliage Au-Ge [40] ou Au/Au-Ge-Ni [34] [35] [37] [41] et pour de type p, l'alliage Au-Zn [41].

Afin de minimiser les pertes liées à la réflexion de rayons lumineux à la surface de la cellule, une couche antireflet est le plus souvent déposée sur la face avant. La technique la plus utilisée est une texturation de la surface en forme de pyramides (Figure 21 et Figure 23) ou de pyramides inversées (Figure 24) [42]. Cette texturation peut se faire au niveau du substrat (Figure 24), dans ce cas toutes les couches déposées ensuite présentent la même texturation, ou bien seulement sur la dernière couche déposée (Figure 21). Le but de cette structure est double, premièrement, elle permet de



minimiser les réflexions directes à la surface grâce aux facettes, et deuxièmement, elle piège la lumière à l'intérieur du composant à l'aide de réflexions totales internes.

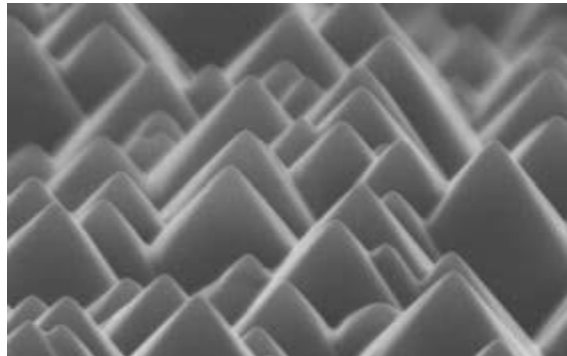


Figure 21: Image MEB de la surface d'une couche de silicium texturée en forme de pyramides [43].

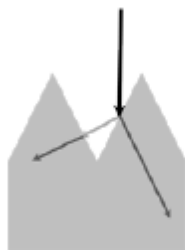


Figure 22: Schéma de fonctionnement de la texturation de surface pour les couches antireflets [42].

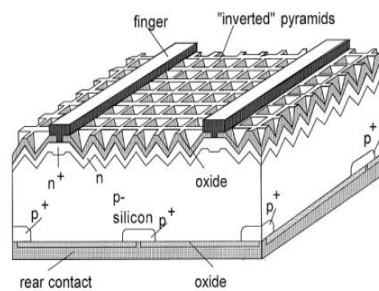


Figure 23: Structure de la cellule PERL à base de silicium avec une texturation de pyramides inversées en face avant [42].

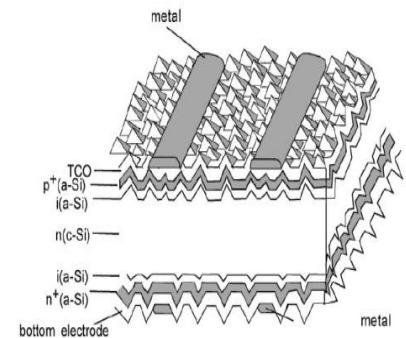


Figure 24: Structure de la cellule HIT à base de silicium avec une texturation de toutes ses couches [42].

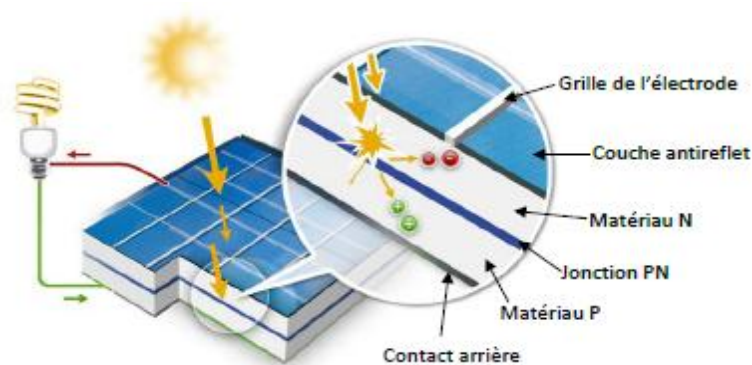


Figure 25: Schéma d'une cellule solaire avec la jonction P-N, les électrodes, la couche antireflets, et une charge électrique (ici ampoule) [43].



La figure 25 montre l'architecture d'une cellule photovoltaïque typique avec la jonction P-N, la couche antireflet, les électrodes sur les faces avant et arrière.

Les cellules photovoltaïques industrielles en silicium sont généralement dimensionnées par carrés de 10 ou 15 cm de côté. Cependant, ces dimensions dépendent de la filière, par exemple, dans la filière III-V à concentration, les cellules sont beaucoup plus petites, de l'ordre du centimètre carré. Plusieurs sont ensuite connectées les unes aux autres en série, afin d'augmenter la tension de sortie, et en parallèle, afin d'augmenter le courant. Les cellules photovoltaïques forment alors un module photovoltaïque. Par exemple, le module HIT-N235SE10 de Sanyo présente une puissance maximale de 235 W avec 72 cellules (6 x 12). Les cellules sont des hétérojonctions de silicium composées de silicium monocristallin mince et de couches ultrafines de silicium amorphe sur les faces avant et arrière. Ce panneau produit une tension maximale de sortie de 43 V et un courant maximum de sortie de 5.48 A ^[43].

4. CONCLUSION

Ce chapitre est destiné aux personnes qui n'ont pas de connaissance dans le domaine PV. C'est la raison pour laquelle nous avons introduit les principes des PV de manière la plus simple possible. Nous avons rappelé les notions fondamentales de cellules photovoltaïques telles que l'effet photovoltaïque des cellules solaires à jonction P-N, leurs paramètres de sortie et leurs réponse spectrale.

Un bref aperçu a été donné sur les variantes de cellules solaires telles que les cellules solaires à barrière Schottky (SchottkySC) et les cellules solaires à bande intermédiaire (IBSC). Ces notions vont servir dans la suite de ce travail.



REFERENCES

- [1] **Raj S Dhankar**, Book: "Climate Change: Financial and Societal Implications". New Delhi: Readworthy, (2017).
- [2] **James Hansen, Larissa Nazarenko, Reto Ruedy, Makiko Sato, Josh Willis, Anthony Del Genio, Dorothy Koch, Andrew Lacis, Ken Lo, Surabi Menon, et al.**, "Earth's energy imbalance: Confirmation and implications". *Science*, 308(5727):1431–1435, (2005).
- [3] **Thomas R Karl and Kevin E Trenberth**, "Modern global climate change". *Science*, 302(5651):1719–1723, (2003).
- [4] **Bruce Podobnik**, Book: "Global energy shifts". The Energy and Resources Institute (TERI), (2006). https://books.google.dz/books?id=zWIRmvaC4LgC&pg=PP9&hl=fr&source=gbs_selected_pages&cad=3#v=onepage&q&f=false
- [5] **AJ Nozik**, "Exciton multiplication and relaxation dynamics in quantum dots: applications to ultra-high efficiency solar photon conversion". *Inorganic chemistry*, 44(20):6893–6899, (2005).
- [6] **M. ARIF**. Investigation of new approaches for the realization of InGaN based solar cells. Université de Lorraine. France, (2017).
- [7] <https://localharvestorganics.com/blog/f/full-spectrum-led-grow-lighting> , consulté le Novembre (2019).
- [8] <http://www.greenrhinoenergy.com/solar/radiation/spectra.php>, consulté le Novembre (2019).
- [9] Solar Generation. 6: Solar photovoltaic electricity empowering the world. European Photovoltaic Industry Association EPIA, (2011).
- [10] **C.KOST**. "Levelized cost of electricity renewable energy technologies". Fraunhofer Institute for Solar Energy Systems ISE. Freiburg . Germany (2013).
- [11] **Martin A Green**. Book: "Third generation photovoltaics: advanced solar electricity generation". Springer-Verlag, Berlin, (2003).
- [12] **B. Oliva-Chatelain and A Barron**. "An introduction to solar cell technology", (<https://cnx.org/contents/3QU3ovtd@1/An-Introduction-to-Solar-Cell-Technology>), consulté le Novembre (2019).
- [13] <https://energieplus-lesite.be/techniques/photovoltaique3/types-de-cellules/>, consulté le Novembre (2019).
- [14] **Kazuo Jimbo, Ryoichi Kimura, Tsuyoshi Kamimura, Satoru Yamada, Win Shwe Maw, Hideaki Araki, Koichiro Oishi, and Hironori Katagiri**. "Cu 2 znsns 4-type thin film solar cells using abundant materials". *Thin Solid Films*, 515(15):5997–5999, (2007).
- [15] **Hironori Katagiri, Kazuo Jimbo, Win Shwe Maw, Koichiro Oishi, Makoto Yamazaki, Hideaki Araki, and Akiko Takeuchi**, "Development of czts-based thin film solar cells". *Thin Solid Films*, 517(7):2455–2460, (2009).
- [16] **K Wang, O Gunawan, T Todorov, B Shin, SJ Chey, NA Bojarczuk, D Mitzi, and S Guha**. "Thermally evaporated cu2znsns4 solar cells". *Applied Physics Letters*, 97(14):3508, (2010).
- [17] <https://www.futura-sciences.com/planete/dossiers/developpement-durable-cellules-photovoltaiques-coeur-panneaux-solaires-1688/page/11/>, consulté le Novembre (2019).
- [18] **ISE Fraunhofer**. "New world record for solar cell efficiency at 46% french-german cooperation confirms competitive advantage of european photovoltaic industry", (2014).
- [19] **Anna Mukhtarova**. Thèse de doctorat : "InGaN/GaN Multiple Quantum Wells for Photovoltaics", **université de Grenoble**, France (2015).
- [20] https://www.eurekalert.org/pub_releases_ml/2016-06/epfd-t060816.php, consulté le Novembre (2019).



- [21] **Moulay Ahmed SLIMANI**, thèse de doctorat : “Cellules solaires pérovskites imprimées et optimisation des couches pérovskites pour les cellules tandems”, école de technologie supérieure. université du Québec, CANADA (2019).
- [22] **Marina S Leite, Robyn L Woo, Jeremy N Munday, William D Hong, Shoghig Mesropian, Daniel C Law, and Harry A Atwater**, “Towards an optimized all lattice-matched inAlAs/InGaAsP/InGaAs multijunction solar cell with efficiency > 50%”. *Applied Physics Letters*, 102(3):033901, (2013).
- [23] **Antonio Marti and Gerardo L Araújo**, “Limiting efficiencies for photovoltaic energy conversion in multigap systems”, *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 43(2):203–222, (1996).
- [24] **Alauddin Bhuiyan, Kei Sugita, Akihiro Hashimoto, and Akiyasu Yamamoto**. “Ingan solar cells: present state of the art and important challenges”, *Photovoltaics, IEEE Journal of*, 2(3):276–293, (2012). DOI:10.1109/JPHOTOV.2012.2193384
- [25] **Omkar Kujadkumar Jani**, PhD thesis: “Development of wide-band gap InGaN solar cells for high-efficiency photovoltaics”, Georgia Institute of Technology, (2008).
- [26] **William Shockley and Hans J Queisser**, “Detailed balance limit of efficiency of pn junction solar cells”. *Journal of applied physics*, 32(3):510–519, (1961).
- [27] **Antonio Luque, Antonio Martí, and Colin Stanley**, “Understanding intermediate band solar cells”, *Nature Photonics*, 6(3):146–152, (2012).
- [28] **Antonio Luque and Antonio Martí**, “Increasing the efficiency of ideal solar cells by photon induced transitions at intermediate levels”. *Physical Review Letters*, 78(26):5014, (1997).
- [29] https://fr.wikipedia.org/wiki/Cellule_photovolt%C3%A0_p%C3%A9rovskites, consulté le Novembre (2019).
- [30] <https://www.futura-sciences.com/sciences/actualites/physique-cellules-photovoltaïques-dopees-cafeine-63516/>, consulté le Novembre (2019).
- [31] **Aditya Jain**, thesis of Master of Science: “Impact of electrical contacting scheme on performance of InGaN/GaN Schottky Solar Cell”. Virginie, États-Unis (2014).
- [32] **Walid El-Huni**. Thèse de doctorat, “Modélisation de cellules solaires multi-tandem bas coût et très haut rendement à base de nitrures des éléments III-V”. Université Paris-Sud XI. France (2016).
- [33] **Henry Mathieu, Hervé Fanet**. Livre, “Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques”. 6^{ème} édition, Dunod, Paris, (2009).
- [34] **W. Bachir Bouiadja, A. Saidane, A. Mostefa, M. Henini, M. Shafi**, “Effect of nitrogen incorporation on electrical properties of Ti/Au/GaN Schottky diodes”, *Superlattices and Microstructures* 71 225–237, (2014).
- [35] **N. Al Saqri, J.F. Felix, M. Aziz, D. Jameel, C.I.L. de Araujo, H. Albalawi, F. Al Mashary, H. Alghamdi, D. Taylor, M. Henini**, “Investigation of the effects of gamma radiation on the electrical properties of dilute GaAs_{1-x}N_x layers grown by Molecular Beam Epitaxy”, *Current Applied Physics* 1-8, (2015).
- [36] **Chen Dong, Xiuxun Han, Xin Gao, Yoshio Ohshita, Masafumi Yamaguchi**, “Electrical characterization of Cu Schottky contacts to n-type GaAsN grown on (311)A/B GaAs substrates”, *Journal of Alloys and Compounds* (2015). 10.1016/j.jallcom.2015.10.097
- [37] **Victor-Tapio Rangel-Kuoppa, Outi Reentilä, Markku Sopanen, and Harri Lipsanen**, “Temperature Dependence Of Current-Voltage Characteristics Of Au/p-GaN Schottky Barrier Diodes, With Small N Content”, *AIP Conference Proceedings* 1399, 171 (2011); doi: 10.1063/1.3666311
- [38] **KHELIFI Seyf Allah**, Thèse de doctorat, “Optimisation des paramètres photovoltaïques d’une cellule solaire réalisée à partir de matériaux ternaires ou quaternaires basés sur les semi-conducteurs II-VI”, Université Djillali Liabes De Sidi Bel Abbes, Algérie, (2017).
- [39] **Luce Alexander Vallejo**, these de doctorat: “Engineering Dilute Nitride Semiconductor Alloys for Intermediate Band Solar Cells”, Université de California, Berkeley (2015).



- [40] P. Kamyczek, P.Bieganski, E.Placzek-Popko, E.Zielony, L. Gelzuk, B. Sciana, D. Pucicki, D.Radziewicz, M.Tlaczala, K. Kopalko, M. Dabrowska-szata, "Electro-optical properties of diluted GaAsN on GaAs grown by APMOVPE", Materials Science-Poland, 31(4pp. 595-600), (2013).
- [41] Boussairi Bouzazi, "Nobuaki Kojima, Yoshio Ohshita, and Masafumi Yamaguchi ; Analysis of current transport mechanisms in GaAsN homo junction Solar cell grown by Chemical Beam Epitaxy", JPV -2012-05-0 120-R, (2012).
- [42] Green, M.A., et al. "Progress and outlook for high-efficiency crystalline silicon solar cells". Solar Energy Materials and Solar Cells, Vol. 65, 9, (2001).
- [43] Vanessa GORGE, thèse de doctorat, "Caractérisations de matériaux et tests de composants des cellules solaires à base des nitrures des éléments III-V". université Paris sud, France (2012).



CHAPITRE 2:

ÉTAT DES CONNAISSANCES SUR L'ALLIAGE GaAsN

SOMMAIRE

1. INTRODUCTION	40
2. LE GaAsN, L'EXCEPTION DES SEMICONDUCTEURS III-V	40
3. STRUCTURE ELECTRONIQUE DES ALLIAGES GaAsN	43
4. PROPRIETES ELECTRONIQUES DES ALLIAGES GAASN	46
4.1 MOBILITE DES ELECTRONS	46
4.2 MOBILITE DES TROUS	48
5. PROPRIETES OPTIQUES DES ALLIAGES GaAsN	49
6. LES DEFAUTS DANS LES ALLIAGES GaAsN	53
7. TECHNOLOGIE DE FABRICATION DU COMPOSE TERNAIRE GaAsN	59
7.1 TECHNIQUE DE CROISSANCE MBE	60
7.2 TECHNIQUE DE CROISSANCE MOVPE	61
7.3 TECHNIQUE DE CROISSANCE CBE	62
8. CONCLUSION	63



1. INTRODUCTION

Les alliages de nitrure GaAsN dilué ont attiré une attention considérable ces dernières années. L'énergie de bande interdite du GaAsN est sensiblement réduite lorsque la composition en azote, N, augmente, c'est-à-dire que pour environ 1% de N ajouté à GaAs, l'énergie de la bande interdite est réduite d'environ 150 meV ^[1-4]. Les premiers alliages en GaAsN ont été fabriqués par épitaxie par jet moléculaire (EJM) en 1994 par M. Kondow et al ^[5]. Le ternaire GaAsN a été fabriqué avec environ 4% d'azote sur substrat GaAs en utilisant une source plasma azote, et un très fort coefficient de courbure du gap (bowing parameter, b) de 18 eV a été observé. En utilisant l'épitaxie en phase vapeur aux organométalliques (EPVOM), M. Weyers et al ^[6] ont réalisé la croissance de GaAsN avec ~1.5% d'azote, une très importante réduction du gap dû à l'incorporation d'azote a été observée par photoluminescence¹. Ceci a permis d'accéder à la gamme télécom 1.3 - 1.55 μm pour les applications optoélectroniques. Mais, malheureusement cette réduction du gap s'accompagne d'une forte dégradation de la qualité du matériau avec l'augmentation de la composition en azote. Dès 1995, Kondow et al. ^[7] proposent l'utilisation de nitrures dilués accordés en maille au GaAs en utilisant l'alliage quaternaire InGaAsN, ceci a permis de plus d'obtenir de faibles gaps tout en limitant la concentration en azote dans le matériau et les contraintes. Dès lors, de nombreuses études expérimentales et théoriques ont été conduites sur ces alliages pour expliquer ces propriétés exceptionnelles et pour développer les alliages et les composants optoélectroniques.

Dans ce chapitre, nous allons établir le portrait des connaissances actuelles au sujet des alliages GaAsN. Nous passerons en revue les études théoriques de la structure de bande de GaAsN. Ensuite, nous résumerons les connaissances théoriques et expérimentales actuelles sur les propriétés électroniques et optiques des alliages GaAsN. Enfin, nous présenterons les types des défauts existant dans l'alliage GaAsN et les techniques de fabrication.

2. LE GaAsN, L'EXCEPTION DES SEMICONDUCTEURS III-V

La prévision la plus simple des propriétés physiques des alliages ternaires à base de semiconducteurs est une extrapolation linéaire entre les propriétés des éléments terminaux ou des composés binaires, à savoir la loi de Vegard (la loi des mélanges) ^[8]. La figure 1 montre un graphique de l'énergie de la bande interdite par rapport au paramètre de réseau pour les alliages ternaires

¹ La **photoluminescence** (PL) est un processus par lequel une substance absorbe des photons puis ré-émet des photons. En science des matériaux, la photoluminescence est une méthode de spectroscopie avec laquelle il est possible d'analyser des matériaux semiconducteurs ou isolants, en fournissant des renseignements sur les propriétés du matériau (l'énergie de bande interdite, la composition du matériau dans des alliages), les défauts superficiels radiatifs tels que les accepteurs et les donneurs, et les impuretés qui présentent des transitions internes.



InGaAs (en bleu), GaAsSb (en rouge), GaAsBi (en mauve) et GaAsN (en vert) ainsi que pour l'alliage quaternaire InGaAsN (zone grise).^{[1] [10]}

En règle générale, les bandes interdites des alliages des semiconducteurs composés élémentaires ou binaires ne sont pas des interpolations linéaires des extrémités (comme le prévoit la loi de Vegard), mais sont légèrement inclinés à des bandes interdites inférieures. Un tel comportement est généralement décrit par un écart quadratique par rapport à la loi de Vegard, avec un coefficient de courbure du gap (bowing parameter, b). Dans les alliages III-V classiques, le bowing b est typiquement indépendant de la composition^[9]. Par contre, pour le GaAsN, l'énergie du gap (Figure 1) et la valeur du coefficient de courbure b ($b = 20.4-100x$) dépendent de la composition en azote N.

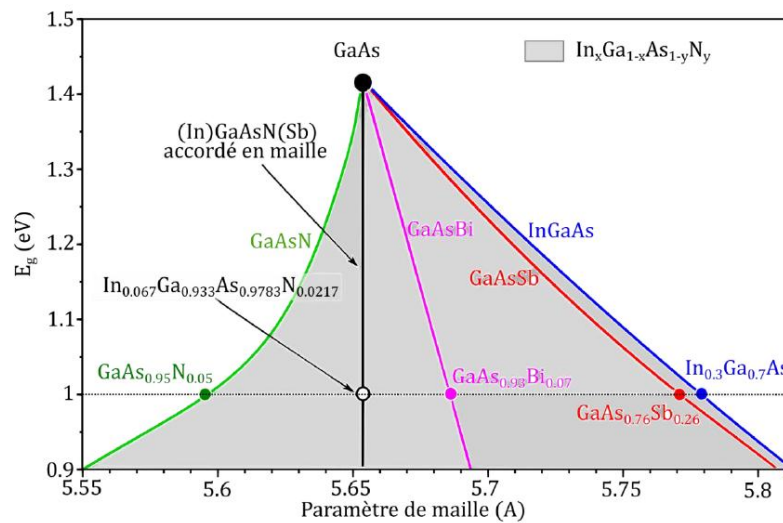


Figure 1: Diagramme du gap en fonction du paramètre de maille pour les alliages ternaires InGaAs (en bleu), GaAsSb (en rouge), GaAsBi (en mauve) et GaAsN (en vert) ainsi que pour l'alliage quaternaire InGaAsN (zone grise) (et par extension pour le GaAsSbN, en enlevant la partie grisée entre la courbe rouge et la courbe bleue)^[10].

Le coefficient de courbure (b) de la bande interdite qui s'incline dans les semiconducteurs a été attribué au désordre de l'alliage, les valeurs de b étant liées à la non-concordance d'électronégativité² des constituants^[11-12]. Le tableau 1 présente l'électronégativité de Pauling des éléments du groupe V^[13]. La différence d'électronégativité entre N et As / P est de 1.0/ 0.9 eV, bien supérieure à celle existant entre les autres éléments du groupe V^[9]. Ainsi, une courbure en bande interdite significative est observée dans les alliages fortement désadaptés tels que les III-V-N, comme le montre le tableau 2.

² L'électronégativité représente l'attraction d'un atome envers les charges négatives (électrons). Elle permet de décrire le comportement des électrons lors de la formation d'une liaison chimique. L'échelle de Pauling est très largement utilisée pour cette propriété, Elle a été proposée par Linus Pauling en 1932.



Élément	Electronégativité
N	3.04
P	2.19
As	2.18
Sb	2.05
Bi	2.02

Tableau 1: Electronégativité de Pauling des éléments d'intérêt appartenant aux groupes V ^[13].

Les Alliages	E_B-E_C (eV)	b(eV)	Les Alliages	E_B-E_C (eV)	b(eV)
AB_xC_{1-x}			AB_xC_{1-x}		
GaAsSb	0.2	1.43	GaAsN	1	20.4-100x
InAsSb	0.2	0.67	GaPN	0.9	3.9
AlAsSb	0.2	0.8	InPN	0.9	15
GaPAs	0.1	0.19	InASN	1	4.22
InPAs	0.1	0.1			
AIPAs	0.1	0.22			
GaPSb	0.3	2.7			
InPSb	0.3	1.9			

Tableau 2: Différence d'électronégativité entre les éléments du groupe V, E_B-E_C (eV) et le coefficient de courbure du gap, b, pour certains alliages III-V ^[9].

L'incorporation simultanée d'Indium In et de l'azote N avec un rapport de composition spécifique (In: N = 3: 1) permet la formation de substrats InGaAsN non soumis à une contrainte sur GaAs ou InP avec une énergie de bande interdite inférieure à 1.42 eV ^[1, 2, 3]. Par exemple, selon les calculs un réseau InGaAsN adapté à GaAs avec $E_g = 0,93$ eV ($\lambda = 1.33 \mu\text{m}$) et 0.8 eV ($\lambda = 1.55 \mu\text{m}$) peut être obtenu avec $\text{In}_{0.10}\text{GaAsN}_{0.038}$ et $\text{In}_{0.18}\text{GaAsN}_{0.06}$ ^[14]. En outre, avec une incorporation de 20% de N dans GaAs ou de 2% de N dans GaP, les alliages obtenus à savoir le $\text{GaN}_{0.2}\text{As}_{0.8}$ ou $\text{GaN}_{0.02}\text{P}_{0.98}$ sont des réseaux adaptés au Si, ce qui permet potentiellement la réalisation de films épitaxiaux III-V de haute qualité sur des substrats en Si. La possibilité de modifier considérablement l'énergie de la bande interdite tout en maintenant l'adaptation de réseau aux substrats communs fait de (In) GaAsN un matériau prometteur pour une large gamme d'applications optoélectroniques proche de l'infrarouge, notamment les émetteurs et détecteurs de lumière à longue longueur d'onde, les dispositifs électroniques à hautes performances et les cellules solaires à haute efficacité énergétique ^[15-19].



3. STRUCTURE ELECTRONIQUE DES ALLIAGES GaAsN

Hjalmarson a fourni une compréhension de base de la structure électronique inhabituelle des alliages GaAsN, dont les calculs très contraignants prédisent que les niveaux d'énergie des éléments à haute électronégativité sont situés à des énergies inférieures à celles des impuretés plus métalliques^[20]. Ainsi, le remplacement de l'arsenic As avec du phosphore P est prévu pour produire un niveau d'énergie élevé dans la bande de conduction de GaAs, ce qui conduit à une interaction relativement faible entre l'impureté et la bande étendue.

Cependant, la substitution de l'arsenic As par l'azote N hautement électronégatif conduit à l'apparition d'un niveau défaut situé près du minimum de la bande de conduction. Cet état d'impureté interagit fortement avec les états de la bande de conduction étendus et modifie radicalement la structure électronique des alliages GaAsN, conduisant vraisemblablement à la formation inhabituelle de la bande interdite.

Parmi les nombreuses tentatives de compréhension de la structure de bande (In)GaAsN^{[21] [22] [23-27]} un modèle semi-empirique³ anti-croisement de bande (BAC⁴) proposé par Shan et al.^{[28] [29]}, a eu plus de succès dans l'explication de l'effet de la courbure de la bande interdite en (In) GaAsN. Dans ce modèle, une bande N localisée plus haute (E_N) interagit avec la bande de semiconducteur hôte étendue (E_c) entraînant une division de la bande de conduction (CB) en deux sous-bandes (E_+ et E_-) comme le montre schématiquement la figure 2^[30]. Dans cette figure Les lignes en pointillés représentent les énergies non perturbées des états localisés induits par N et la bande de conduction du GaAs. La ligne en trait plein représente les bandes hybrides E_- et E_+ . La sous-bande inférieure (E_-) est décalée vers le bas et a principalement un caractère délocalisé de type bande de conduction (CB-like). Ceci est considéré comme responsable de la réduction de la bande interdite fondamentale. Par contre, la sous-bande supérieure E_+ a principalement le caractère de N états localisés.

³ Les méthodes semi-empiriques sont des techniques de résolution de l'équation de Schrödinger de systèmes à plusieurs électrons. Contrairement aux méthodes *ab initio*, les méthodes semi-empiriques utilisent des données ajustées sur des résultats expérimentaux afin de simplifier les calculs.

⁴ Le premier modèle à reproduire la réduction de la largeur de bande interdite du CaAsN fut le modèle d'anti-croisement de bandes (BAC). Ce dernier consiste à supposer une interaction entre deux états seulement : la bande de conduction E_c et un état d'impureté fortement localisé de l'azote EN.



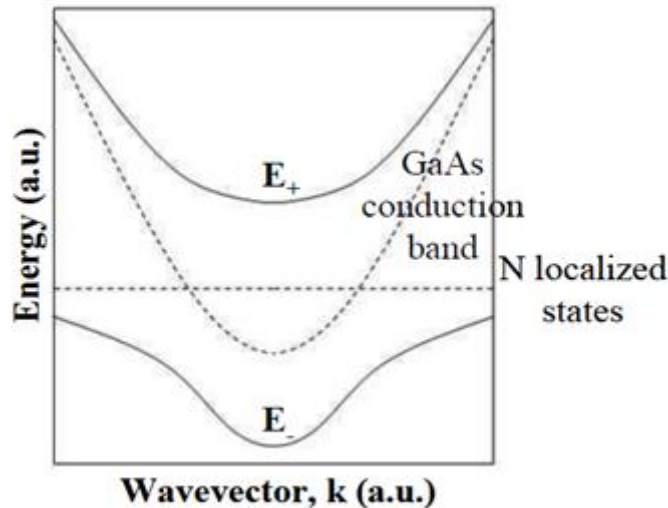


Figure 2: Schéma des relations de dispersion pour les sous-bandes (traits pleins) de GaN_{0,01}As_{0,99} en utilisant le modèle BAC^[30].

Outre l'abaissement de la bande interdite est dû à l'incorporation de N par substitution. Un certain nombre de niveaux de défauts induits par N près du bord de la bande de conduction ont été prédits, notamment les N paires des plus proches voisins, les triplets et les clusters⁵, ainsi que les N interstitiels⁶ et des complexes de défauts^{[21] [31-34]}. La distribution de ces niveaux d'azote devrait influencer de manière significative sur les propriétés électroniques du GaAsN. Par exemple, le modèle de la combinaison linéaire de N états résonants isolés (Linear Combination of Isolated N resonant States, LCINS)^[35], un modèle BAC modifié, qui inclut explicitement les niveaux de défauts induits par N, prédit l'existence du niveau E₋ et identifie un niveau E₊ qui s'élargit avec la composition croissante de N. En outre, le modèle LCINS prédit l'augmentation non monotone de m_e^* observée expérimentalement^{[32] [36] [37]}. La figure 3 présente un graphique de la masse effective des électrons m_e^* en fonction de la composition N dans GaAs_{1-x}N_x déterminée par des techniques expérimentales (symboles ouverts)^{[32] [36] [37]}, par rapport à ceux calculés à l'aide d'un modèle BAC à deux niveaux (ligne en pointillé)^[38] et du modèle LCINS, c'est-à-dire incluant l'hybridation entre le bord de la bande de conduction et l'état du cluster N (symboles en trait plein)^[22].

Dans la figure 3 on remarque que la m_e^* prédit par le modèle BAC est nettement inférieur à l'observation expérimentale. La tendance non monotone de m_e^* est bien déterminée par le calcul incluant les niveaux de résonance N.

⁵ En physique, le mot anglais **cluster** est utilisé pour désigner des agrégats : soit d'atomes pouvant contenir entre 3 et $3 \cdot 10^7$ atomes et liés chimiquement entre eux, soit d'électrons de 10^3 à 10^{12} dans un volume de l'ordre d'une molécule.

⁶ Les **atomes interstitiels** sont des atomes en surnombre dans une structure ou bien des impuretés placés sur des sites normalement vides.



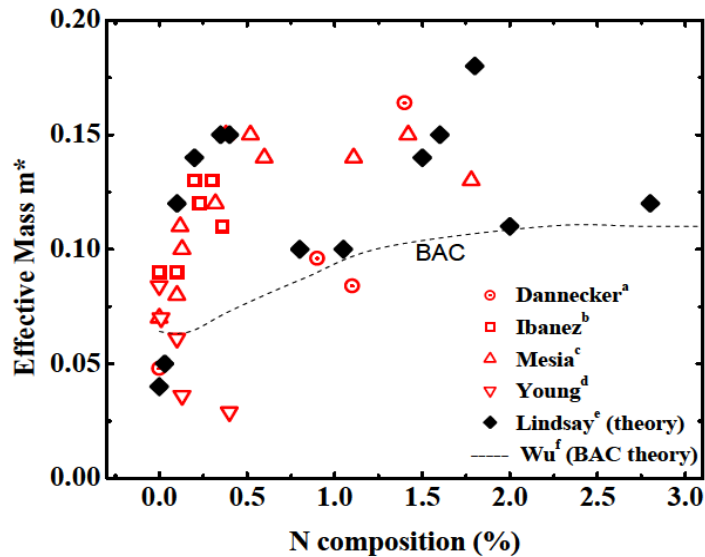


Figure 3: Résumé de la masse effective des électrons en fonction de la composition en N déterminé par diverses méthodes expérimentales et par calcul. a, b ^[36], c ^[32], d ^[37], e ^[22], f ^[38].

I. Vurgaftman et J. R. Meyer ont traité dans leur travail " Band parameters for nitrogen-containing semiconductors" les variations de la bande interdite en fonction de la composition x , en comparant plusieurs travaux théoriques et expérimentaux ^[29]. La figure 4 représente la variation de la bande interdite fondamentale entre le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction, en fonction de la composition x pour $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ à 300 K. La courbe pointillé serré avec un paramètre de courbure constant de ~ 18 , et aussi une courbe pointillé espacé avec le paramètre de courbure variable de $(20.4-100x)$ eV sont représentées à titre de comparaison. On peut voir que le modèle BAC prédit un gap énergétique nettement plus élevé lorsque la fraction N dépasse 1.5%. Les données expérimentales disponibles sur la figure 4 montrent clairement un meilleur accord avec le paramétrage du BAC qu'avec l'une ou l'autre des deux courbes basées sur le coefficient de courbure du gap. Jusqu'à présent, aucune limite supérieure sur les compositions en N pour lesquelles le modèle BAC reste valide n'a été identifiée. De plus, les alliages $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ avec $x \sim 5\%$ deviennent de plus en plus difficiles à faire croître ^[29].



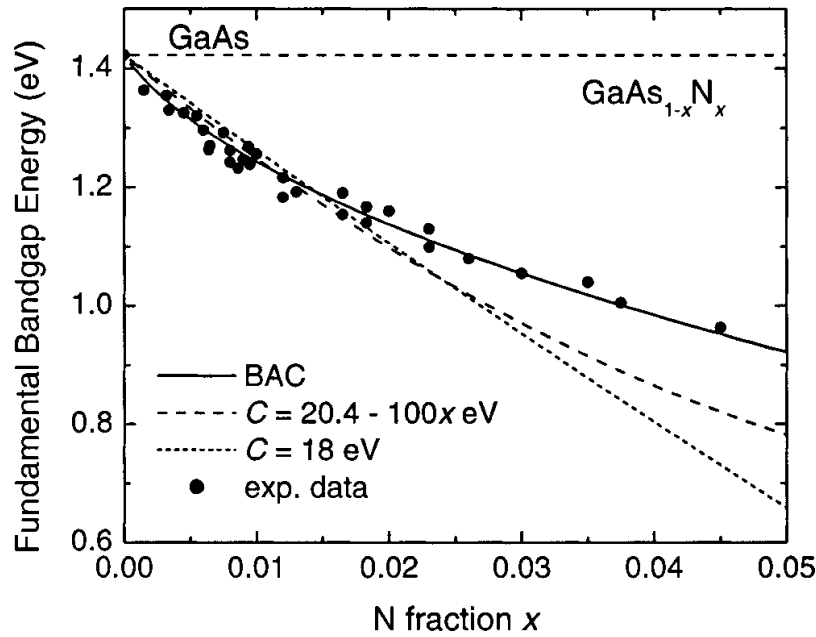


Figure 4: Energie de la transition fondamentale de la bande interdite dans le GaAsN en fonction de la fraction d'azote x , (a) le modèle BAC courbe en trait plein, (b) en utilisant le coefficient de courbure en fonction de la fraction x (courbe en pointillée espacé), et (c) en utilisant un coefficient de courbure constant (courbe en pointillée serré), et les données expérimentales est également tracé en cercles ^[29].

4. PROPRIETES ELECTRONIQUES DES ALLIAGES GAASN

4.1 MOBILITE DES ELECTRONS

À ce jour, la littérature a présenté des mobilités des électrons (μ_n) beaucoup plus faibles pour les alliages (In) GaAsN par rapport à celles de (In) GaAs ^[39-42]. La figure 5 montre un graphique de μ_n en fonction de la composition de N (x) pour les films de GaAs_{1-x}N_x, incluant les données de la littérature ^{[39] [41] [43-45]}. Pour x appartenant à l'intervalle $[0, 0.01]$, μ_n est réduit de plus d'un ordre de grandeur. Lorsque x est augmenté à 0.02, μ_n continue de diminuer lentement.



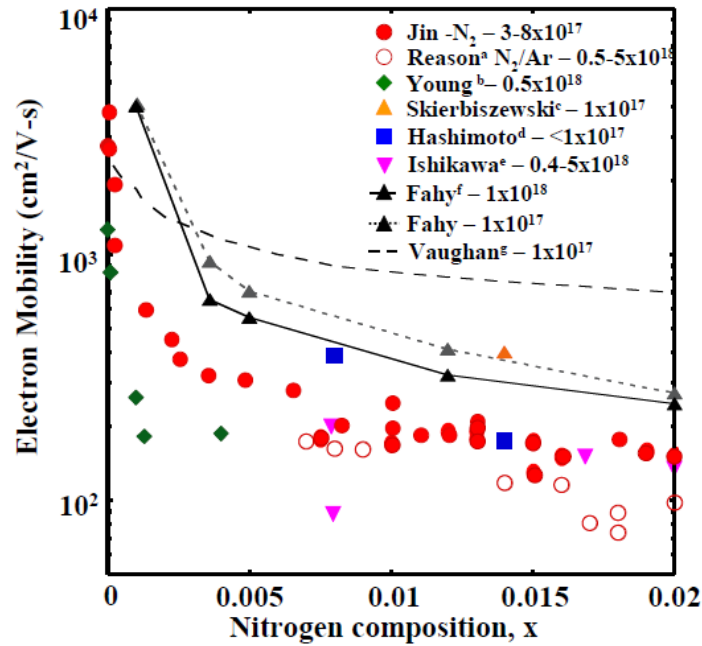


Figure 5: Mobilité électronique μ_n en fonction de la composition de N pour des films massifs de GaAs_{1-x}N_x de différentes concentrations de porteurs libres ciblés, en unités de cm⁻³. a [43], b [39], c [45], d [44], e [41], f [40], g [42].

À ce jour, seules quelques études théoriques ont été consacrées à la compréhension de cette dégradation drastique de μ_n avec l'augmentation de x dans GaAs_{1-x}N_x [40] [42] [46]. Hashimoto et al. a attribué la diminution de μ_n à une diffusion induite par l'azote non spécifiée [44]. Skierbiszewski et al. ont fait valoir que la réduction en μ_n résulte de la valeur de la masse effective m_e^* accrue avec x due à la dispersion d'énergie nonparabolique de la bande de conduction de GaAsN prédite par le modèle BAC [45]. Cependant, les calculs qui incluent les contributions de la non parabolicité de bande prédites par le modèle BAC ainsi que de l'optique polaire, phonon acoustique, piézoélectrique, impuretés ionisées et diffusion d'impuretés neutres, prédit une faible mobilité de GaAsN ($\mu_n = \sim 1000 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$) (la ligne en pointillée de la figure 5) [42]. Elle représente un ordre de grandeur supérieur aux valeurs mesurées (les points de données dispersés sur la figure 5). L'écart entre les valeurs μ_n expérimentales et calculées suggère que la diffusion d'électrons dans le GaAsN ne peut pas être prise en compte uniquement par l'augmentation de m_e^* induite par la non-parabolicité de la bande de conduction, comme prévu par le modèle BAC.

Plus récemment, Fahy et al. ont modifié le modèle BAC pour y inclure l'influence des clusters d'azote [40]. Avec une approximation indépendante de la diffusion (c'est-à-dire que le taux de diffusion total est la somme des taux de diffusion des atomes d'azote individuels), Fahy a estimé une mobilité μ_n de $\sim 400 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$ pour GaAs_{1-x}N_x avec $x = 0.01-0.02$ (le trait plein sur la figure 5), ce qui est bien inférieur au résultat de Vaughan, mais reste environ deux fois plus élevé que les valeurs



mesurées. La discordance entre la dépendance à x de μ_n et les prédictions théoriques suggère que les sources de diffusion en addition des N substitution et N clusters, telles que $(NN)_{As}$ ou $(NAs)_{As}$ interstitiels divisés, doivent être prises en compte théoriquement.

Dans la figure 5, les cercles pleins (ouverts) représentent les résultats pour les films développés avec du N_2 pur (mélange N_2/Ar) comme gaz source en azote N. Les autres, points solides, sont des mesures de μ_n , extraits de la littérature. Les mobilités μ_n calculés par Fahy et Vaughan sont également incluses à des fins de comparaison. La mobilité μ_n mesuré décroît sensiblement avec l'augmentation de la composition en N et est inférieure à la prédiction de toutes les théories.

4.2 MOBILITE DES TROUS

Masafumi Yamaguchi et al. ^[47] dans leur travail "III-V-N materials for super high-efficiency multijunction solar cells" ont mis au point la technique CBE (Chemical Beam Epitaxy), leurs travaux sont particulièrement concentrés sur l'incorporation d'azote dans le film mince de GaAs développé par CBE en fonction du temps de croissance et de l'orientation du substrat. Ils ont également proposé une nouvelle modulation CBE (FM-CBE) afin d'augmenter l'incorporation de N et de réduire l'incorporation de C et H dans les films, ceci a été réalisé en adaptant la technique CBE pour la croissance de couches minces de (In) GaAsN de grand mobilité électronique et de durée de vie plus longue des porteurs minoritaires par rapport à celles développées par d'autres méthodes de croissance. La figure 6 montre la mobilité des trous de GaAsN développée par CBE en fonction de la composition N.

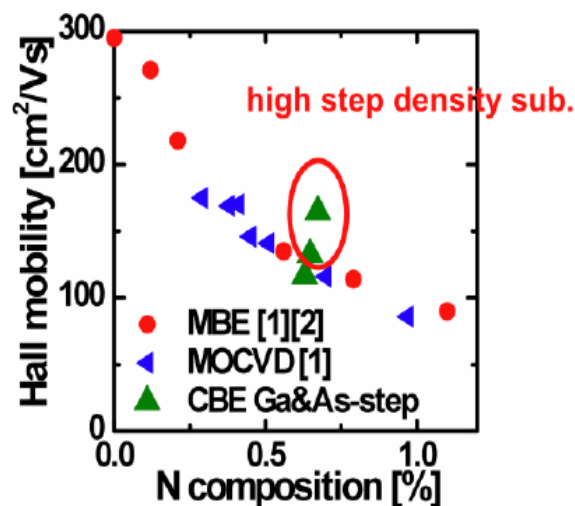


Figure 6: La mobilité des trous de GaAsN développée par CBE ^[47].



5. PROPRIÉTÉS OPTIQUES DES ALLIAGES GaAsN

Pour les propriétés optiques de GaAs_{1-x}N_x, lorsque x augmente, un décalage vers le rouge (décalage vers une longueur d'onde plus longue) dans l'émission de photoluminescence (PL) est généralement accompagné d'une dégradation radicale de l'intensité de l'émission ^{[1] [48] [49]}. Par exemple, quand x dans GaAs_{1-x}N_x augmente de 0.01 à 0.045, l'efficacité de la PL à la limite de la bande (Near band Edge, NBE) décroît d'un facteur 60^[50]. Cette dégradation de l'efficacité de la PL est communément attribuée à la «mauvaise qualité structurale» et à l'influence des «centres de recombinaison non radiatives» dans les alliages GaAsN. Cependant, à l'heure actuelle, les informations disponibles concernant la structure atomique et électronique de ces défauts non radiatifs sont limitées.

Plusieurs autres caractéristiques sont également couramment observées dans les spectres NBE PL⁷ (Near band Edge photoluminescence) de GaAsN, telles que les décalages de Stokes d'absorption/émission, le décalage vers le bleu des émissions dépendant de la puissance d'excitation et une forme de ligne de pic d'émission asymétrique avec de longues queues du côté basse énergie^[50]. Ces fonctionnalités sont généralement associées à la localisation des porteurs. Pour la localisation dans le GaAsN, Buynova et al. ont estimé un potentiel de localisation $E \sim 40-60$ meV, ce qui est supérieur à la valeur de 7-10 meV pour les autres systèmes d'alliages, tels que GaAsP, AlGaAs et SiGe^[50]. De plus, dans les mesures de PL en champ proche inférieures à 70 K, Mintairov et al. ont observé des lignes étroites avec FWHM (Full Width at Half Maximum) 0.2–2 meV^{[51] [52]}. Les lignes ont été attribuées à la recombinaison excitonique «quantum-dot-like», ce qui suggère la présence de clusters d'azote au-dessus de celui d'une distribution aléatoire.

Un paramètre essentiel pour les applications de cellules solaires et de HBT (**H**etero-junction **B**ipolar **T**ransistor) est la longueur de diffusion des porteurs minoritaires, L_m , qui dépend de la mobilité des électrons et de la durée de vie des porteurs, selon l'équation^[53]:

$$L_m = (\mu\tau k_B T / e)^{1/2} \quad \text{Eq.1}$$

Dans les cellules solaires, pour le cas non-dégénéré, L_m est, idéalement, sensiblement plus longue que la longueur d'absorption optique des photons solaires, cela permet ainsi à tous les photons

⁷The **Band Edge** emission en français (L'émission de bord de la bande) implique le processus de recombinaison des électrons à partir du bord le plus bas de bande de conduction avec les trous présents dans le bord le plus haut de la bande de valence. Lorsque l'électron se recombine avec le trou de cette manière, le processus entraîne l'émission d'un photon avec une énergie égale à l'énergie de la bande interdite. Un tel processus est communément appelé émission de bord de bande.

Near Band Edge emission (NBE) ou L'émission proche de la bande peut provenir essentiellement d'excitoniques ou d'autres états pièges peu profonds.



incidents d'être absorbés et à tous les porteurs générés optiquement de contribuer au courant électrique du dispositif.

Par exemple, dans le GaAs, la longueur d'absorption optique est d'environ 3 μm , tandis que L_m est d'environ 10 μm [54][55], En revanche, l'InGaAsN avec une bande interdite de 1 eV, une durée de vie de 0.3 ns et une mobilité μ de 200 cm^2/Vs , est généralement considéré comme un bon matériau [43], ce qui donnerait $L_m = 0.4 \mu\text{m}$. En effet, il a été rapporté que les performances des cellules solaires à quatre jonctions GaInP/GaAs/GaInNAs/Ge ont été limitées en raison de la courte longueur L_m d'InGaAsN. [54][55]

Bien qu'il semble y avoir un écart entre le L_m souhaité et le L_m obtenu en GaAsN, l'augmentation du coefficient d'absorption α , due à l'augmentation de la masse effective m_e^* en GaAsN, n'a pas été prise en compte. La possibilité d'améliorer la mobilité électronique avec des conditions de croissance optimales et un traitement thermique doit également être envisagé. Le coefficient d'absorption α dépend de la masse effective des porteurs, selon l'équation:

$$\alpha \propto m_r^*{}^{3/2} \tag{Eq.2}$$

Où $m_r^* = \frac{m_e^* m_h^*}{m_e^* + m_h^*}$ est la masse effective réduite et m_e^* et m_h^* les masses effectives des électrons et des trous, respectivement. Étant donné que m_e^* du GaAsN est sensiblement plus grande que celle du GaAs [31-35], α devrait être plus important dans GaAsN. Ainsi, un L_m un peu plus court pourrait être acceptable pour GaAsN. Par exemple, dans le $\text{GaAs}_{0.097}\text{N}_{0.013}$, m_e^* devrait doubler et α devrait plus que doubler par rapport à ceux de GaAs. Un $L_m \sim 1.5\mu\text{m}$ pourrait être suffisant. De plus, divers procédés ont été proposés pour améliorer la mobilité électronique dans GaAsN.

Turcotte et al. [56] ont présenté dans leur travail " Experimental investigation of the variation of the absorption coefficient with nitrogen content in GaAsN and GaInAsN grown on GaAs " une étude comparative du coefficient d'absorption au seuil de bande fondamental entre les alliages $\text{Ga}_{1-y}\text{In}_y\text{As}_{1-x}\text{N}_x$ et $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$. Ils ont montré que contrairement à ce qui est observé dans les semiconducteurs III-V courants, une augmentation du coefficient d'absorption du Ga(In)AsN est obtenue avec une décroissance de l'énergie de bande interdite. Comme le montre la figure 7, dans le cas du $\text{Ga}_{1-y}\text{In}_y\text{As}_{1-x}\text{N}_x$ le coefficient d'absorption au seuil sature près de $x = 0.009$, par contre le coefficient d'absorption des couches de $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ ne présente aucun signe de saturation pour $0 \leq x \leq 0.016$. De plus, ils ont observé que la valeur du coefficient d'absorption au seuil est plus grand, pour un même pourcentage d'azote, pour les couches de $\text{Ga}_{1-y}\text{In}_y\text{As}_{1-x}\text{N}_x$ que pour les couches de $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ dépourvues d'indium comme le montre la figure 7. Ils ont conclu, d'après la comparaison



entre leurs résultats et les calculs basés sur le formalisme $k.p^8$, qu'une description adéquate des propriétés d'absorption des alliages Ga(In)AsN doit aller au-delà de l'approximation de la masse effective.

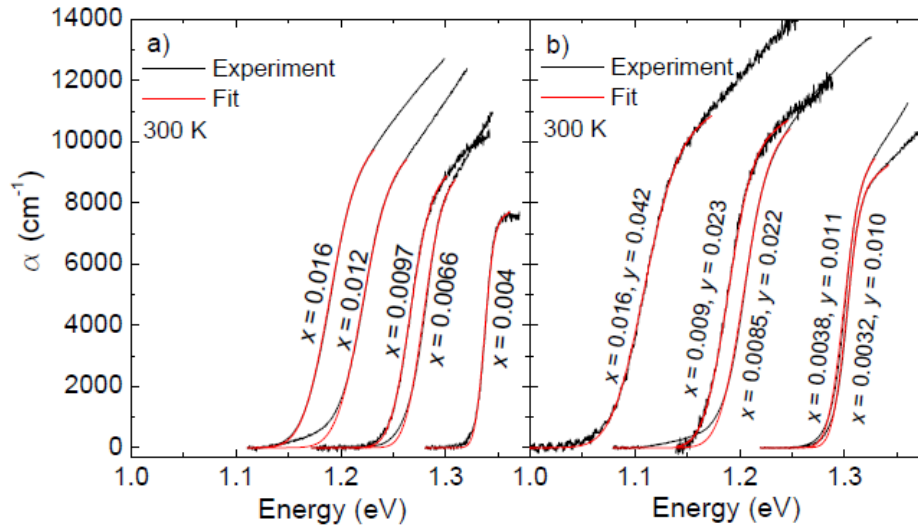


Figure 7: Coefficient d'absorption des couches (a) $GaAs_{1-x}N_x$ et (b) des couches de $Ga_{1-y}In_yAs_{1-x}N_x$ [56].

Dans la figure 8, la valeur inscrite près de chaque point de donnée correspond à la composition en azote dans le matériau. La ligne en pointillé correspond à la valeur de α_{th} (α théorique) pour GaInAs. Les lignes pointillées et continues correspondent à α_{th} (α théorique) pour $GaAs_{1-x}N_x$ et $Ga_{1-y}In_yAs_{1-x}N_x$ calculées dans l'étude de Turcotte et al.

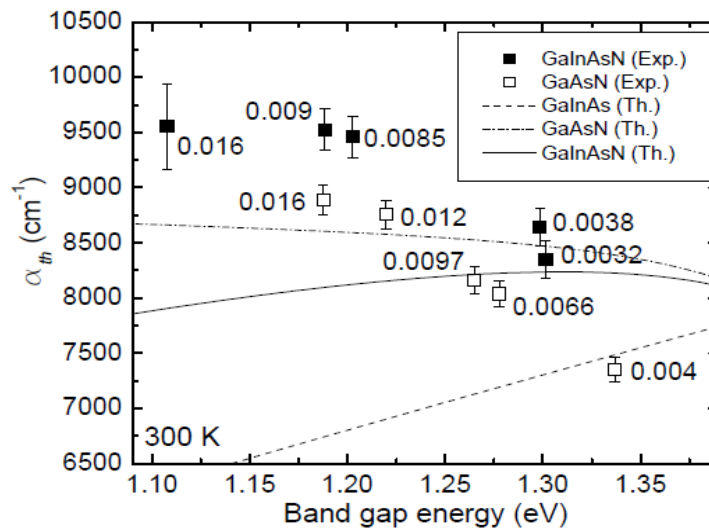


Figure 8: Valeur du coefficient d'absorption α_{th} pour les différents échantillons de $GaAs_{1-x}N_x$ et de $Ga_{1-y}In_yAs_{1-x}N_x$ [56].

⁸ La théorie $k.p$ est basée sur la théorie de perturbation de la mécanique quantique et est une méthode empirique utilisée pour calculer la structure de bande et les propriétés optiques des solides cristallins.



Biswas et al.^[57] ont traité dans leur travail « Spectroscopic ellipsometry studies of reactively sputtered nitrogen-rich GaAsN films » la variation de l'indice de réfraction (n) et du coefficient d'extinction (k), en fonction de la longueur d'onde dans la plage de 300 à 1200 nm, générée par les paramètres de meilleur ajustement du modèle de dispersion pour les films déposés à 40%, 12%, 7% et 4% d'azote. Ces variations sont représentées par la figure 9.

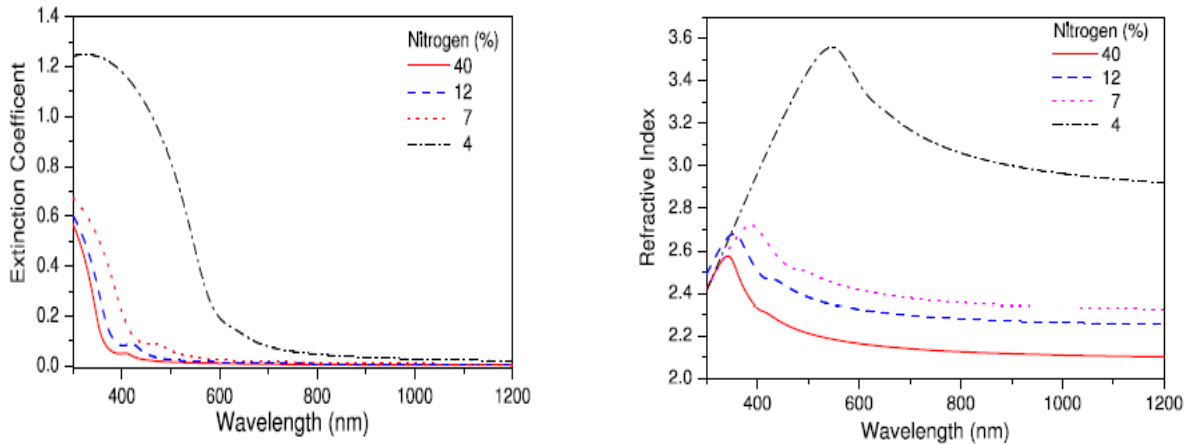


Figure 9: Dispersion de l'indice de réfraction et du coefficient d'extinction avec la longueur d'onde obtenus à partir des paramètres de meilleur ajustement du modèle de dispersion des films de GaAsN avec 40%, 12%, 7% et 4% d'azote dans l'atmosphère de pulvérisation ^[57].

Les valeurs d'indice de réfraction à 1200 nm pour les différents films ont été tracées (Figure 10) en fonction du pourcentage d'azote dans l'atmosphère de pulvérisation cathodique⁹. Ils ont trouvé que le film de GaN déposé avec 100% d'azote a un indice de réfraction proche de l'infrarouge de 2.18, qui diminue lentement jusqu'à environ ~ 2.1, avec une diminution de l'azote jusqu'à environ 40%. Lorsque l'azote diminue à nouveau jusqu'à environ 20% ou moins, l'indice de réfraction commence à augmenter fortement et atteint une valeur élevée de 3.2 pour le film de GaAs déposé avec 100% d'argon (0% d'azote).

⁹ **Pulvérisation cathodique :** Une tension électrique suffisante est appliquée entre les deux électrodes provoquant l'ionisation de l'atmosphère (composée en général d'argon) et la création d'un plasma de décharge lumineuse. Les ions présents sont alors accélérés jusqu'à la cathode (la cible ou source du matériau à déposer). La mise en phase vapeur se fait suivant un processus purement mécanique, par transfert de l'énergie cinétique des ions aux atomes de la cible qui seront éjectés.



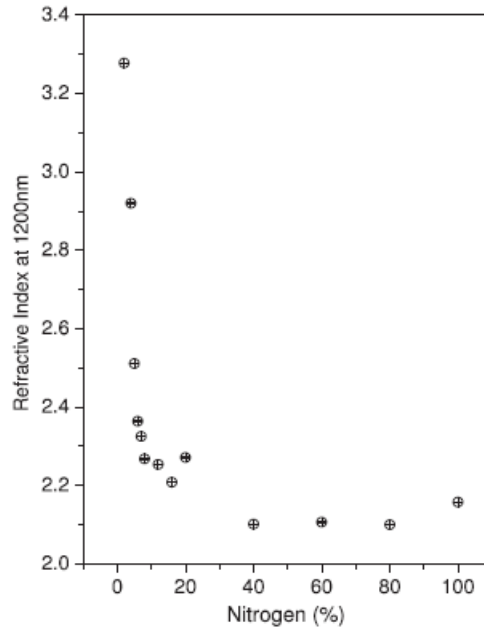


Figure 10: Variation des valeurs d'indice de réfraction à 1200 nm pour des films de GaAsN avec un pourcentage d'azote dans une atmosphère de pulvérisation ^[57].

6. LES DEFAUT DANS LES ALLIAGES GaAsN

L. Gelczuk et al. ^[58] ont étudié dans leur travaux « Identification of nitrogen- and host-related deep-level traps in n-type GaNAs and their evolution upon annealing », les effets du recuit thermique rapide (RTA) sur les propriétés optiques et les défauts de niveaux profonds dans les couches de GaAsN de type n à faible teneur en concentration d'azote (0.2% à 1.2%). Les couches GaAsN sont réalisées sur des substrats de GaAs par épitaxie par jet moléculaire (MBE). La réflectance électromodulée sans contact (CER¹⁰) a été utilisée pour étudier la dépendance du gap d'énergie dans les GaAsN vis-à-vis de l'azote, tandis que la technique de photoluminescence (PL) a été utilisée pour étudier les caractéristiques d'émission liées aux défauts des couches de GaAsN avant et après recuit. En outre, des études systématiques sur la formation de défauts de niveaux profonds électriquement actifs dans les GaAsN présentant différentes teneurs en azote et leur évolution au cours du recuit ont

¹⁰ l'électro-réflectance sans contact (CER) est un type de techniques de spectroscopie de modulation qui traitent de la mesure et de l'interprétation des changements de la réflectance optique d'un échantillon qui sont provoqués par la modulation périodique (à une certaine fréquence) via un champ électrique externe. Contrairement au spectre de réflectance standard caractérisé par de larges caractéristiques, le spectre de réflectance modulé est dominé par des caractéristiques de type dérivé correspondant à des transitions optiques spécifiques dans la zone de Brillouin. Des transitions spécifiques sont identifiées en termes d'énergies et de fonctions d'élargissement. Même à des températures ambiantes, les énergies de transition peuvent être obtenues à quelques meV près et sur une large gamme d'énergies.



été réalisées à l'aide de techniques classiques de spectroscopie de transitoires de niveaux profonds (DLTS¹¹) et de techniques de DLT (Laplace-transform DLTS) à haute résolution.

La figure 11 montre la photoluminescence (PL) et les spectres CER mesurés à la température ambiante pour quatre échantillons de GaAsN contenant différentes concentrations d'azote. D'après cette figure une preuve de l'amélioration de la qualité optique est reconnue dans les spectres PL.

L'augmentation des émissions de NB lors du recuit est clairement observée sur tous les échantillons et cet effet est directement associé à la réduction de la concentration totale de pièges donneurs.

D'autre part, il est également observé que l'intensité de l'émission de (Donner trap (DT) - valance band(VB)), associée aux pièges profonds type donneurs, augmente lors du recuit, mais cela ne signifie pas que la concentration totale des pièges profonds type donneurs augmente dans les échantillons de GaAsN lors du recuit. Il est possible que la concentration de certains pièges, impliqués dans l'émission de DT-VB, augmente lors du recuit et que, par conséquent, l'intensité de l'émission de DT-VB augmente.

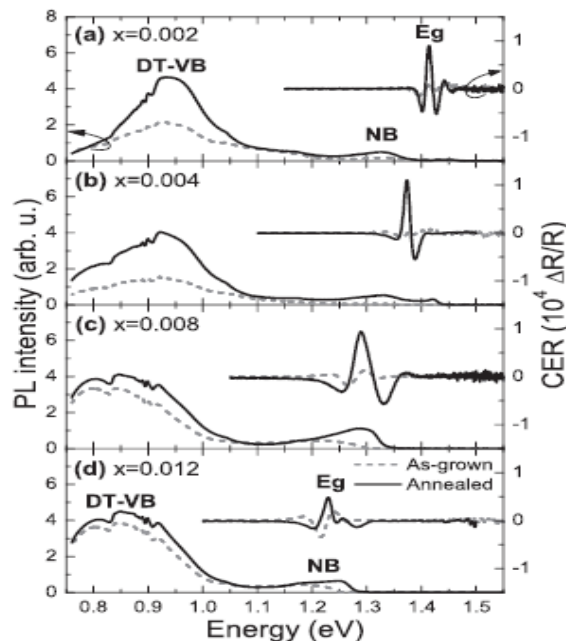


Figure 11: photoluminescence (PL) à basse température (10 K) et Spectre CER à la température ambiante mesuré pour des couches de GaAsN à l'état de croissance (lignes pointillées grises) et recuites (lignes pleines noires) de diverses concentrations en azote [58].

¹¹ (DLTS) est une méthode efficace et puissante utilisée pour observer et caractériser les impuretés en profondeur dans les semiconducteurs. La DLTS est une technique de balayage thermique transitoire de capacité, fonctionnant dans la gamme des hautes fréquences (mégahertz). Elle utilise la capacité d'une jonction p-n ou d'une barrière Schottky comme sonde pour surveiller les changements d'état de charge d'un centre profond. La DLTS est une technique suffisamment sensible, rapide et facile à analyser. Elle est capable de distinguer les pièges à porteurs majoritaires et à porteurs minoritaires. La DLTS peut également fournir les concentrations, l'énergie et les taux de capture des deux types de pièges.



Il est généralement connu que les paramètres des pièges profonds changent de manière significative avec l'incorporation variable d'azote dans les cristaux de GaAsN. Par conséquent, il est plutôt difficile d'identifier clairement les mêmes pièges pour tous les échantillons étudiés. Ils ont conclu que les résultats actuels soient assez similaires aux données précédemment rapportées sur les pièges à électrons dans les GaAsN, Il est difficile d'attribuer correctement les pièges car les énergies d'activation dépendent fortement de la teneur en azote N et peuvent varier en fonction de la qualité de l'échantillon ou le contact et les méthodes de croissance exploitées. Récemment, une solution simple minimisant ces effets dans l'identification des pièges a été proposée par Kudrawiec et al. Cette approche repose sur l'hypothèse que, selon le modèle BAC, toute la réduction de la bande interdite avec l'augmentation de la concentration en N, provient du décalage vers le bas du bord de la bande de conduction, l'énergie du bord de la bande de valence restant constante en même temps. Pour les alliages de GaAsN à faible concentration en azote, en supposant également que l'énergie du même défaut est constante par rapport au bord de la bande de valence. Une telle hypothèse sera valable pour les alliages de GaAsN à faible concentration en azote, pour lesquels la distance moyenne entre les atomes d'azote est beaucoup plus grande que 1–2 constantes de réseau, c'est-à-dire 2–4 environnements des plus proches voisins pour l'imperfection ponctuelle du piège profond. Par conséquent, un changement potentiel d'une position de niveau d'énergie profond du piège par rapport au bord de la bande de valence est beaucoup plus petit que le décalage lié à N de la bande de conduction et par conséquent, il peut être négligé.

Pour les alliages de GaAsN présentant des concentrations d'azote plus élevées (par exemple, $N > 2\%$), la probabilité d'apparition d'atomes d'azote dans l'environnement du plus proche voisin d'imperfection ponctuelle augmente, et l'hypothèse de la constance d'un niveau d'énergie profond par rapport au bord de la bande de valence est plus faible. Dans leur rapport, ils ont utilisé un ensemble d'échantillons à faible concentration en N (1.2%), épitaxie, recuits et mesurés dans des conditions similaires, pour lesquels l'approche décrite ci-dessus peut être appliquée. En traçant un diagramme de bande de GaAsN spécifique, il est possible de corrélérer et de comparer les énergies d'activation des pièges à électrons révélés par DLTS dans tous les échantillons étudiés avec un contenu différent en N.

La figure 12 présente un graphique du diagramme de bande de GaAsN avec les positions du minimum de la bande de conduction (CB) et du maximum de la bande de valence (VB) (obtenues à partir de mesures CER) en fonction de la concentration en azote. En outre, les positions d'énergie des pièges à électrons profonds mesurées par les énergies d'activation par rapport au bord de la bande de conduction (CB) sont dessinées dans cette figure pour les échantillons avant et après recuits, au moyen de diamants ouverts et croisés (Figure 12), respectivement.



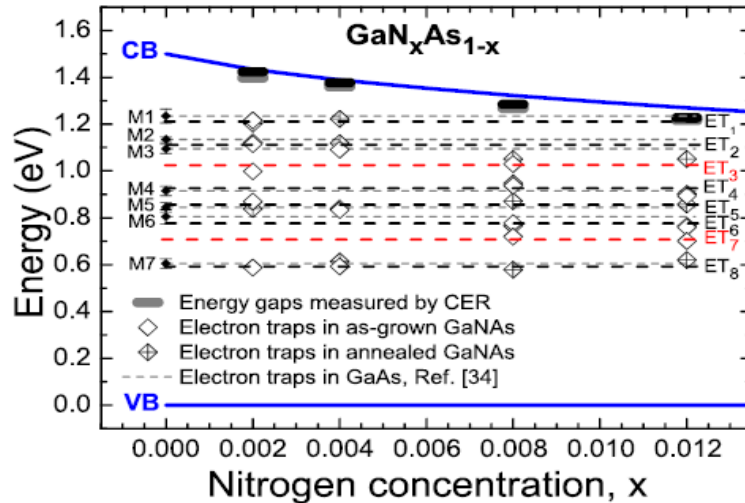


Figure 12: Diagramme des bandes d'énergies de $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ avec les énergies d'activation des pièges à électrons pour les couches avant recuit (diamants ouverts) et après recuit (diamants croisés), obtenues à partir de mesures DLTS. Les lignes pointillées horizontales représentent les pièges à électrons de type GaAs (couleur noire) et apparentés à N (couleur rouge) dans les GaAsN. Les pièges à électrons natifs en GaAs épitaxie par MBE sont représentés par des diamants solides et l'estimation de leur position dans $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ est représentée par des lignes grises en pointillés horizontales ^[58].

Conformément à la déclaration présentée ci-dessus et aux arguments de constance des niveaux d'énergie profonds des pièges à électrons par rapport au bord de la bande de valence, il est évident que les pièges à électrons profonds de même nature microscopique devraient être situés près d'une ligne pointillée horizontale du diagramme de la figure 12. Autrement dit, à mesure que le bord de la bande de conduction diminue avec l'augmentation de la teneur en N, l'énergie d'activation d'un ET individuel devrait également diminuer. Tous les pièges à électrons profonds ayant différentes énergies d'activation révélés dans des couches de GaAsN avant et après recuits (Tableau 3) avec une concentration de 0.2% à 1.2% de N peuvent être attribués à huit ET, marqués sur la figure 12 de ET₁ à ET₈.



N (%)	Dispositif : Avant recuit				Dispositif : Après recuit			
	Désignation de défaut	E_a (eV)	σ_n (cm ²)	N_T (cm ⁻³)	Désignation de défaut	E_a (eV)	σ_n (cm ²)	N_T (cm ⁻³)
0.2	A1	0.182	3.57×10^{-14}	3.2×10^{14}	AA1	0.221	1.03×10^{-15}	6.7×10^{13}
	A2	0.283	4.15×10^{-16}	4.2×10^{15}	AA2	0.302	3.57×10^{-14}	3.2×10^{14}
	A3	0.404	7.52×10^{-16}	2.6×10^{14}	AA3	0.585	4.37×10^{-15}	1.0×10^{14}
	A4	0.528	2.74×10^{-16}	2.5×10^{14}				
	A5	0.807	5.84×10^{-14}	1.3×10^{15}				
0.4	B1	0.269	1.78×10^{-15}	4.9×10^{14}	AB1	0.155	9.52×10^{-16}	3.5×10^{13}
	B2	0.526	3.03×10^{-16}	2.0×10^{14}	AB2	0.259	1.57×10^{-16}	4.7×10^{13}
	B3	0.767	4.86×10^{-15}	6.9×10^{14}	AB3	0.537	4.69×10^{-15}	4.2×10^{14}
					AB4	0.764	5.38×10^{-15}	6.6×10^{13}
0.8	C1	0.238	5.17×10^{-14}	1.2×10^{15}	AC1	0.234	3.21×10^{-14}	4.0×10^{14}
	C2	0.330	4.96×10^{-15}	8.8×10^{15}	AC2	0.321	3.31×10^{-15}	7.1×10^{13}
	C3	0.510	2.86×10^{-13}	2.0×10^{15}	AC3	0.414	1.81×10^{-14}	6.3×10^{13}
	C4	0.547	3.83×10^{-16}	1.3×10^{15}	AC4	0.529	1.90×10^{-15}	1.6×10^{14}
					AC5	0.707	2.48×10^{-14}	6.6×10^{13}
1.2	D1	0.343	8.43×10^{-15}	1.0×10^{15}	AD1	0.177	4.72×10^{-16}	3.4×10^{15}
	D2	0.457	1.77×10^{-14}	2.0×10^{15}	AD2	0.325	2.22×10^{-15}	1.3×10^{15}
	D3	0.515	4.30×10^{-14}	2.3×10^{15}	AD3	0.370	3.12×10^{-15}	8.7×10^{14}
					AD4	0.463	1.32×10^{-16}	6.8×10^{14}
					AD5	0.567	3.55×10^{-16}	4.0×10^{14}

Tableau 3: Energie d'activation (E_a), section efficace de capture apparente (σ_n) et concentration (N_T) des pièges à électrons obtenus à partir d'analyses DLTS standard et Laplace DLTS des couches de GaAs_{1-x}N_x avant et après recuit avec différentes teneurs en azote (0.2% - 1.2%) [58].

Certains pièges peuvent être associés à des défauts natifs de type GaAs (c'est-à-dire de simples défauts ponctuels intrinsèques, à savoir des lacunes¹², des antisites¹³, des interstitiels dans les sous-réseaux Ga et As) ou des défauts liés aux impuretés (par exemple, oxygène, hydrogène, carbone, etc ...), généralement observés dans les alliages à base de GaAs. Tandis que les autres pièges peuvent être directement ou indirectement liés à l'incorporation d'atomes de N dans le réseau hôte de GaAs.

Afin de clarifier la relation entre les pièges à électrons révélés dans les couches de GaAsN et les pièges à électrons précédemment identifiés dans le GaAs de type n développé par MBE, des pièges bien connus de type GaAs ont été représentés sur la figure 12 par des symboles diamants solides (voir N=0%) et les lignes grisées horizontales représentent les positions de ces pièges dans la bande interdite de GaAsN.

Il ressort clairement de la figure 12 que six pièges à électrons (ET₁, ET₂, ET₄, ET₅, ET₆ et ET₈) peuvent être attribués aux pièges à électrons bien connus dans GaAs marqués M1, M3, M4, M5, M6 et M7. D'après le schéma de classification de Lang et al. Cela signifie que ces pièges ne sont pas

¹² Les lacunes correspondent à un vide laissé dans la structure sur un site normalement occupé par un atome

¹³ Défauts d'antisite, c'est-à-dire des atomes qui se trouvent bien à un nœud du réseau, mais qui rompent la régularité chimique.



directement associés à l'existence d'atomes d'azote dans le réseau cristallin. Cependant, l'azote affecte généralement sur la qualité des cristaux et il ne peut pas être exclu, car il peut induire indirectement leur formation dans des alliages de GaAsN. Les deux seuls pièges à électrons E_{T3} et E_{T7} ne correspondent à aucun des pièges à électrons observés dans GaAs et doivent donc impliquer des atomes d'azote dans leur structure microscopique.

Sur la base des résultats obtenus, ils ont conclu que l'origine et la structure microscopique des pièges ET_3 et ET_7 liés à l'azote devraient être différentes. Selon les prévisions théoriques, les complexes de N, tels que les interstitiels d'azote divisés As-N et N-N sur des sites simples As, sont les défauts dominants dans le GaAsN. Les données expérimentales confirment que les couches de GaAsN avant recuit contiennent une concentration significative d'interstitiels d'azote. Il est également connu que de tels complexes N sont responsables de la compensation partielle de la déformation en traction dans les couches de GaAsN développées sur un substrat de GaAs. Alors que la formation de complexes $(AsN)_{As}$ conduit à une contrainte de compression dans la couche de GaAsN, les complexes $(NN)_{As}$ induisent une contrainte de traction inférieure à celle de l'atome de substitution de N_{As} . Par conséquent, la formation de $(AsN)_{As}$ est plus efficace pour minimiser la contrainte dans les GaAsN, mais son énergie de formation est supérieure à celle des défauts $(NN)_{As}$. De plus, la formation de tels complexes de N est considérée comme étant principalement responsable de l'écart significatif observé de la variation du paramètre de réseau dans les GaAsN de la loi de Vegard et de la faible efficacité de luminescence des matériaux Ga(In)AsN épitaxiés. Enfin, ils ont observé que les pièges à électrons profonds associés aux complexes $(AsN)_{As}$ persistent lors des traitements de recuit isochronie (jusqu'à 30 minutes) et isotherme (jusqu'à 750°C), tandis que les pièges associés aux complexes $(NN)_{As}$ sont fortement réduits par le recuit, probablement en raison de leur plus faible énergie de liaison. Par conséquent, ils ont identifié les pièges ET_3 et ET_7 comme étant dus aux complexes $(AsN)_{As}$ et $(NN)_{As}$, respectivement (Figure 14). Ils ont conclu que le piège à électrons stable ET_3 constitué d'atomes d'arsenic et d'azote sur un seul site As, c'est-à-dire $(AsN)_{As}$, est plus important pour les applications de matériaux GaAsN, car il peut affecter fortement les propriétés électriques et optiques même après le recuit des couches de GaAsN. En effet, certains auteurs ont déjà confirmé que ce piège à électrons pouvait constituer un centre de recombinaison non radiative efficace dans les GaAsN. Le niveau ET_7 , piège à électrons apparenté à N, provenant du binaire d'azote (c'est-à-dire deux atomes d'azote sur un seul site As), $(NN)_{As}$, peut être important pour les couches de GaAsN ayant une teneur en N supérieure. Krispin et al. ont montré qu'avec l'augmentation de la teneur en N, la formation de ce défaut était renforcée. Lorsque l'épaisseur de couche critique est approchée, la contrainte excessive peut être réduite par la formation supplémentaire d'un plus grand nombre de complexes de défauts $(NN)_{As}$. Cela conduit simultanément à un fort appauvrissement des porteurs à la surface de croissance de la couche



épitaxiale de GaAsN, qui peut toutefois être fortement réduite par le recuit. Le mécanisme probable de recuit indique que ce défaut peut être soit lié à la diffusion à l'extérieur d'atome d'azote ou à réagir avec As vacant, ce qui peut conduire finalement à la dissociation du défaut $(NN)_{As}$, accompagné de la génération de deux nouveaux N_{As} de substitution.

La figure 13 présente plusieurs configurations possibles pour l'incorporation de N dans le GaAs, y compris les substitutions de N (N_{As}), les défauts intrinsèques: NN interstitiel divisé $(NN)_{As}$ et N_{As} interstitiel divisé $(NAs)_{As}$ [53].

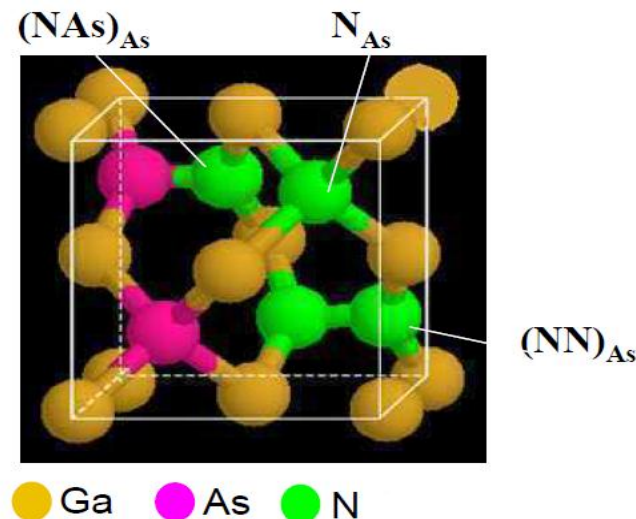


Figure 13: Configurations possibles pour l'incorporation de N dans GaAs [53].

Ils ont conclu, pour tous les échantillons de GaAsN étudiés dans leurs travaux, qu'une partie des pièges donneurs a disparu lors du recuit, mais certains pièges sont également générés en raison du recuit. Cela signifie que les conditions de recuit doivent être soigneusement optimisées afin d'améliorer les propriétés optiques des alliages de GaAsN.

7. TECHNOLOGIE DE FABRICATION DES COMPOSES TERNAIRES GaAsN

Au début, l'incorporation de l'azote dans les matériaux III-V était réalisable uniquement pour de faible concentration d'azote ($x < 0.1$ %). Cependant le développement de nouvelles techniques de croissance telles que: l'épitaxie par jets moléculaires (EJM ou MBE pour Molecular Beam Epitaxy) [59] et ou encore la technique aux organométalliques en phase vapeur (MOVPE pour Metal Organic Vapor Phase Epitaxy) [60] ont permis d'atteindre des concentrations plus élevées.

En 1993 des compositions d'azote tel que x évalué à seulement 1.6 % [61] et 7.6 % [62] dans le $GaAs_{1-x}N_x$ et dans le $GaP_{1-x}N_x$ respectivement ont été réalisables.

Actuellement des compositions records allant jusqu'à 16 % d'azote dans les nitrures dilués de semiconducteurs III-V $_{1-x}N_x$ ont été répertoriées [63]. De plus les nouvelles techniques ont permis de



faire croître des matériaux de plus en plus de haute pureté avec une reproductibilité accrue comme par exemple la technique par faisceaux chimiques (CBE, Chemical Beam Epitaxy) ^[64].

La CBE est une méthode prometteuse pour la croissance de GaAsN. Elle présente moins de contaminations en H, car elle n'utilise pas l'hydrogène comme gaz porteurs ^[65]. Elle évite aussi la contamination en N₂ causés par le plasma en MBE ^[66] puisqu'elle utilise des précurseurs chimiques dans l'ultravide.

Dans le GaAsN, la croissance cristalline se fait généralement sur le GaAs. Les sources de gallium et d'arsenic sont, en majorité, introduites dans les cellules en phase solide ou gazeuse, par la suite, ils sont évaporés par chauffage. Pour l'azote, plusieurs types de processus sont utilisés comme source. Il s'agit du gaz NH₃ ^[61] et du N₂ ^[61] et les organométalliques comme le diméthylhydrazine (TBH_v) et la trifluorure d'azote NF₃ ^[67]. Dans le NH₃ par exemple, l'azote est dissocié par chauffage dans les cellules sources. Dans le cas du N₂, la fragmentation de l'azote nécessite de très hautes températures. Pour ce faire, des cellules plasma sont utilisées. Celles-ci induisent la décharge du N₂ par ionisation et ainsi, un flux radial (RF) d'azote est obtenu. La puissance RF varie entre 200 et 500 W et le contrôle de la croissance se fait par la pression ^[67]. Cette technique permet d'atteindre des concentrations plus élevées d'azote. Quant à la série des organométalliques, la technique utilisée est une croissance en phase vapeur. Une telle méthodologie est basée sur la réaction de flux gazeux organique à la surface d'un substrat à haute température où toutes les sources sont en phase gazeuse.

En fait, ces méthodes de croissance induisent de nombreux processus physico-chimiques influençant les propriétés de GaAsN. Par exemple, la vitesse de croissance, la température et la pression sont à l'origine des défauts tels que: les défauts morphologiques, l'incorporation d'impuretés comme l'hydrogène ou les oxydes lors de la croissance. En ce sens, d'intenses recherches se font pour comprendre les processus de croissance du GaAsN ^[67].

7.1 TECHNIQUE DE CROISSANCE MBE

La figure 14 représente une photographie du réacteur de croissance MBE du laboratoire de Micro Optoélectronique et Nanostructure de l'université de Monastir-Tunisie pour la fabrication des composés binaires nitrurés.



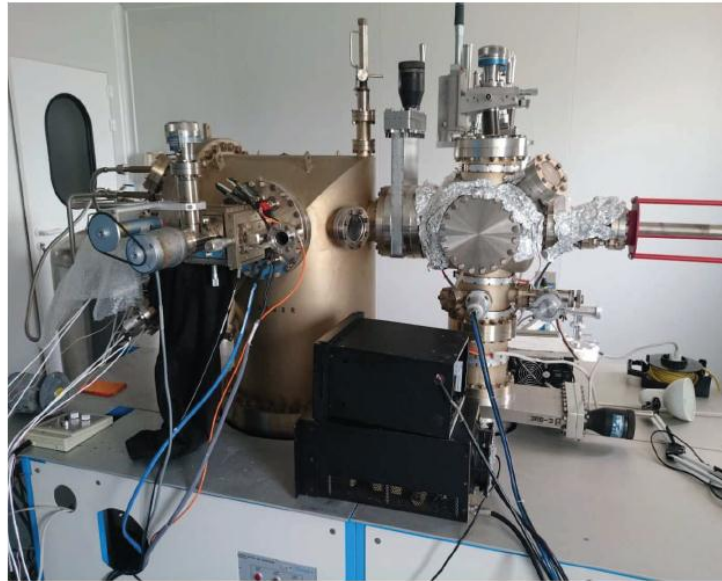


Figure 14 : Photographie du réacteur de croissance MBE ^[68].

Ce réacteur est composé des modules suivants:

- le sas d'introduction;
- la chambre d'introduction;
- la chambre de transfert et d'analyse;
- la chambre d'épitaxie «matériau».

7.2 TECHNIQUE DE CROISSANCE MOVPE

Les bases de la croissance MOVPE (EPVOM) ont été posées par Manasevit ^[69] dès 1968. Cette méthode consiste à transporter les espèces réactives sous forme gazeuse (phase vapeur) vers une chambre de réaction appelée «réacteur» dans laquelle l'épitaxie proprement dite a lieu. Le réacteur de croissance MOVPE (EPVOM) est représenté sur la figure 15.



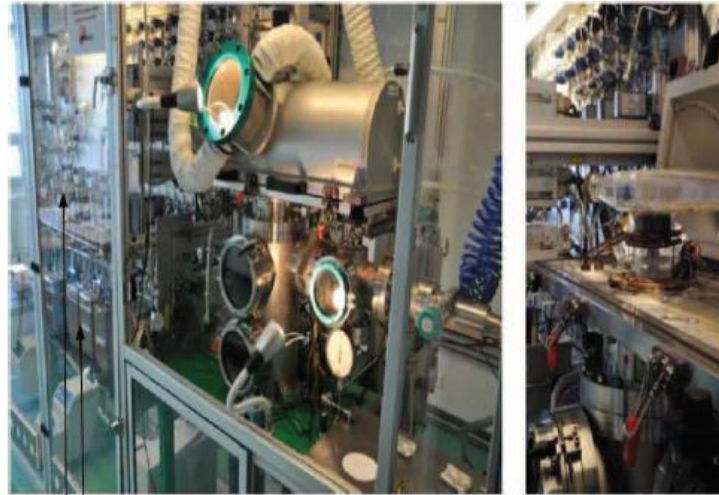


Figure 15: Représentation du réacteur de croissance EPVOM ^[61].

7.3 TECHNIQUE DE CROISSANCE CBE

Le réacteur de croissance CBE du Laboratoire d'épitaxie avancée de l'université de Sherbrooke est présenté dans la figure 16. Les composants du groupe III et du groupe V du tableau périodique proviennent de sources séparées, comme le démontre la figure 16. En effet, en CBE, un faisceau différent est utilisé pour le groupe III et le groupe V.



Figure 16: Représentation du réacteur de croissance CBE ^[65].



8 CONCLUSION

Dans ce chapitre, nous avons donné un état de connaissance sur l'alliage GaAsN. On a présenté les caractéristiques et les propriétés de GaAsN tant sur le plan structurel, qu'électronique et optique. Nous avons pris connaissance de sa particularité par rapport aux matériaux nitrurés classiques de sorte que les propriétés de cet alliage sont fortement perturbées pour une incorporation de seulement quelques pourcents de concentrations d'azote. Ces propriétés singulières font en sorte que ce matériau est destiné à des applications variées telles que des dispositifs optoélectroniques pour les télécommunications et le photovoltaïque. Enfin, nous avons rappelé les différentes technologies établies pour la croissance de GaAsN.



REFERENCES

- [1] **W. G. Bi and C. W. Tu**, "Bowing parameter of the band-gap energy of GaN_xAs_{1-x}", Appl. Phys. Lett. **70**, 1608, (1997).
- [2] **K. Uesugi, N. Morooka and I. Suemune**, "Reexamination of N composition dependence of coherently grown GaNAs band gap energy with high-resolution x-ray diffraction mapping measurements", Appl. Phys. Lett. **74**, 1254, (1999).
- [3] **S. G. Spruytte, M. C. Larson, W. Wampler, C. W. Coldren, H. E. Petersen and J. S. Harris**, "Nitrogen incorporation in group III-nitride-arsenide materials grown by elemental source molecular beam epitaxy", J. Cryst. Growth **227**, 506, (2001).
- [4] **U. Tisch, E. Finkman and J. Salzman**, "The anomalous bandgap bowing in GaAsN", Appl. Phys. Lett. **81**, 463, (2002).
- [5] **M. Kondow, K. Uomi, K. Hosomi, and T. Mozume**, "Gas-Source Molecular Beam Epitaxy of GaN_xAs_{1-x} using a N Radical as the N Source", Jpn. J. Appl. Phys., vol. 33, no. Part 2, No. 8A, pp. L1056–L1058, Aug. 1994.
- [6] **M. Weyers, M. Sato, and H. Ando**, "Red Shift of Photoluminescence and Absorption in Dilute GaAsN Alloy Layers," Jpn. J. Appl. Phys., vol. 31, no. Part 2, No. 7A, pp. L853–L855, (1992).
- [7] **M. Kondow, K. Uomi, A. Niwa, T. Kitatani, S. Watahiki, and Y. Yazawa**, "GalnNAs: A Novel Material for Long-Wavelength-Range Laser Diodes with Excellent High-Temperature Performance," Jpn. J. Appl. Phys., vol. 35, no. Part 1, No. 2B, pp. 1273–1275, (1996).
- [8] **L. Vegard**, Z. Phys. **5**, 17 (1921).
- [9] **I. Vurgaftman, J. R. Meyer and L. R. Ram-Mohan**, "Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys", J. Appl. Phys. **89**, 5815, (2001).
- [10] **K. Louarn**, "Etude et réalisation de jonctions tunnel à base d'hétérostructures à semiconducteurs III-V pour les cellules solaires multi-jonction à très haut rendement", Université Toulouse, (2018).
- [11] **JA Van Vechten, TK Bergstresser**, "Electronic structures of semiconductor alloys", Phys. Rev. B **1**, 3351, (1970).
- [12] **Richards.D and R. Hill**, "The origins of energy gap bowings in substitutional semiconductor alloys", J Phys. C Solid State **5**, 821, (1972).
- [13] **J. Gersten and F. W. Smith**, "The physics and chemistry of materials", (Wiley Interscience, New York, USA), (2001)
- [14] **S. Tixier, S. E. Webster, E. C. Young, T. Tiedje, S. Francoeur, A. Mascarenhas, P. Wei and F. Schiettekatte**, "Band gaps of the dilute quaternary alloys GaN_xAs_{1-x-y}Bi_y and Ga_{1-y}In_yN_xAs_{1-x}", Appl. Phys. Lett. **86**, 112113, (2005).
- [15] **M. Fischer, D. Gollub and A. Forchel**, "1.3 μm GalnAsN laserdiodes with improved high temperature performance", Jpn. J. Appl. Phys. **1 41**, 1162, (2002).
- [16] **D. Gollub, S. Moses, A. Fischer, M. Kamp and A. Forchel**, "GalnNAs-based distributed feedback laser diodes emitting at 1.5 μm", Electron. Lett. **40**, 427, (2004).
- [17] **J. F. Geisz and D. J. Friedman**, "III–N–V semiconductors for solar photovoltaic applications", Semicond. Sci. Technol. **17**, 769, (2002).
- [18] **H. Riechert, A. Ramakrishnan and G. Steinle**, "Development of InGaAsN-based 1.3 μm VCSELs", Semicond Sci Tech **17**, 892, (2002).
- [19] **P. M. Asbeck, R. J. Welty, C. W. Tu, H. P. Xin and R. E. Welser**, "Heterojunction bipolar transistors implemented with GalnNAs materials", Semicond. Sci. Technol. **17**, 898, (2002).
- [20] **H. P. Hjalmarson, P. Vogl, D. J. Wolford and J. D. Dow**, "Theory of substitutional deep traps in covalent semiconductors", Phys. Rev. Lett. **44**, 810, (1980).



- [21] P. R. C. Kent and A. Zunger, "Theory of electronic structure evolution in GaAsN and GaPN alloys", *Phys. Rev. B* **64**, 115208, (2001).
- [22] A. Lindsay and E. P. O'Reilly, "Unification of the band anticrossing and cluster-state models of dilute nitride semiconductor alloys", *Phys. Rev. Lett.* **93**, 196402, (2004).
- [23] W. Shan, W. Walukiewicz, K. M. Yu, J. W. Ager, E. E. Haller, J. F. Geisz, D. J. Friedman, J. M. Olson, S. R. Kurtz and C. Nauka, "Effect of nitrogen on the electronic band structure of group III-NV alloys", *Phys. Rev. B* **62**, 4211, (2000).
- [24] W. Shan, K. M. Yu, W. Walukiewicz, J. Wu, J. W. Ager and E. E. Haller, "Band anticrossing in dilute nitrides", *J. Phys- Condense Mat.* **16**, S3355, (2004).
- [25] P. R. C. Kent, L. Bellaiche and A. Zunger, "Pseudopotential theory of dilute III-V nitrides", *Semicond Sci Tech* **17**, 851, (2002).
- [26] A. Lindsay and E. P. O'Reilly, "Influence of nitrogen resonant states on the electronic structure of $\text{Ga}_x\text{As}_{1-x}$ ", *Solid State Commun.* **118**, 313, (2001).
- [27] A. Lindsay and E. P. O'Reilly, "Theory of enhanced bandgap non-parabolicity in $\text{Ga}_x\text{As}_{1-x}$ and related alloys", *Solid State Commun.* **112**, 443, (1999).
- [28] W. Shan, W. Walukiewicz, J. W. Ager, E. E. Haller, J. F. Geisz, D. J. Friedman, J. M. Olson and S. R. Kurtz, "Band anticrossing in GaInNAs alloys", *Phys. Rev. Lett.* **82**, 1221, (1999).
- [29] I. Vurgaftman and J. R. Meyer, "Band parameters for nitrogen-containing semiconductors", *J. Appl. Phys.* **94**, 3675, (2003).
- [30] J. D. Perkins, A. Mascarenhas, Y. Zhang, J. F. Geisz, D. J. Friedman, J. M. Olson and S. R. Kurtz, "Nitrogen-Activated Transitions, Level Repulsion, and Band Gap Reduction in $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ with $x < 0.3$ ", *Phys. Rev. Lett.* **82**, 3312, (1999).
- [31] S. Kurtz, S. Johnston and H. M. Branz, "Capacitance-spectroscopy identification of a key defect in N-degraded GaInNAs solar cells", *Appl. Phys. Lett.* **86**, 113506, (2005).
- [32] F. Masia, G. Pettinari, A. Polimeni, M. Felici, A. Miriametro, M. Capizzi, A. Lindsay, S. B. Healy, E. P. O'Reilly, A. Cristofoli, G. Bais, M. Piccin, S. Rubini, F. Martelli, A. Franciosi, P. J. Klar, K. Volz and W. Stolz, "Interaction between conduction band edge and nitrogen states probed by carrier effective-mass measurements in $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ ", *Phys. Rev. B* **73**, 073201, (2006).
- [33] G. Pettinari, F. Masia, A. Polimeni, M. Felici, A. Frova, M. Capizzi, A. Lindsay, E. P. O'Reilly, P. J. Klar, W. Stolz, G. Bais, M. Piccin, S. Rubini, F. Martelli and A. Franciosi, "Influence of nitrogen-cluster states on the gyromagnetic factor of electrons in $\text{Ga}_x\text{As}_{1-x}$ ", *Phys. Rev. B* **74**, 245202, (2006).
- [34] P. R. C. Kent and A. Zunger, "Nitrogen pairs, triplets, and clusters in GaAs and GaP", *Appl. Phys. Lett.* **79**, 2339, (2001).
- [35] E. P. O'Reilly, A. Lindsay and S. Fahy, "Theory of the electronic structure of dilute nitride alloys: beyond the band-anti-crossing model", *J. Phys-Condense Mat.* **16**, S3257, (2004).
- [36] J. Ibanez, R. Cusco, E. Alarcon-Llado, L. Artus, A. Patane, D. Fowler, L. Eaves, K. Uesugi and I. Suemune, "Electron effective mass and mobility in heavily doped -GaAsN probed by Raman scattering", *J. Appl. Phys.* **103**, 103528, (2008).
- [37] D. L. Young, J. F. Geisz and T. J. Coutts, "Nitrogen-induced decrease of the electron effective mass in thin films measured by thermomagnetic transport phenomena", *Appl. Phys. Lett.* **82**, 1236, (2003).
- [38] A. Lindsay and E. P. O'Reilly, "A tight-binding-based analysis of the band anti-crossing model in $\text{Ga}_x\text{As}_{1-x}$ ", *Physica E* **21**, 901, (2004).
- [39] L. Young, J. F. Geisz and T. J. Coutts, "Nitrogen-induced decrease of the electron effective mass in thin films measured by thermomagnetic transport phenomena", *Appl. Phys. Lett.* **82**, 1236, (2003).



- [40] S. Fahy, A. Lindsay, H. Ouerdane and E. P. O'Reilly, "Alloy scattering of n-type carriers in GaAs_{1-x}N_x" Phys. Rev. B **74**, 035203, (2006).
- [41] F. Ishikawa, G. Mussler, K.-J. Friedland, H. Kostial, K. Hagenstein, L. Daweritz and K.H. Ploog, "Impact of N-induced potential fluctuations on the electron transport in Ga (As, N)", Appl. Phys. Lett. **87**, 262112, (2005).
- [42] M. P. Vaughan and B. K. Ridley, "Solution of the Boltzmann equation for calculating the Hall mobility in bulk", Phys. Rev. B **72**, 075211, (2005).
- [43] M. Reason, Y. Jin, H. A. McKay, N. Mangan, D. Mao, R. S. Goldman, X. Bai and C. Kurdak, "Influence of N on the electronic properties of GaAsN alloy films and heterostructures", J. Appl. Phys. **102**, 103710, (2007).
- [44] A. Hashimoto, T. Yamaguchi, T. Suzuki and A. Yamamoto, "Hall electron mobility versus N spatial distribution in III-V-N systems" J. Cryst. Growth **278**, 532, (2005).
- [45] C. Skierbiszewski, P. Perlin, P. Wisniewski, T. Suski, W. Walukiewicz, W. Shan, J. W. Ager, E. E. Haller, J. F. Geisz, D. J. Friedman, J. M. Olson and S. R. Kurtz, "Effect of Nitrogen-Induced Modification of the Conduction Band Structure on Electron Transport in GaAsN Alloys", Phys. Status Solidi B **216**, 135, (1999).
- [46] S. Tomic, E. P. O'Reilly, P. J. Klar, H. Gruning, W. Heimbrot, W. M. Chen and I. A. Buyanova, "Influence of conduction-band nonparabolicity on electron confinement and effective mass in GaAs_{1-x}N_x/GaAs quantum wells", Phys. Rev. B **69**, 245305, (2004).
- [47] Masafumi Yamaguchi, Boussairi Bouzazi, Hidetoshi Suzuki, Kazuma Ikeda, Nobuaki Kojima, and Yoshio Ohshita, "III-V-N materials for super high-efficiency multijunction solar cells", AIP Conference Proceedings **1477**, 24, (2012). doi: 10.1063/1.4753825.
- [48] M. Weyers, M. Sato and H. Ando, "Red shift of photoluminescence and absorption in dilute GaAsN alloy layers", Jpn. J. Appl. Phys. **2** 31, L853, (1992).
- [49] M. Kondow, K. Uomi, K. Hosomi and T. Mozume, "Gas-source molecular beam epitaxy of GaN_xAs_{1-x} using a N radical as the N source", Jpn. J. Appl. Phys. **2** 33, L1056, (1994).
- [50] I. A. Buyanova, W. M. Chen and B. Monemar, "Electronic Properties of Ga(In)NAs Alloys", MRS Internet J. Nitride Semicond. Res. **6**, 2, (2001).
- [51] A. M. Mintairov, T. H. Kosel, J. L. Merz, P. A. Blagnov, A. S. Vlasov, V. M. Ustinov and R. E. Cook, "Near-field magnetophotoluminescence spectroscopy of composition fluctuations in InGaAsN", Phys. Rev. Lett. **87**, 277401, (2001).
- [52] A. M. Mintairov, P. A. Blagnov, J. L. Merz, V. M. Ustinov, A. S. Vlasov, A. R. Kovsh, J. S. Wang, L. Wei and J. Y. Chi, "Near-field magneto-photoluminescence of quantum-dot-like composition fluctuations in GaAsN and InGaAsN alloys", Physica E **21**, 385, (2004).
- [53] Jin, Yu, these de doctorat, "Influence of N Incorporation on the Electronic Properties of Dilute Nitride (IN)GaAsN Alloys", University of Michigan, (2010).
- [54] S. R. Kurtz, A. A. Allerman, E. D. Jones, J. M. Gee, J. J. Banas and B. E. Hammons, "InGaAsN solar cells with 1.0 eV band gap, lattice matched to GaAs", Appl. Phys. Lett. **74**, 729, (1999).
- [55] D. J. Friedman, J. F. Geisz, S. R. Kurtz and J. M. Olson, "1-eV solar cells with GaInNAs active layer", J. Cryst. Growth **195**, 409, (1998).
- [56] S. Turcotte, J.-N. Beaudry, R. A. Masut, P. Desjardins, G. Bentoumi, and R. Leonelli, "Experimental investigation of the variation of the absorption coefficient with nitrogen content in GaAsN and GaInAsN grown on GaAs (001)", Journal of Applied Physics **104**, 083511, (2008). doi: 10.1063/1.3000451.
- [57] A. Biswas, B.S. Yadav, D. Bhattacharyya, N.K. Sahoo, S.S. Major, R.S. Srinivasa, "Spectroscopic ellipsometry studies of reactively sputtered nitrogen-rich GaAsN films", Journal of Non-Crystalline Solids **357**, 3293-3300, (2011).



- [58] **L. Gelczuk, R. Kudrawiec, and M. Henini**, "Identification of nitrogen-and host-related deep-level traps in n-type GaNAs and their evolution upon annealing", *Journal of Applied Physics* 116, 013705 (2014).
- [59] **M. A. Herman, H. Sitter**, "MBE growth physics: application to device technology", *Microelectronics Journal*. 27, 257, (1996).
- [60] **M. Behet, R. Hoevel, A. Kohl, A. Mesquida-Kuesters, B. Optiz, and K. Heime**, "MOVPE growth of III-V compounds for optoelectronic and electronic applications", *Microelectronics Journal* 27 297, (1996).
- [61] **M. Weyers, M. Sato**, "Growth of GaAsN alloys by low-pressure metalorganic chemical vapor deposition using plasma-cracked NH_3 ", *Applied Physics Letters*, 62, 1396-1398, (1993).
- [62] **X. Liu, S. G. Bishop, J. N. Baillargeon, and K. Y. Cheng**, "Band gap bowing in $\text{GaP}_{1-x}\text{N}_x$ alloys", *Applied Physics Letters* 63, 208, (1993).
- [63] **M. Yamaguchi, T. Warabisako, H. Sugiura**, "Chemical beam epitaxy as a breakthrough technology for photovoltaic solar energy applications", *Journal of Crystal Growth* 136, 29, (1994).
- [64] **J. S. Foord, G. J. Davies, W. T. Tsang**, "Chemical Beam Epitaxy and Related Techniques", 1st ed., Wiley, Chichester, England, (1997).
- [65] **G. Kolhatkar**, Thèse de doctorat, "Épitaxie par faisceaux chimiques d'alliages nitrures dilués à base d'aluminium pour des applications photovoltaïques", Université de Sherbrooke (Québec), Canada (2014).
- [66] **S. Procz, M. Fiederle, M. Kunzer, K. Köhler, J. Wagner**, "Band anticrossing in diluted $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$ ", *Journal of Applied Physics*. 103, 073103-1, (2008).
- [67] **H. Helal**, Mémoire de master, "optimisation des grandeurs photovoltaïques des cellules solaires à base du composé GaAsN", Université djillali liabes de Sidi bel abbes, Algérie (2016).
- [68] **M. Yamaguchi, K. Nishimura, T. Sasaki, H. Suzuki, K. Arafune, N. Kojima, et al.**, "Novel materials for high-efficiency III-V multi-junction solar cells", *Solar Energy* 82, 173, (2008).
- [69] **Vanessa GORGE**, thèse de doctorat, "Caractérisations de matériaux et tests de composants des cellules solaires à base des nitrures des éléments III-V". université Paris sud, France (2012).



CHAPITRE 3:

SIMULATION DE LA CELLULE SOLAIRE DE TYPE SCHOTTKY A BASE DE GaAsN

SOMMAIRE

1. INTRODUCTION	69
2. LE SIMULATEUR SCAPS – 1D	69
3. DESCRIPTION DE LA CELLULE SOLAIRE SIMULEE	74
4. RESULTATS ET DISCUSSIONS	76
4.1 EFFET DU TRAVAIL DE SORTIE DU METAL DU CONTACT SCHOTTKY	77
4.2 EFFET DU DOPAGE DE LA COUCHE ACTIVE GaAsN	78
4.3 EFFET DE L'ÉPAISSEUR DE LA COUCHE ACTIVE	80
5. CONCLUSION	85



1. INTRODUCTION

Les semiconducteurs à base de nitrure dilué, tels que les alliages $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$, ont fait l'objet d'une attention considérable en raison de leurs propriétés physiques uniques et du large éventail de leurs applications possibles en optoélectronique.

Dans une cellule solaire à jonction Schottky (SJSC), le semiconducteur est un sandwich entre deux métaux, l'un forme un contact Schottky et l'autre un contact ohmique. Dans le cas d'un contact Schottky avec un semiconducteur de type n, le travail de sortie du métal devrait être supérieure à celui du semiconducteur et, dans le cas du contact ohmique, le travail de sortie du métal devrait être inférieure ^[1]. Bien que de nombreux travaux aient été effectués sur les caractéristiques d'obscurité des diodes Schottky à base de GaAsN, les propriétés électriques du matériau ne sont pas suffisamment étudiées ^[2-8]. Cependant, seules quelques études ont été réalisées sur le type de cellule solaire Schottky à base de GaAsN ^[9]. C'est la raison pour laquelle nous proposons, dans ce chapitre et pour la première fois, d'étudier en détail les potentialités de la technologie de GaAsN Schottky comme alternative viable à la cellule solaire à jonction P-N et à la cellule solaire à jonctions multiples.

Dans ce chapitre, une simulation numérique complète sous un spectre d'illumination solaire d'AM1.5 G, utilisant le logiciel de simulation SCAPS, est utilisée pour déterminer les paramètres géométriques et physiques optimaux permettant d'obtenir le meilleur rendement énergétique d'une cellule solaire Schottky à base de $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$. Cette tâche d'optimisation est en fonction de la concentration en azote, du travail de sortie du métal, de la concentration du dopage et de l'épaisseur de la couche de $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$.

2. LE SIMULATEUR SCAPS – 1D

SCAPS est un simulateur unidimensionnel de dispositifs à cellules solaires, développé par ELIS, Université de Gent, qui est disponible gratuitement pour la communauté de la recherche sur le photovoltaïque ^[10-12].

SCAPS est originellement développé pour les structures de cellules de famille CuInSe_2 et CdTe . Un aperçu de ses principales caractéristiques est donné ci-dessous :

- La structure peut comporter jusqu'à 7 couches semiconductrices.
- Presque tous les paramètres peuvent être introduits avec des variations graduées (en dépendance de la composition et la profondeur de la cellule, ex: χ , ε , N_c , N_v , v_{thn} , μ_n , μ_p , N_a , N_d , tous les pièges (défauts N_i).
- Mécanismes de recombinaison : bande-à-bande (directe), Auger, SRH.
- Les niveaux des défauts : en volume ou à l'interface, en considérant leurs états de charge et la recombinaison à leurs niveaux.



- Les niveaux des défauts, type de charge : pas de charge (neutre), monovalent (un seul donneur, accepteur), divalent (double donneur, double accepteur, amphotère), multivalent (défini par l'utilisateur).
- Les niveaux des défauts, distribution énergétique : niveau discret, uniforme, Gauss, sous forme de queue ou bien une combinaison.
- Les niveaux des défauts, propriété optique : Excitation directe par la lumière est possible (connue par effet de l'impureté photovoltaïque, IPV).
- Les niveaux des défauts, transitions métastables entre les niveaux.
- Contacts : Travail de sortie du métal ou régime de bande plate ; Propriété optique (réflexion ou transmission).
- Effet Tunnel, inter-bandes (dans la bande de conduction ou dans la bande de valence), Génération : à partir d'un calcul interne ou bien d'un fichier g(x) fourni par l'utilisateur.
- Illumination : plusieurs types de spectres sont disponibles (AM0, AM1.5D, AM1.5G, AM1.5G édition 2, Monochromatique, etc...).
- Illumination: du côté P ou N.

Le logiciel SCAPS est capable de résoudre les équations de base de la physique des semiconducteurs, l'équation de Poisson, les équations de continuité pour les électrons et les trous (Eqs. 1-5):

$$\frac{d^2V}{dx^2} = - \frac{q}{\epsilon_0 \epsilon_r} \left(p - n - N_A^- + N_D^+ \frac{\rho_t}{q} \right) \quad \text{Eq.1}$$

$$\frac{1}{q} \frac{dJ_n}{dx} = G - R \quad \text{Eq.2}$$

$$-\frac{1}{q} \frac{dJ_p}{dx} = G - R \quad \text{Eq.3}$$

$$J_n = D_n \frac{dn}{dx} + \mu_n n \frac{dV}{dx} \quad \text{Eq.4}$$

$$J_p = -D_p \frac{dp}{dx} + \mu_p p \frac{dV}{dx} \quad \text{Eq.5}$$

Où μ_n, μ_p et D_n, D_p sont les mobilités et les constantes de diffusion des électrons et des trous respectivement. ϵ la constante diélectrique, V le potentiel électrostatique, n et p les concentrations des porteurs libres, N_A^- et N_D^+ les densités des donneurs et d'accepteurs ionisés respectivement.



J_n et J_p les densités de courants des électrons et des trous respectivement, R le taux de recombinaison et G le taux de génération de paires électron-trou.

Le terme de recombinaison dans les équations (2 et 3) a une dépendance non-linéaire sur les concentrations des porteurs n et p . Aussi le second terme (drift) dans les équations de courant (4 et 5) est non-linéaire, car il contient un produit de deux fonctions inconnues n (ou p) et V . Finalement les équations semiconductrices sont non linéaire, pour cela un ensemble de $3N$ équations non linéaires, équations (1-5) sont résolues numériquement dans SCAPS en utilisant l'approche suivante : Discrétisation du dispositif. Ainsi, dans une dimension, la longueur totale de la cellule L est divisée en N intervalles et les valeurs du potentiel V_i et les concentrations des électrons et des trous n_i et p_i de chaque intervalle constituent les $3N$ inconnues du problème.

- Discrétisation des équations (1-5) : les équations de base de chaque intervalle i conduit à $3N$ équations non-linéaires (discrétisation par la méthode des différences finies).
- Application sur les conditions de limites (contacts et interfaces).
- Résolution par itération en utilisant le schéma de Scharfetter-Gummel ^[10-12].

La modélisation numérique des cellules solaires est basée sur la résolution de cinq équations essentielles qui gouvernent le comportement des cellules solaires en terme générale, cinq équations différentielles qui sont : deux équations de courants des porteurs minoritaires, deux équations de continuité pour les minoritaires et l'équation de poisson, le couplage de ces équations n'ont une solution analytique si et seulement si :

- Les conditions de l'état stationnaire sont satisfaites.
- Le champ électrique est différent de zero seulement dans la zone de charge d'espace.
- Il y a une faible injection : c'est-à-dire la concentration des porteurs minoritaires est plus petite par rapport à celle des majoritaires.

Les concentrations des dopages sont constantes dans les deux régions N et P.

La plupart des simulations peuvent prédire les caractéristiques électriques qui sont associés aux structures et les conditions spécifiques des composants. Dans la simulation, la structure des composants est représentée en une dimension, deux dimensions ou bien trois dimensions.

La différence entre les modèles utilisés dans la modélisation des composants, réside dans le degré de la fonctionnalité du modèle, par exemple un tel modèle simple doit résoudre au moins l'équation de poisson pour trouver le champ électrique et le potentiel à l'équilibre thermodynamique, et pour un modèle plus précis il faut que ce dernier contienne toutes les équations motionnées précédemment.

Le principe de fonctionnement de notre simulateur est basé sur les modèles suivants : Le modèle du courant utilisé est le modèle thermoïnique pour les deux types de porteurs.



$$J_{c.maj_e} = qv_{th}N_c \exp\left(-\frac{q\Phi_B}{kT}\right) \left(\exp\left(\frac{qV_c}{kT}\right) - 1\right) \quad \text{Eq.6}$$

$$J_{c.maj_h} = qv_{th}N_v \exp\left(-\frac{q\Phi_B}{kT}\right) \left(\exp\left(\frac{qV_c}{kT}\right) - 1\right) \quad \text{Eq.7}$$

La hauteur de barrière Φ_B est calculée en fonction du travail de sortie Φ_m du métal, l'affinité électronique χ et l'énergie de la bande interdite E_g :

Pour un semiconducteur de type n la hauteur de barrière des électrons s'écrit donc :

$$\Phi_B = \Phi_m - \chi \quad \text{Eq.8}$$

Pour un semiconducteur de type p la hauteur de barrière des trous s'écrit sous la forme :

$$\Phi_B = \chi + E_g - \Phi_m \quad \text{Eq.9}$$

Pour les porteurs minoritaires, le modèle utilisé est la description classique de la recombinaison en surface des porteurs minoritaires. Le courant de porteurs minoritaires est donné par :

$$J_{c.min} = qS_c(c - c_0) \quad \text{Eq.10}$$

Où c dénote la concentration des électrons ou des trous, et c_0 dénote la concentration à l'équilibre thermodynamique

Les densités d'états dans la bande de conduction N_c dans la bande de valence N_v , dépend de la température telle que :

$$N_c(T) = N_{c0} \left(\frac{T}{T_0}\right)^{1.5} \quad \text{Eq.11}$$

$$N_v(T) = N_{v0} \left(\frac{T}{T_0}\right)^{1.5} \quad \text{Eq.12}$$

Où T_0 est la température de référence égale à 300K. N_{c0} et N_{v0} les valeurs spécifiques à température ambiante.

La vitesse thermique $v_{th}(T)$ dépend de la température comme suite :

$$v_{th}(T) = v_{th0} \left(\frac{T}{T_0}\right)^{0.5} \quad \text{Eq.13}$$

Le coefficient d'absorption optique $\alpha(\lambda)$ d'une couche avec l'énergie de gap E_g est donné par :

$$\alpha(\lambda) = \left(A + \frac{B}{hv}\right) \sqrt{hv - E_g} \quad \text{Eq.14}$$

Où hv est l'énergie du photon, et A et B des constantes.



Le programme comprend plusieurs panneaux (ou fenêtres). Le panneau principal est « le panneau d'action ». Il autorise de poser le problème, permet de choisir les calculs exigés, d'exécute les calculs, de naviguer aux autres panneaux, de sauver et mettre en graphe les résultats et de quitter le programme [13].

La fenêtre principale du logiciel SCAPS 3201 est présentée sur la figure 1 ci-dessous.

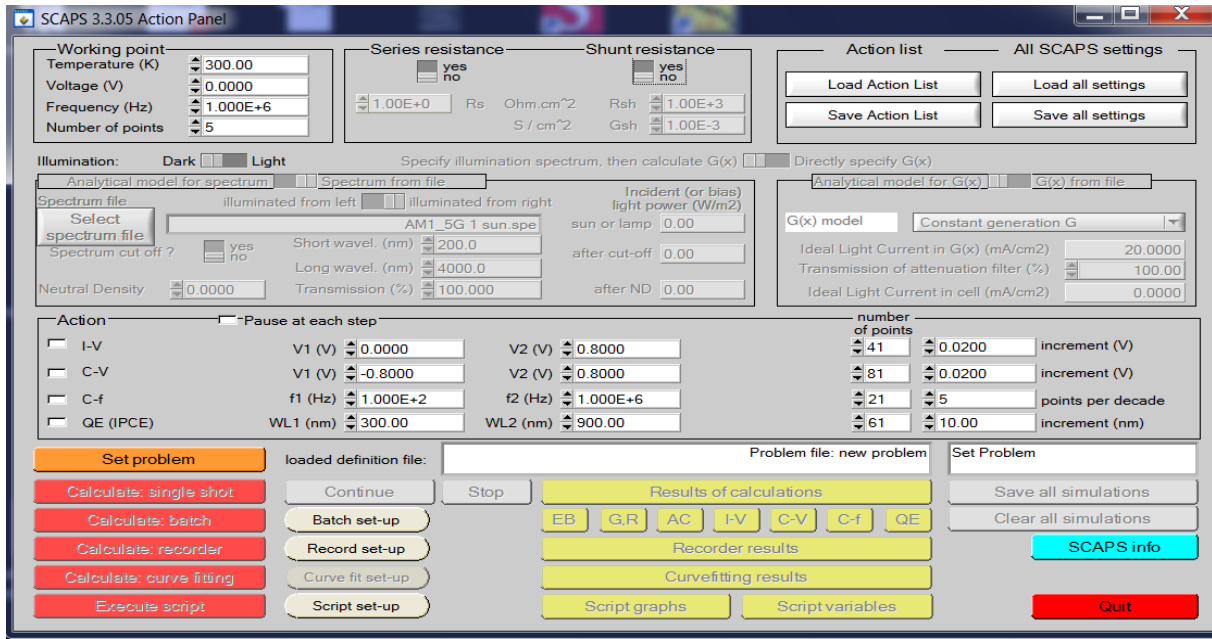


Figure 1: Fenêtre principale du logiciel SCAPS.

Cette fenêtre est appelée "action panel" ce qui permet de poser le problème, d'introduire les paramètres de structure, d'exécuter le programme tout en ayant accès aux résultats par des panneaux : << Densité de courant-Tension I-V (Current density-voltage), Capacité-tension CV (capacitance-voltage), Capacité-fréquence Cf (capacitance-frequency) et Rendement quantique QE (Quantum-Efficiency) >>.

La figure 2 représente le panneau de définition de la cellule solaire et le panneau définissant les propriétés de chaque couche. Dans cette fenêtre, les propriétés physiques ainsi qu'électriques sont définies individuellement pour chaque couche dans l'empilement de l'échantillon. On utilise ici la configuration par défaut pour le "numerical setting".



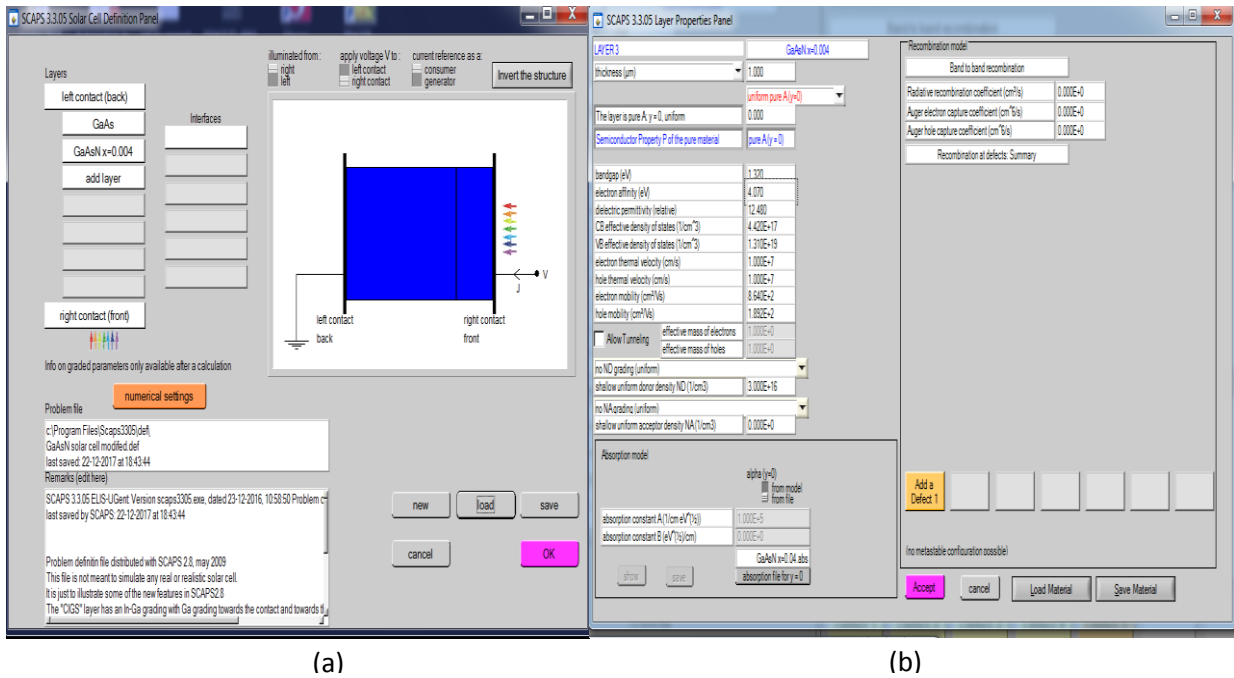


Figure 2: Présentation d'une structure sous SCAPS.

(a) Panneau de définition de la cellule solaire – (b) panneau définissant les propriétés de chaque couche

3. DESCRIPTION DE LA CELLULE SOLAIRE SIMULEE

Dans ce travail, toutes les simulations ont été effectuées sous un spectre d'illumination AM1.5 G et une température de 300K. La structure étudiée est illustrée à la figure 3.

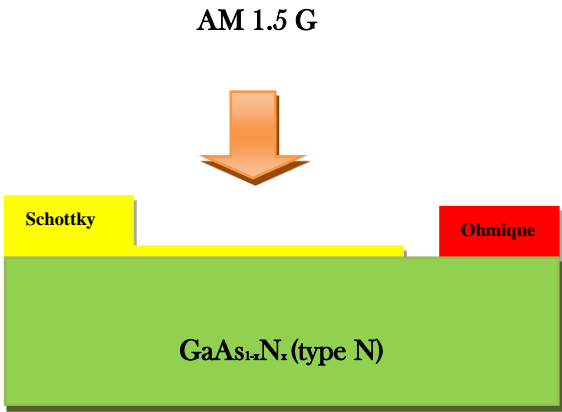


Figure 3: Structure d'une cellule solaire à jonction Schottky à base de GaAs_{1-x}N_x.

Le matériau utilisé dans notre simulation est le GaAs_{1-x}N_x pour deux valeurs de concentration en azote $x = 0.004$ et $x = 0.012$. Le choix de ces concentrations en azote est justifié par le fait qu'actuellement la croissance des couches de GaAs_{1-x}N_x à faible concentration en azote est contrôlée et bien maîtrisée [13-15] et des diodes Schottky n-GaAsN ont été déjà réalisées avec ces deux



concentrations d'azote ^[6]. Pratiquement, il est très difficile d'atteindre x supérieur à 4% sans dégradation significative de la qualité du matériau ^[16]. En plus, les paramètres optiques de ce matériau pour x = 0.004 et x = 0.012 tel que le coefficient d'absorption est disponible dans les travaux de S. Turcotte et al ^[17].

L'ensemble des paramètres peuvent être déterminés à partir de travaux expérimentaux ou de calculs ab initio. Bien entendu, leurs valeurs sont cruciales pour que la simulation numérique ait un sens, donne un bon aperçu de la physique et ouvre la voie à la réalisation de véritables dispositifs.

Nous allons donc montrer comment chaque paramètre de GaAsN a été fixé pour les deux valeurs de la composition en azote x:

- Les valeurs du gap énergétique ont été extraites de la courbe des travaux de Vurgaftman et J. R. Meyer ^[18].
- Les valeurs des mobilités des électrons et des trous ont été extraites de la courbe des travaux de S. Fahy et al ^[19] et des travaux de M. Yamaguchi et al ^[20] respectivement.
- La masse effective des électrons a été extraite de la courbe des travaux de F. Masia et al ^[21].
- La densité d'états effective de la bande de conduction de GaAsN est donnée par l'équation ^[22]:

$$N_c(\text{GaAsN}) = 2 \left(\frac{2\pi m_{e(\text{GaAsN})} kT}{h^2} \right)^{3/2}$$

$$= 4.82 \cdot 10^{15} \cdot \left(\frac{m_{e(\text{GaAsN})}}{m_0} \right)^{3/2} \cdot T^{3/2} \quad \text{Eq.14}$$

- En l'absence de données expérimentales ou théoriques sur la masse effective des trous, leurs valeurs ont été prises comme une interpolation linéaire entre les valeurs de GaAs ^[23] et de GaN ^[24].
- L'affinité électronique a été calculée approximativement à partir des travaux de N. Al Saqri et al ^[6] en l'absence de données expérimentales ou théoriques.
- La permittivité relative et le coefficient d'absorption (en fonction de la longueur d'onde) de GaAsN ont été extraits des travaux de littératures ^[25,26].



Le tableau 1 regroupe les paramètres de GaAs, GaN et GaAs_{1-x}N_x pour deux valeurs de la concentration x en azote (x=0.004 et 0.012).

Matériaux	GaAs _{1-x} N _x x=0.004 (0.4%)	GaAs _{1-x} N _x x=0.012 (1.2%)	GaAs	GaN
<i>Paramètres physiques</i>				
Energie du gap, E _g (eV)	1.32	1.19	1.42 ^[27]	3.3 ^[29]
Affinité électronique, χ (eV)	3.31	3.47	4.07 ^[27]	4.1 ^[30]
Densité d'états effective de la bande de conduction, N _c (cm ⁻³)	4.42×10 ¹⁷	4.42×10 ¹⁷	4.33×10 ¹⁷ ^[28]	1.2×10 ¹⁸ ^[30]
Densité d'états effective de la bande de valence, N _v (cm ⁻³)	1.31×10 ¹⁹	1.31×10 ¹⁹	1.28×10 ¹⁹ ^[28]	4.1×10 ¹⁹ ^[30]
Mobilité des électrons, μ _n (cm ² .V ⁻¹ .s ⁻¹)	863.97	419.81	8500 ^[27]	1000 ^[31]
Mobilité des trous, μ _p (cm ² .V ⁻¹ .s ⁻¹)	189.24	100.15	400 ^[27]	350 ^[32]
Permittivité relative, ε _r	12.48	12.46	12.5 ^[23]	9.7 ^[30]

Tableau 1: Paramètres physiques spécifiques de GaAs_{1-x}N_x, GaAs et GaN.

4. RESULTATS ET DISCUSSIONS

Notre objectif est d'optimiser les paramètres tels que la concentration en azote, le travail de sortie du métal Φ_m, le dopage et l'épaisseur de la couche de GaAs_{1-x}N_x. Cependant ces paramètres doivent être contraints dans un domaine de variation, qui correspond à l'intervalle dans lequel ils ont un sens en termes physiques et technologiques.

Le travail de sortie du métal Φ_m doit être limité approximativement entre le travail de sortie minimale et maximale des métaux et alliages existants et utilisables. Nous avons choisi la plage de variation entre 4.1 eV et 5.3 eV. Ce choix est basé sur des travaux expérimentaux.

La plage de variation du dopage N_d de la couche de GaAsN est choisie entre 10¹⁵ cm⁻³ et 3×10¹⁷ cm⁻³.

Le dernier paramètre pour lequel nous devons définir des limites est l'épaisseur de la couche GaAsN. Nous avons choisi de définir sa valeur minimale sur une épaisseur de 100 nm, ce qui garantit l'absorption d'une part significative des longueurs d'onde comprises dans le spectre solaire. Le maximum de cette épaisseur est fixé à 3 μm.



4.1 EFFET DU TRAVAIL DE SORTIE DU METAL DU CONTACT SCHOTTKY

La figure 4 représente les variations des paramètres photovoltaïques en fonction du travail de sortie du métal. Dans ce cas, nous définissons les paramètres de la cellule solaire à jonction Schottky basés sur GaAs_{1-x}N_x, tels que l'épaisseur et le dopage de la couche active (GaAs_{1-x}N_x) sont de 1 µm et 3 × 10¹⁶ cm⁻³, respectivement.

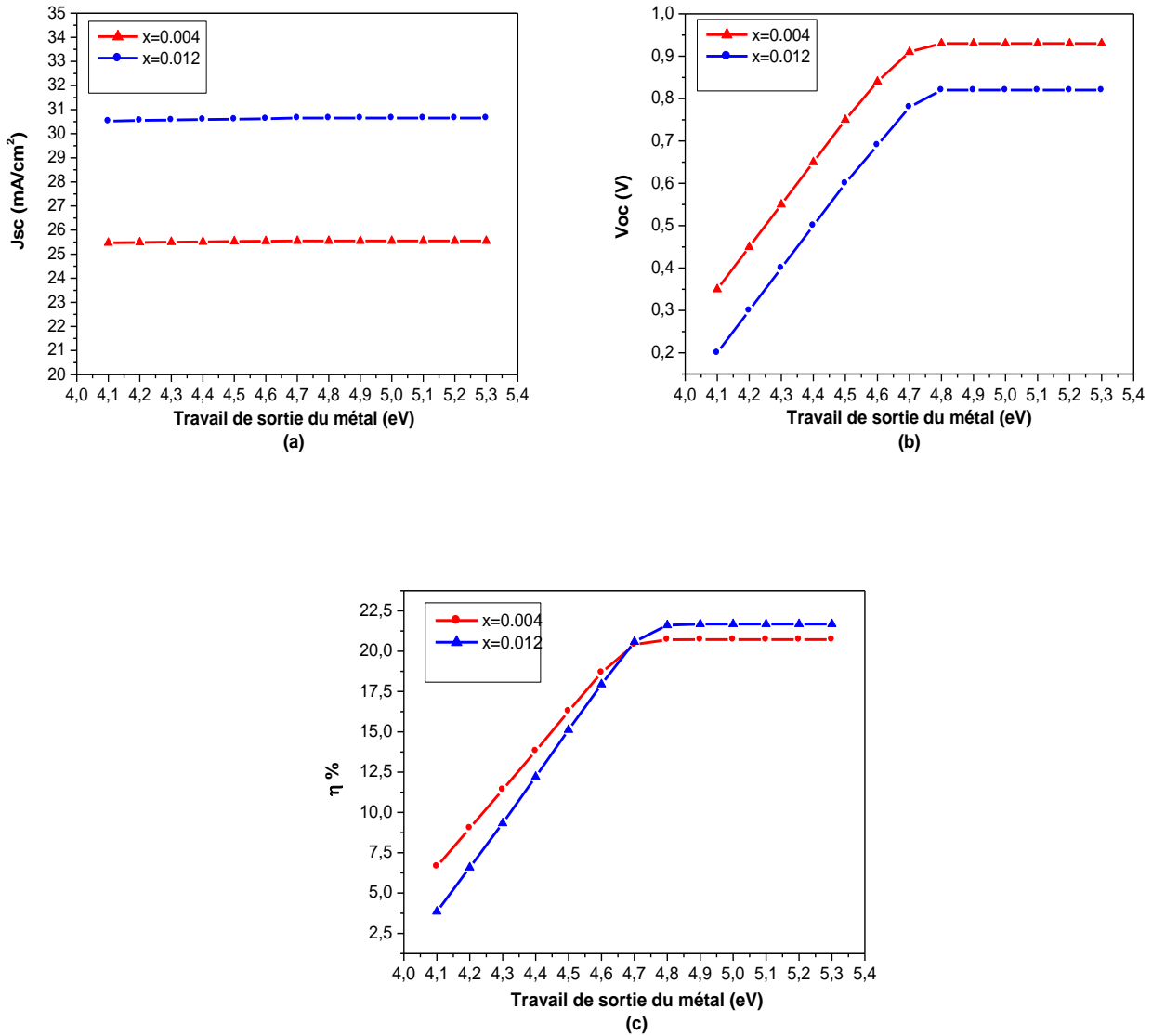


Figure 4: Variation des paramètres photovoltaïques en fonction du travail de sortie du métal du contact Schottky (Φ_m).

(a) Photocourant J_{sc}, (b) - Tension de circuit ouvert V_{oc}, (c) –rendement de conversion η.



Nous observons de la figure 4 que pour les deux valeurs de la concentration en azote $x = 0.004$ et $x = 0.012$, on a :

- Pour des valeurs de Φ_m appartenant à l'intervalle $[4.1 - 4.9]$ eV, la tension de circuit ouvert V_{oc} et le rendement η augmentent avec le travail de sortie du métal du contact Schottky. Du fait que la cellule étudiée est de type Schottky et théoriquement pour avoir un bon contact Schottky, il faut une grande hauteur de barrière Φ_b ($\Phi_b = \Phi_m - \chi_{sc}$) soit un faible courant de saturation, ce qui justifie l'augmentation du rendement de conversion pour les grandes valeurs de travail de sortie du métal Φ_m .
- Pour les valeurs de Φ_m appartenant à l'intervalle $[4.9 - 5.3]$ eV, la tension de circuit ouvert V_{oc} et le rendement η restent constants.
- Le photocourant J_{sc} reste constant sur toute la plage de variation, donc il reste indépendant du choix du métal.
- Pour l'influence de la concentration en azote x , on constate :
 - Qu'une augmentation de la concentration en azote x ($x = 0.012$) augmente le photocourant J_{sc} mais diminue la tension de circuit ouvert V_{oc} ($E_g(x=0.004) > E_g(x=0.012)$).
 - Qu'avec un travail de sortie du métal Φ_m appartenant à l'intervalle $[4.1-4.7]$ eV, la cellule avec la concentration $x = 0.004$ donne un rendement supérieur par rapport à celle avec la concentration $x = 0.012$. Pour un travail de sortie du métal Φ_m appartenant à l'intervalle $[4.7-5.3]$ eV, c'est la cellule avec $x = 0.012$ qui donne le plus grand rendement.

On peut conclure que Le meilleur rendement de conversion est obtenu pour Φ_m appartenant à l'intervalle $[4.9-5.3]$ eV.

Dans la suite de notre étude, nous fixerons le travail de sortie du métal $\Phi_m = 5.1$ eV qui correspond au travail de sortie de l'or (Au). Ce choix est également soutenu par des travaux expérimentaux utilisant l'or (Au) comme contact Schottky sur GaAsN^[5-6].

4.2 EFFET DU DOPAGE DE LA COUCHE ACTIVE GaAsN

La figure 5 représente l'évolution des paramètres photovoltaïques en fonction du dopage de la couche active. Dans ce cas, nous définissons les paramètres de la cellule solaire de type Schottky à base de GaAs_{1-x}N_x, tels que l'épaisseur de la couche active (GaAs_{1-x}N_x) est de 1 μm et le travail de sortie du métal Φ_m est de 5.1 eV.



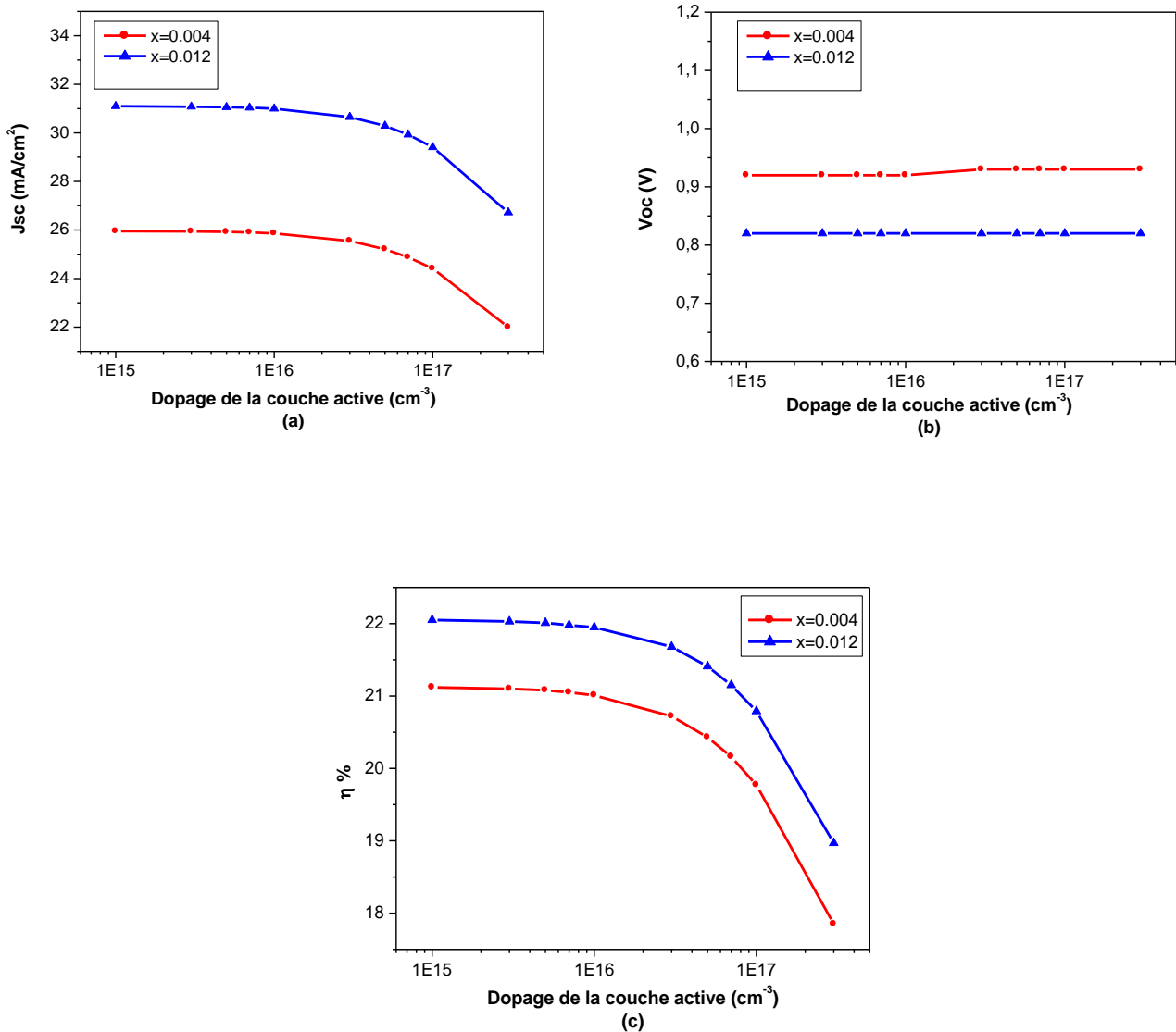


Figure 5: Variation des paramètres photovoltaïques en fonction du dopage de la couche active.

(a) - photocourant Jsc, (b) - tension de circuit ouvert Voc,
(c) - Rendement de conversion η.

Nous observons de la figure 5 que pour les deux valeurs de concentration en azote $x = 0.004$ et $x = 0.012$, on a:

- Un photocourant Jsc et un rendement η qui sont constant jusqu'à un dopage de $2 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, puis ces deux derniers diminuent avec le dopage de la couche active. Ce résultat est évident puisque pour les faibles dopages la ZCE est d'autant plus grande où siège un champ électrique intense. Ce dernier dissocie les porteurs créés pour qu'ils puissent être collectés. Cependant, lorsque le dopage augmente, la zone de charge d'espace se trouve réduite ce



qui affaiblit le rôle du champ électrique en donnant un courant de collecte plus faible et donc une diminution du rendement de conversion.

- La tension de circuit ouvert V_{oc} reste constante sur toute la plage de variation et cela du fait que la tension V_{oc} est fonction du logarithme du rapport du photocourant (J_{sc}) au courant de saturation à l'obscurité (J_0). On observe une très faible variation de la tension de circuit ouvert V_{oc} , cette dernière apparaît presque constante dans les graphiques présentés dans notre travail ^[22].
- On observe également qu'une augmentation de la concentration en azote x ($x = 0.012$) augmente le photocourant J_{sc} mais diminue la tension de circuit ouvert V_{oc} . Rappelons que le photocourant J_{sc} diminue avec l'augmentation de la bande interdite, par contre la tension de circuit ouvert augmente ^[33] (voir tableau 1).

On peut conclure que le rendement de la cellule avec une concentration en azote $x = 0.012$ est supérieur à celle de la cellule avec $x = 0.004$.

4.3 EFFET DE L'ÉPAISSEUR DE LA COUCHE ACTIVE

La figure 6 montre l'évolution des paramètres photovoltaïques en fonction de l'épaisseur de la couche active. Dans ce cas, nous définissons les paramètres de la cellule solaire à jonction Schottky basés sur $GaAs_{1-x}N_x$, tels que le dopage de la couche active ($GaAs_{1-x}N_x$) est de 10^{16} cm^{-3} et le travail de sortie du métal Φ_m est de 5.1 eV.



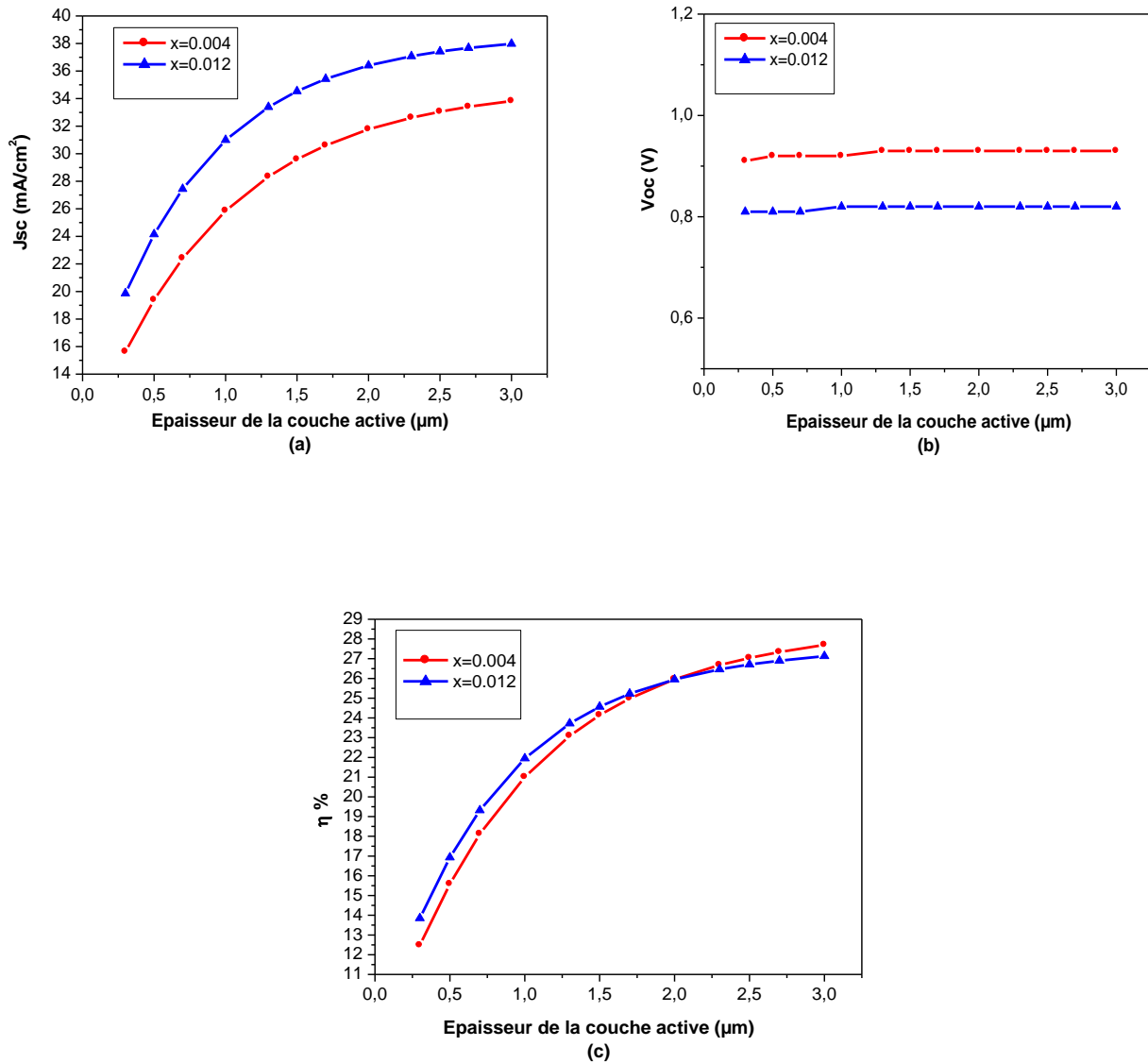


Figure 6: Variation des paramètres photovoltaïques en fonction de l'épaisseur de la couche active.

(a) - Photocourant J_{sc} , (b) - Tension de circuit ouvert V_{oc} , (c) - Rendement de conversion η .

Nous observons de la figure 6 que pour les deux valeurs de concentration en azote $x = 0.004$ et $x = 0.012$, on a :

- Le photocourant J_{sc} et le rendement η augmentent avec l'épaisseur de la couche active. En effet, plus l'épaisseur de cette couche augmente, plus les photons ayant des longueurs d'onde plus longues peuvent être absorbés et ainsi la génération de paires électron-trou est importante.
- La tension de circuit ouvert V_{oc} reste constante sur toute la plage de variation.



- On observe aussi qu'une augmentation de la concentration en azote x ($x = 0.012$) augmente le photocourant J_{sc} mais diminue la tension de circuit ouvert V_{oc} , rappelons que le photocourant J_{sc} diminue avec l'augmentation de la bande interdite par contre la tension de circuit ouvert augmente lorsque la bande interdite augmente ^[33] (Tableau 2).

Nous pouvons conclure à partir de l'ensemble des résultats que la cellule solaire à jonction Schottky à base de $GaAs_{0.996}N_{0.004}$ donne un rendement de conversion supérieur. Les paramètres technologiques optimisés pour cette structure sont résumés dans le tableau 2 suivant.

Paramètres optimisé	Valeur optimal	Intervalle d'optimisation
Le travail de sortie du métal (eV)	5.1	4.1 - 5.3
Dopage de la couche active (cm^{-3})	10^{16}	$10^{15} - 3 \times 10^{17}$
Epaisseur de la couche active (μm)	3	0.3 - 3

Tableau 2: Paramètres optimisés de la cellule solaire à jonction Schottky à base de $GaAs_{1-x}N_x$.

Les meilleurs paramètres de sortie J_{sc} , V_{oc} , FF et η obtenus pour les valeurs des paramètres technologiques optimisés sont résumés dans le tableau 3, pour les deux concentrations en azote $x = 0.004$ et $x = 0.012$.

concentration en Azote (x) in $GaAs_{1-x}N_x$	V_{oc} (V)	J_{sc} (mA/cm^2)	FF %	η %
$x=0.004$	0.93	33.82	87.28	27.70
$x=0.012$	0.82	37.98	86.22	27.13

Tableau 3: Meilleurs paramètres de sortie obtenus pour les cellules solaires à jonction Schottky à base de $GaAs_{1-x}N_x$.



La caractéristique J-V simulée de la cellule optimisée est illustrée dans la figure 7.

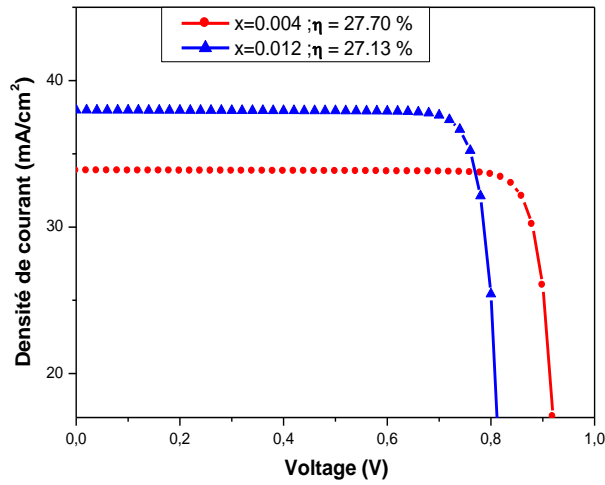


Figure 7: Caractéristiques J-V pour les cellules solaires optimisées.

La figure 8 illustre la réponse spectrale en fonction de la longueur d'onde des cellules solaires de type Schottky à base de GaAs_{1-x}N_x optimisés avec deux concentration x=0.004 et x=0.012.

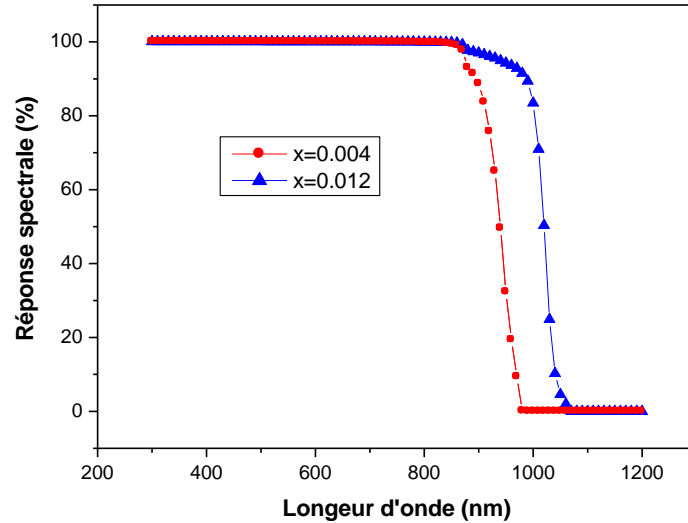


Figure 8: Rendement quantique en fonction de la longueur d'onde des cellules solaires optimisées.

La figure 8 montre que la cellule solaire avec x=0.012 fournit une large réponse spectrale par rapport à la cellule solaire avec x=0.004.



Pour mettre en valeur nos résultats obtenus, nous les avons regroupés dans le tableau 3, en comparaison avec quelques rares résultats expérimentaux et de simulation sur GaAs [34,35] et GaAsN [4].

Structures	Voc	Jsc	FF	η %
GaAs (structure P-N à couche mince) [34]	0.98	24.2	76	18.1
Structure Schottky Graphène/n-GaAs [35]	0.65	10.03	-	1.95
GaAsN (CBE) (structure n ⁺ -GaAs/n-GaAsN/p-GaAsN avec N=0.71% et un contact avant schottky) [4]	0.66	16.52	65	7.1
cellules solaires de type Schottky à base de GaAs _{1-x} N _x avec N=0.04% (nos résultats)	0.93	33.82	87.28	27.70
cellules solaires de type Schottky à base de GaAs _{1-x} N _x avec N=1.2% (nos résultats)	0.82	37.98	86.22	27.13

Tableau 3: Paramètres de sortie rapportés dans la littérature pour des cellules GaAs à jonction P-N à couche mince comparés aux cellules à jonction Schottky à base de GaAsN, GaAs et à cellule solaire de type schottky à base de GaAs_{1-x}N_x (x=0.004 et 0.012) de nos résultats.

Nos résultats de simulation basé sur des données expérimentales, donnent une indication sur le haut rendement prévu par des cellules solaires type Schottky Au/GaAsN. Ces résultats peuvent servir de base pour la réalisation des cellules solaires à concentration (CPV) de type Schottky.



5. CONCLUSION

Les performances de la cellule solaire GaAsN de concentration en azote $x=0.004$ et $x=0.012$ ont été étudiées en calculant les rendements avec des variations des paramètres technologiques de la structure tels que le travail de sortie du métal, la concentration du dopage et l'épaisseur de la couche active.

Les résultats obtenus montrent que pour avoir un rendement élevé il faut:

- Choisir un métal qui permet d'avoir une hauteur de barrière élevée.
- Diminution de la concentration du dopage de la couche active de GaAsN.
- Augmenter l'épaisseur de la couche active de GaAsN

Nous avons trouvé des rendements photovoltaïques optimaux de 27.70% et 27.13% pour $x = 0.004$ et $x = 0.012$ respectivement. Nous pouvons conclure que le dispositif SchottkySC basé sur $\text{GaAs}_{0.996}\text{N}_{0.004}$ donne un rendement de conversion supérieur. En résumé, le développement de SchottkySC à base de GaAsN avec une hauteur de barrière élevée permet d'avoir une cellule solaire à haute efficacité tout en contrôlant le dopage et l'épaisseur de la couche active.

En dernier nous avons confronté nos résultats avec les rares résultats obtenus dans la littérature, nos résultats de simulation basé sur des données expérimentales, donnent une indication sur le haut rendement prévu par des cellules solaires type Schottky Au/GaAsN. Ces résultats peuvent servir de base pour la réalisation des cellules solaires à concentration (CPV) de type Schottky.



REFERENCES

- [1] **Mahala, Pramila, Sanjay Kumar Behura, Chenna Dhanavantri, Abhijit Ray, and Omkar Jani.** "Metal/InGaN Schottky Junction Solar Cells: An Analytical Approach", *Applied Physics A: Solids and Surfaces*. (2014). doi:10.1007/s00339-014-8910-5.
- [2] **W. Bachir Bouiadjra , M.A. Kadaoui, A. Saidane, M. Henini b, M. Shafi,** "Influence of annealing temperature on electrical characteristics of Ti/Au/GaAsN Schottky diode with 0.2% nitrogen incorporation", *Materials Science in Semiconductor Processing* 22 92–100, (2014).
- [3] **Victor-Tapio Rangel-Kuoppa, Outi Reentilä, Markku Sopanen, and Harri Lipsanen,** "Temperature Dependence Of Current-Voltage Characteristics Of Au/p-GaAsN Schottky Barrier Diodes, With Small N Content", *AIP Conference Proceedings* 1399, 171 (2011). doi: 10.1063/1.3666311.
- [4] **B. Bouzazi, N. Kojima, Y. Ohshita, M. Yamaguchi,** "Capacitance-voltage and current voltage characteristics for the study of high background doping and conduction mechanisms in GaAsN grown by chemical beam epitaxy", (2012). doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jallcom.2012.11.007>.
- [5] **W. Bachir Bouiadjra , A. Saidane, A. Mostefa, M. Henini, M. Shafi,** "Effect of nitrogen incorporation on electrical properties of Ti/Au/GaAsN Schottky diodes", *Superlattices and Microstructures* 71 225–237, (2014).
- [6] **N. Al Saqri, J.F. Felix, M. Aziz, D. Jameel, C.I.L. de Araujo, H. Albalawi, F. Al Mashary, H. Alghamdi, D. Taylor, M. Henini,** "Investigation of the effects of gamma radiation on the electrical properties of dilute GaAs_{1-x}N_x layers grown by Molecular Beam Epitaxy", *Current Applied Physics* 1-8, (2015).
- [7] **C. Dong, X. Han, X. Gao, Y. Ohshita, M. Yamaguchi,** "Electrical characterization of Cu Schottky contacts to n-type GaAsN grown on (311)A/B GaAs substrates", *Journal of Alloys and Compounds* (2015). doi: 10.1016/j.jallcom.2015.10.097.
- [8] **C. Dong, X. Han, J. Li, X. Gao and Y. Ohshita,** "Impacts of growth orientation and N incorporation on the interface-states and the electrical characteristics of Cu/GaAsN Schottky barrier diodes", *Physica B: Physics of Condensed Matter*, <https://doi.org/10.1016/j.physb.2017.09.125>.
- [9] **P. Kamyczek, P.Bieganski, E.Placzek-Popko, E.Zielony, L. Gelzuk, B. Sciana, D. Pucicki, D.Radziewicz, M.Tlaczala, K. Kopalko, M. Dabrowska-szata,** "Electro-optical properties of diluted GaAsN on GaAs grown by APMOVPE", *Materials Science-Poland*, 31(4), pp. 595-600, (2013).
- [10] **Koen Decock , Samira Khelifi, Marc Burgelman,** "Modelling multivalent defects in thin film solar cells Thin", *Solid Films* p 7481– 7484, (2011).
- [11] **J.M. Burgelman,** "Numerical modeling of intra-band tunneling for heterojunction solar cells in SCAPS", *Thin Solid Films* , p 6276– 6279, (2007).
- [12] **M. Burgelman, J. Verschraegen, S.Degrave, P. Nollet,** "Modeling thin-film devices", *Prog.Photovolt :Res.Appl* ,p143–153, (2004).
- [13] **F. Hassen, Z. Zaaboub, M. Bouhlel, M. Naffouti, H. Maaref, N.M. Garni,** *Thin Solid Films* 594 168–171, (2015).
- [14] **X. Z. Chen, D. H. Zhang, Y. J. Jin, J. H. Li, J. H. Teng, N. Yakovlev,** *Journal of Crystal Growth* 362 197–201, (2013).
- [15] **R. Carron,** "Dilute-Nitride Low-Dimensional Nanostructures Formed on Non-Planar Substrates", Thèse, École Polytechnique Fédérale de Lausanne, France (2013).
- [16] **A. Vallejo Luce,** "Engineering Dilute Nitride Semiconductor Alloys for Intermediate Band Solar Cells", thesis, University of California, Berkeley, USA (2015).



- [17] **S. Turcotte, J.-N. Beaudry, R. A. Masut, P. Desjardins, G. Bentoumi, and R. Leonelli**, "Experimental investigation of the variation of the absorption coefficient with nitrogen content in GaAsN and GaInAsN grown on GaAs (001)", *Journal of Applied Physics* 104, 083511, (2008). doi: 10.1063/1.3000451.
- [18] **Vurgaftman and J. R. Meyer**, "Band parameters for nitrogen-containing semiconductors", *J. Appl. Phys.* 94, 3675, (2003). doi: 10.1063/1.1600519.
- [19] **S. Fahy, A. Lindsay, H. Ouerdane and E. P. O'Reilly**, "Alloy scattering of n-type carriers in $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ ", *Phys. Rev. B* 74, 035203, (2006).
- [20] **M. Yamaguchi, B. Bouzazi, H. Suzuki, K. Ikeda, N. Kojima, and Y. Ohshita**, "III-V-N materials for super high-efficiency multijunction solar cells", *AIP Conf. Proc.* 1477, 24, (2012). doi: 10.1063/1.4753825
- [21] **F. Masia, G. Pettinari, A. Polimeni, M. Felici, A. Miriametro, M. Capizzi, A. Lindsay, S.B. Healy, E. P. O'Reilly, A. Cristofoli, G. Bais, M. Piccin, S. Rubini, F. Martelli, A. Franciosi, P. J. Klar, K. Volz and W. Stolz**, "Interaction between conduction band edge and nitrogen states probed by carrier effective-mass measurements in $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ ", *Phys. Rev. B* 73, 073201, (2006).
- [22] **Henry Mathieu, Hervé Fanet**, "physique des semiconducteurs et des composants électroniques", book, Edition 6, DUNOD, Paris, (2009).
- [23] **S. W. Koch**, "Microscopic Theory of Semiconductors: Quantum Kinetics, Confinement and Lasers", 212, World Scientific, (1995).
- [24] <https://fr.scribd.com/document/98540290/Gan-Band-Str>
- [25] **S. Turcotte**, "propriétés optoélectroniques d'hétérostructures de Ga(In)AsN", thèse, ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL, CANADA, (2008).
- [26] **S. Turcotte, J.-N. Beaudry, R. A. Masut, P. Desjardins, G. Bentoumi, and R. Leonelli**, "Experimental investigation of the variation of the absorption coefficient with nitrogen content in GaAsN and GaInAsN grown on GaAs (001)", *Journal of Applied Physics* 104, 083511, (2008). doi: 10.1063/1.3000451
- [27] **M. Levinstein, S. Rumyantsev and M. Shur**, "Handbook Series on Semiconductor Parameters", vol. 1, 2, World Scientific, London, (1999).
- [28] **B. Boittiaux**, "Cours d'électronique: Les composants semiconducteurs", 2ème édition, TEC & DOC (EDITIONS) (1995).
- [29] **I. Vurgaftman, J. R. Meyer, and L. R. Ram-Mohan**, *J. Appl. Phys.*, 89, 5815-5875 (2001).
- [30] <https://fr.scribd.com/document/98540290/Gan-Band-Str>
- [31] **J. G. Kim, A. C. Frenkel, H. Liu and R.M. Park**, *Appl. Phys. Lett.*, 65, 91-93 (1994).
- [32] **J. R. L. Fernandez, V. A. Chitta, E. Abramof, A. Ferreira da Silva, J. R. Leite, A. Tabata, D. J. As, T. Frey, D. Schikora, and L. Lischka**, (in: GaN and Related Alloys - 1999. Symposium (Materials Research Society Symposium Proceedings Vol.595); Warrendale, PA, USA: Mater. Res. Soc, (2000).
- [33] **C. delCañizo**, "Characterization of intermediate band materials and solar cells", CHEETA Workshop: Advanced characterization methods for PV Freiburg, January 14th (2016).
- [34] **Lee, K., Zimmerman, J. D., Hughes, T. W. & Forrest, S. R**, "Non-destructive wafer recycling for low-cost thin-film flexible optoelectronics". *Adv. Funct. Mater.* 24, 4284–5291, (2014).
- [35] **Wenjing Jie, Fengang Zheng, and Jianhua Hao**, "Graphene/gallium arsenide-based Schottky junction solar cells", *APPLIED PHYSICS LETTERS* 103, 233111 (2013).



CHAPITRE 4:

SIMULATION DE LA CELLULE SOLAIRE A BANDE INTERMEDIAIRE IBSC A BASE DE GaAsN

SOMMAIRE

1. INTRODUCTION	89
2. CONCEPT DES CELLULES SOLAIRES A BANDE INTERMEDIAIRE IBSC	90
3. IDENTIFICATION DES MATERIAUX SEMICONDUCTEURS ABOUTISSANT A DES BANDES INTERMEDIAIRES	92
4. LE SIMULATEUR AMPS – 1D	95
5. DESCRIPTION DE LA CELLULE SOLAIRE SIMULEE	97
6. RESULTATS ET DISCUSSIONS	98
6.1 ETUDE DE L'INFLUENCE DE LA BANDE INTERMEDIAIRE	100
6.2 EFFET DES PARAMETRES TECHNOLOGIQUES DE L'EMETTEUR (p-GaAs)	105
6.3 EFFET DES PARAMETRES TECHNOLOGIQUES DE LA BASE (n-GaAs)	106
6.4 ETUDE DE LA CARACTERISTIQUE J-V	108
6.5 RENDEMENT QUANTIQUE	109
7. CONCLUSION	112



1. INTRODUCTION

La simulation numérique des structures photovoltaïques 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.

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 de s'appuyer sur des paramètres expérimentaux réels.

Les cellules solaires à bande intermédiaire sont un type de cellules photovoltaïques de troisième génération. En effet, l'augmentation du rendement de conversion d'énergie est obtenue grâce à l'absorption de photons de basse énergie tout en préservant une bande interdite importante qui détermine la tension du circuit ouvert. La capacité d'absorption des photons provenant de différentes parties du spectre solaire provient de la présence d'une bande d'énergie intermédiaire située dans la bande interdite du matériau. Cette bande intermédiaire, servant de tremplin, permet l'absorption de photons de basse énergie pour transférer des électrons de la bande de valence à la bande de conduction par un processus d'absorption séquentielle à deux photons.

Dans ce chapitre, nous présenterons le concept des cellules solaire à bande intermédiaire et les matériaux aboutissant à ce type de cellule. Ensuite, nous allons faire une étude, par simulation à l'aide de simulateur d'analyse de la structure microélectronique et photonique (AMPS-1D), sur la cellule à bande intermédiaire (IBSC) à base de $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$.

Les résultats de simulation de l'incorporation de l'azote (N%) formant un niveau de défaut qui joue le rôle d'une bande intermédiaire (IB) seront donnés. Une étude de l'influence de la position et la densité de la bande intermédiaire sur les paramètres de sortie de la cellule sera effectuée.

Nous étudierons les caractéristiques des cellules à bande intermédiaire à base de $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$. Nous montrerons que cette dernière pourra être une solution prometteuse pour l'obtention d'un courant de court-circuit important et un rendement de conversion plus élevé par rapport à une cellule solaire de GaAs sans bande intermédiaire. Une comparaison entre les deux cellules (sans et avec bande intermédiaire (IB)) sera faite permettant de montrer l'intérêt de la bande intermédiaire pour la conversion photovoltaïque.



2. CONCEPT DES CELLULES SOLAIRES A BANDE INTERMEDIAIRE IBSC

La cellule solaire à bande intermédiaire (IBSC) constitue une alternative un peu plus simple aux jonctions uniques que les cellules solaires multijonctions, où la présence d'une bande intermédiaire entre la bande de conduction et la bande de valence permet aux électrons d'être promus directement vers la bande de conduction via un seul photon d'énergie, ou via la bande intermédiaire avec deux photons à basse énergie ^[1].

La condition essentielle pour une cellule solaire à bande intermédiaire (IBSC) est que la bande intermédiaire (IB) soit isolée des contacts de collecte de charge, ce qui garantit que la tension de fonctionnement est déterminée par la bande interdite la plus grande. Il peut également capter l'énergie solaire des photons à basse énergie. Le rendement théorique d'un dispositif IBSC idéal devrait approcher de 45% et 63% sous 1 soleil et une concentration maximale de lumière solaire, respectivement ^[1].

Dans une cellule solaire conventionnelle éclairée, les populations de porteurs dans la bande de conduction (CB) et la bande de valence (VB) peuvent être considérées comme étant en équilibre quasi thermique, ce qui signifie que l'équilibre thermique existe indépendamment dans la population d'électrons dans la bande de conduction (CB) et la population des trous dans la bande de valence (VB)^[2] mais pas entre les deux bandes puisqu'une différence de potentiel électrochimique sépare maintenant les électrons dans la bande de conduction (CB) et les trous dans la bande de valence (VB) donnant lieu à la tension de la cellule solaire. Dans un IBSC, la préservation de la tension résulte de l'établissement d'une troisième population des porteurs dans la bande intermédiaire (IB) quasi thermique. L'occupation des trois bandes peut être décrite à l'aide d'une énergie de Fermi, en établissant trois différences de potentiel électrochimiques μ_1 , μ_2 , μ_3 comme indiqué à la figure 1, telles que $\mu_1 = \mu_2 + \mu_3$. Les contacts électriques n'étant établis qu'avec la bande de conduction (CB) et la bande de valence (VB), la tension totale de la cellule solaire est donnée par μ_1 . La correspondance entre la bande interdite hôte fondamentale et la bande interdite intermédiaire est également illustrée. Il est clair que des matériaux hôtes à largeur de bande relativement large sont nécessaires pour un fonctionnement efficace d'un IBSC. La figure 1 représente les transitions de base dans un IBSC ^[1,2].



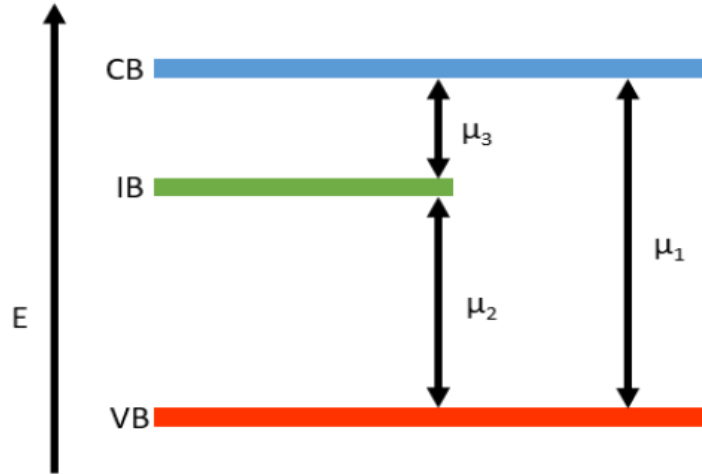
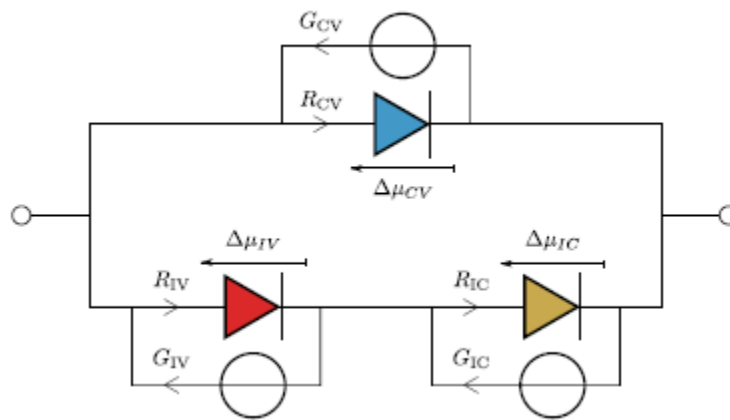


Figure 1: Schéma montrant les transitions de base dans un IBSC [3].

La figure 2 représente le circuit électrique équivalent d'une cellule solaire à bande intermédiaire. Cette figure souligne les contraintes électriques imposées à la cellule, tandis que le diagramme des bandes d'énergie illustré à la figure 1 souligne les contraintes sur les écarts énergétiques.



La figure 2: Circuit électrique équivalent d'une cellule solaire à bande intermédiaire [4].

Avec : G_i : le taux de génération des porteurs de la transition i , R_i : le taux de recombinaison des porteurs de la transition i et $\Delta\mu_i$: Différence de potentiel électrochimique de la transition i .

Où $i = VC, IV$ et IC est le label des transitions, bande de valence à bande de conduction, bande de valence à bande intermédiaire et bande intermédiaires à bande de conduction, respectivement.



Les caractéristiques densités de courant-tension illustré à la figure 3 montrent une comparaison d'une cellule solaire à bande intermédiaire IBSC avec celles fabriquées à partir d'un matériau semiconducteur à bande interdite optimisée et celles des matériaux semiconducteurs à bandes interdites faible et élevée [3].

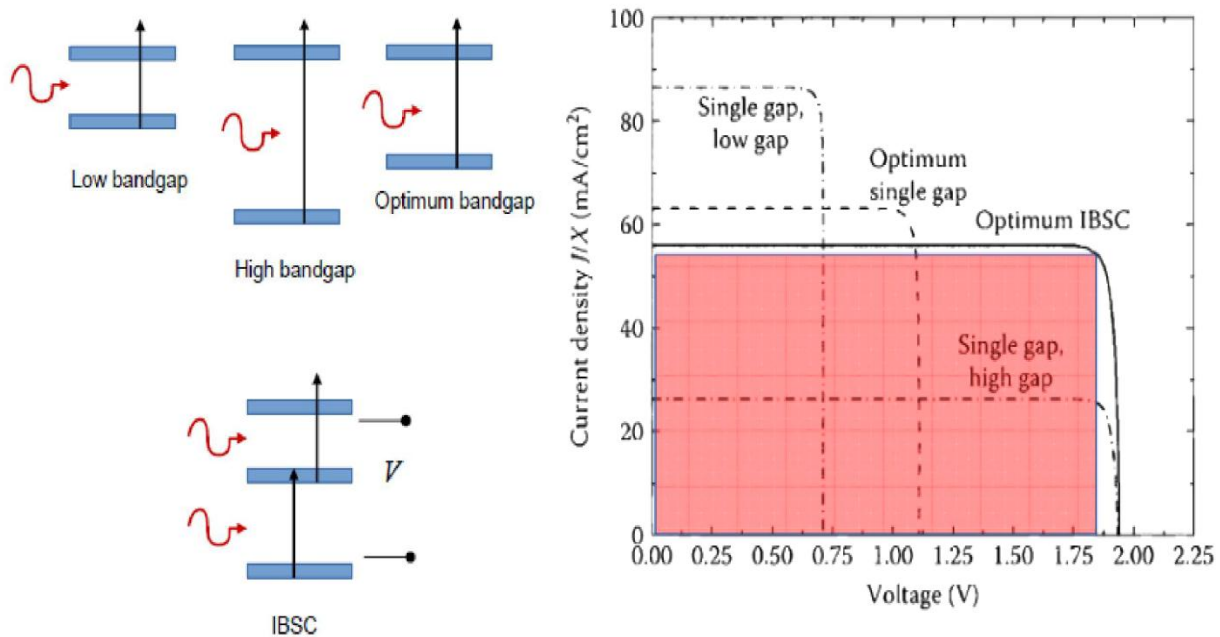


Figure 3: Présentation de la caractéristique densité de courant-tension pour une cellule solaire à bande intermédiaire IBSC en comparaison avec celles fabriquées à partir d'un matériau semiconducteur à bande interdite optimisée et celles des matériaux semiconducteurs à bandes interdites faible et élevée [5].

3. IDENTIFICATION DES MATERIAUX SEMICONDUCTEURS ABOUTISSANT A DES BANDES INTERMEDIAIRES

L'une des approches qui a conduit à la réalisation pratique antérieure de l'IBSC consiste à concevoir des alliages hautement asymétriques II-VI et III-V. Ces matériaux présentent une restructuration radicale des bandes d'énergie en modifiant la composition de l'alliage et peuvent être utilisés pour former des semiconducteurs à bande intermédiaire. Deux principaux défis ont été rencontrés [6]:

- 1) une durée de vie de porteurs suffisamment longue dans la bande intermédiaire.
- 2) une forte absorption optique dans la bande intermédiaire.

Une autre approche consiste à utiliser des alliages semiconducteurs hautement désadaptés (HMA: Highly-mismatched alloys), tels que les nitrures dilués et les oxydes [6], qui présentent



naturellement une bande intermédiaire. La formation de cette bande intermédiaire dans les HMA est expliquée par le modèle de réduction de bande (BAC) ^[6], exploré plus en détail au chapitre 2.

Le modèle BAC décrit l'interaction entre le niveau d'impureté isoélectronique localisé (N dans le cas III-V) et la bande de conduction du matériau semiconducteur hôte. Cette interaction divise la bande de conduction en deux sous-bandes E- et E+. Le décalage vers le bas de la sous-bande inférieure (E-) est responsable de la réduction de la bande interdite fondamentale et la transition optique de la bande de valence vers la sous-bande supérieure (E+) explique le front de haute énergie.

La figure 4 illustre le calcul de la structure de bande à l'aide du modèle anti croisement de bande (BAC) pour l'azote niveau de défaut dans la bande de conduction de GaAsN.

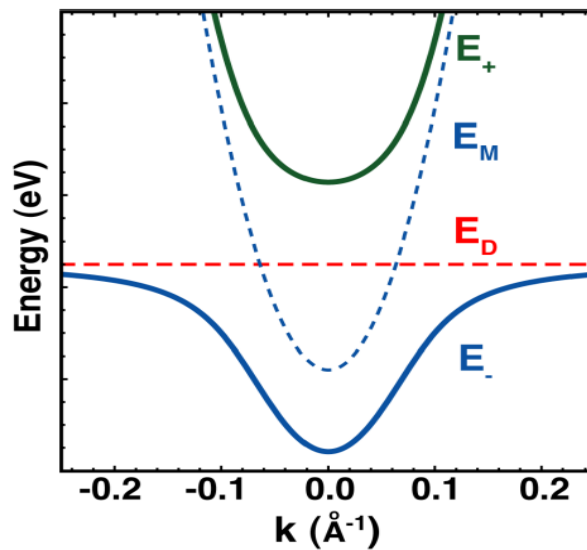


Figure 4: Calcul de la structure de bande à l'aide du modèle anti croisement de bande (BAC) pour l'azote niveau de défaut dans la bande de conduction de GaAsN ^[6].

où E_M est la bande de conduction du GaAs (matériau hôte avant l'incorporation d'azote), E₊ et E₋ les sous bandes résultant par la division de la bande E_M après l'incorporation d'azote et E_D le niveau défaut d'Azote.

La figure 5 montre le rendement calculé d'un IBSC basé sur le système GaAs_{1-x}N_x avec des valeurs de gap d'énergie déterminées par le modèle de BAC.



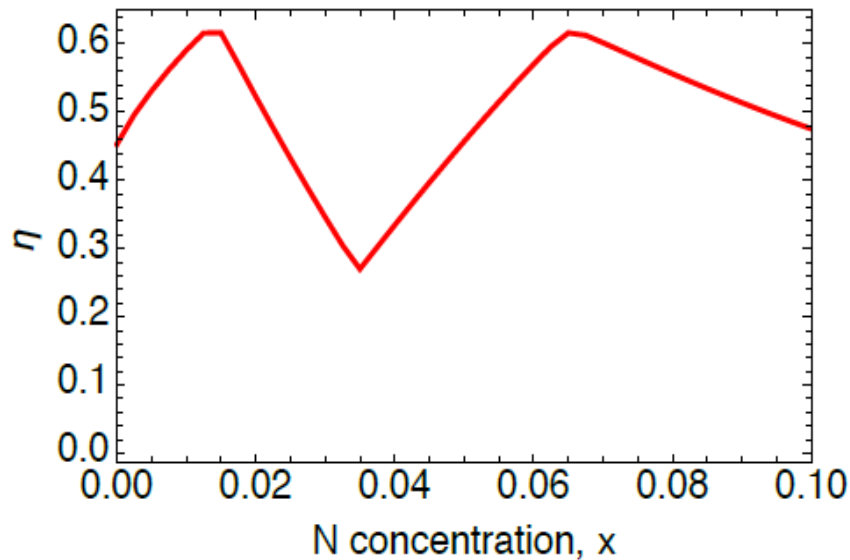


Figure 5: Rendement calculé de l'IBSC $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ idéal en fonction de la concentration en N, x ^[6].

En 2000, J C Harmand et al ont constaté que pratiquement, il était très difficile d'atteindre x supérieur à 4% sans dégradation significative de la qualité du matériau ^[9]. D'autres études publiées en 2015 ont montré qu'une bonne qualité cristalline peut être maintenue pour des fractions d'azote supérieures à 4% (x = 5% et x = 6%) pour des conditions de croissance bien précis dans les travaux d'Arto Aho et al ^[10].

Une exigence essentielle pour une cellule solaire à bande intermédiaire efficace est que la bande intermédiaire soit étroite et bien séparée de la bande de valence et de la bande de conduction ^[6]. Dans le GaAsN, le IB est plus large car il est formé par division de la bande de conduction en sous-bandes E- et E + et parce que le niveau d'azote est situé au-dessus du bord de la bande de conduction ^[6].

On peut conclure que les cellules solaires à bande intermédiaire sont attrayantes en raison de leurs simplicités, point de vue réalisation technologique, comparées aux dispositifs multi-jonctions. En effet, dans un dispositif à jonctions multiples, les différentes sous-cellules, souvent constituées de matériaux différents, doivent être appariées par épitaxie. La même fonctionnalité peut être obtenue dans un seul matériau en utilisant un absorbeur à bande intermédiaire ^[11].

Des dispositifs de preuve de concept IBSC ont été mis en évidence dans l'alliage II-VI ZnTeO ^[7]. En 2011, il a été démontré qu'un dispositif IBSC basé sur l'alliage GaAsN à semiconducteurs hautement désadaptés des groupes III-V présentait une activité optique des trois bandes d'énergie. Il s'est avéré être une cellule PV fonctionnelle dans laquelle l'IB a contribué à une augmentation mesurable du photocourant ^[8].



4. LE SIMULATEUR AMPS – 1D

Le logiciel AMPS 1-D est un outil de simulation unidimensionnel utilisé pour simuler la physique du transport dans les dispositifs à l'état solide d'une manière très générale. Il résout numériquement les trois équations qui gouvernent le fonctionnement du dispositif soient l'équation de Poisson et les deux équations de continuité pour les électrons et les trous libres sans faire à priori des suppositions à propos des mécanismes de transport dans ce dispositif. Il est élaboré pour analyser, concevoir et optimiser des structures destinées pour des applications photovoltaïques, microélectroniques ou optoélectroniques.

Les paramètres sont à introduire dans trois des sous-fenêtres constituant la fenêtre principale du logiciel. Ils sont ^[12]:

- Les paramètres qui s'appliquent au dispositif entier.
- Les paramètres qui s'appliquent à une région particulière du dispositif.
- Les paramètres qui définissent le spectre d'illumination.

La fenêtre principale de l'AMPS-1D (Figure 6), fournit à l'utilisateur les différentes options pour la personnalisation de la simulation.

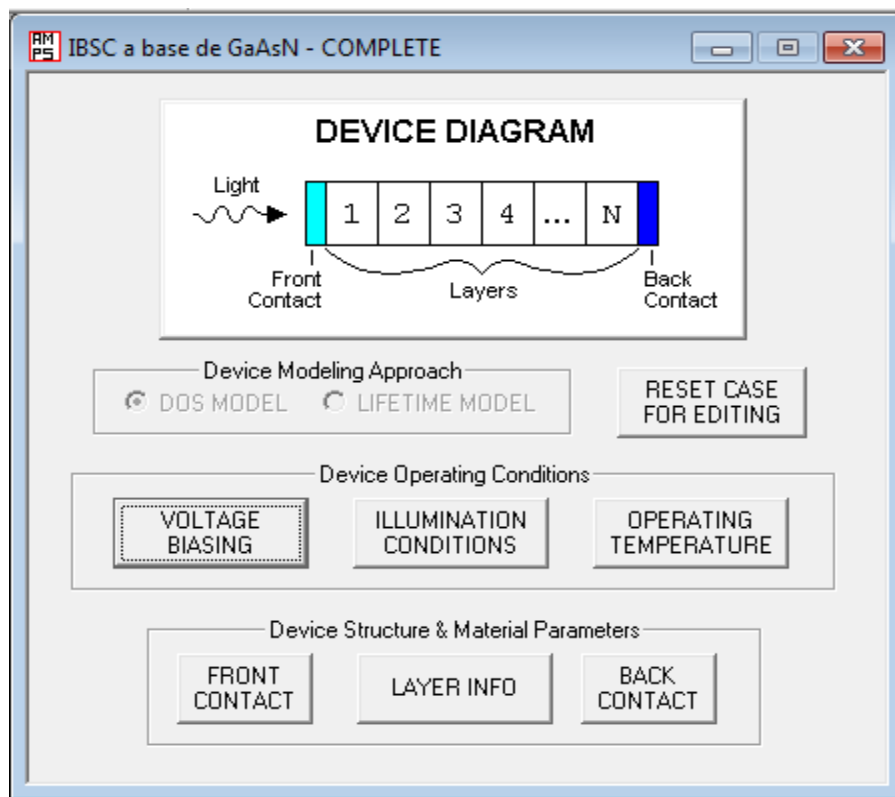


Figure 6: Ensemble de sous-fenêtres pour introduire les différents paramètres.



Au bas de la fenêtre sous la rubrique “Structure du dispositif et Paramètres des matériaux”, on trouve trois options: Contact avant, informations sur les paramètres des couche, et Contact arrière. L'option informations sur les couches permet à l'utilisateur d'introduire les différents paramètres de chaque couche tels que le gap (EG), la concentration de dopage des dopants (NA ou ND), la mobilité des électrons (MUN), la mobilité des trous (MUP), l'affinité électronique (CHI), la permittivité relative (EPS), la densité des états des électrons dans la bande de conduction (NC) et la densité des états des trous dans la bande de valence (NV) (figure 7).

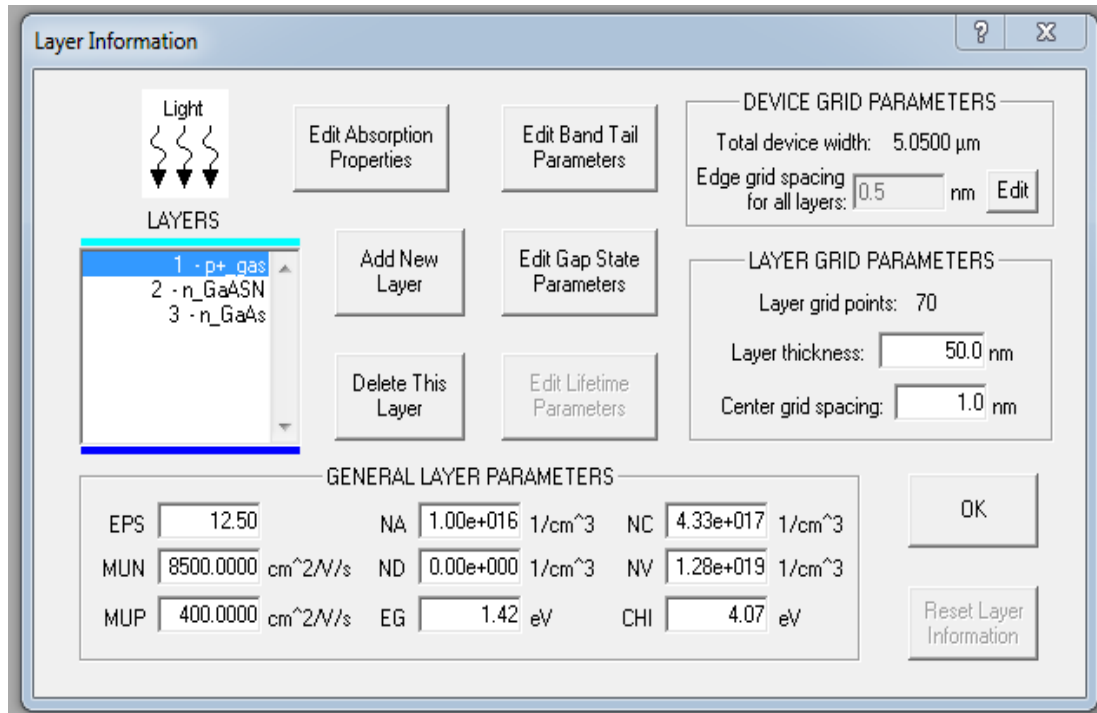


Figure 7: Fenêtre d'informations sur les différentes couches.

La figure 8 montre une fenêtre d'information sur les paramètres d'état du gap où ND est la densité d'état de défaut donneur (cm^{-3}), EDON la position énergétique du défaut donneur considéré positif à partir de la bande de conduction E_c (eV), WDSD l'écart standard de défaut donneur (eV), DSIG/ND la section efficace de capture des électrons (cm^2) et DSIG/PD la section efficace de capture des trous (cm^2).



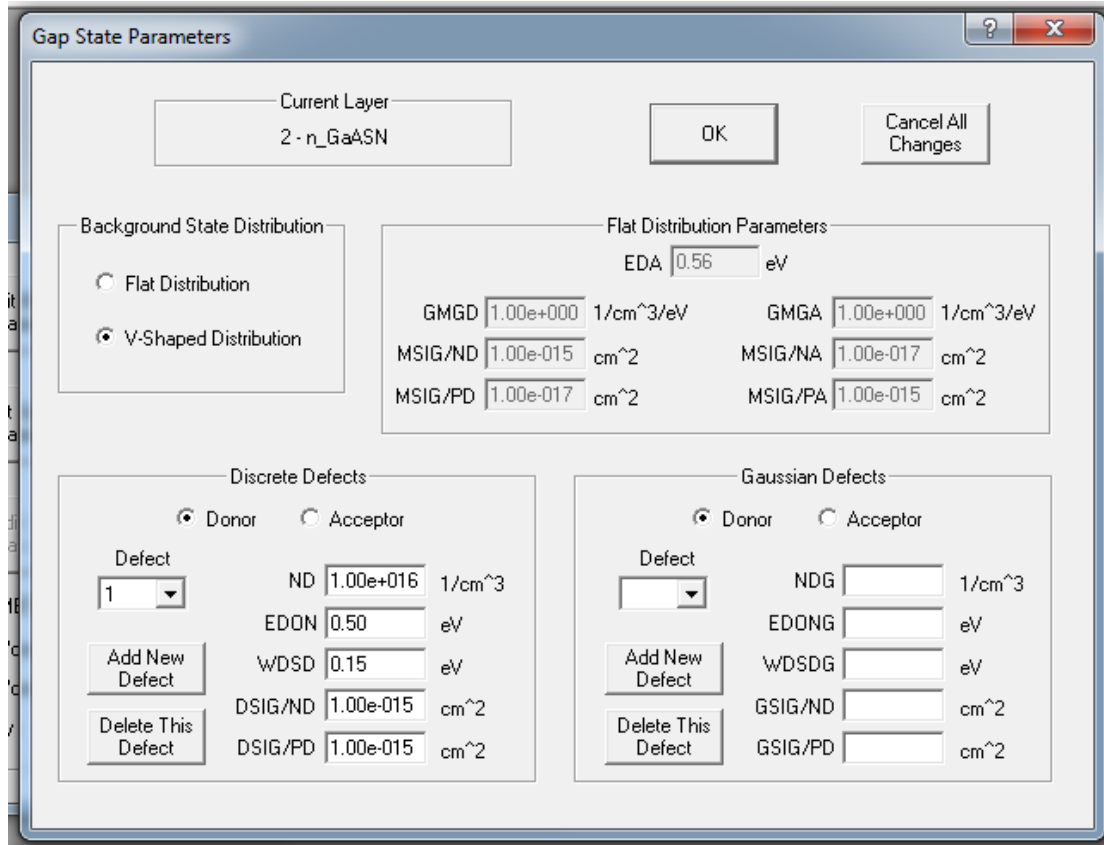


Figure 8: Fenêtre d'informations sur les paramètres d'état du Gap.

5. DESCRIPTION DE LA CELLULE SOLAIRE SIMULEE

Dans ce travail, toutes les simulations ont été effectuées sous un éclairement AM1.5 G et à la température ambiante.

La figure 9.a représente la structure d'une cellule solaire GaAs conventionnelle. La structure de la cellule solaire à base de GaAsN à bande intermédiaire (IBSC) étudiée, est une homojonction où la région IB est prise en sandwich entre les matériaux p-GaAs et n-GaAs comme le montre la figure 9.b.



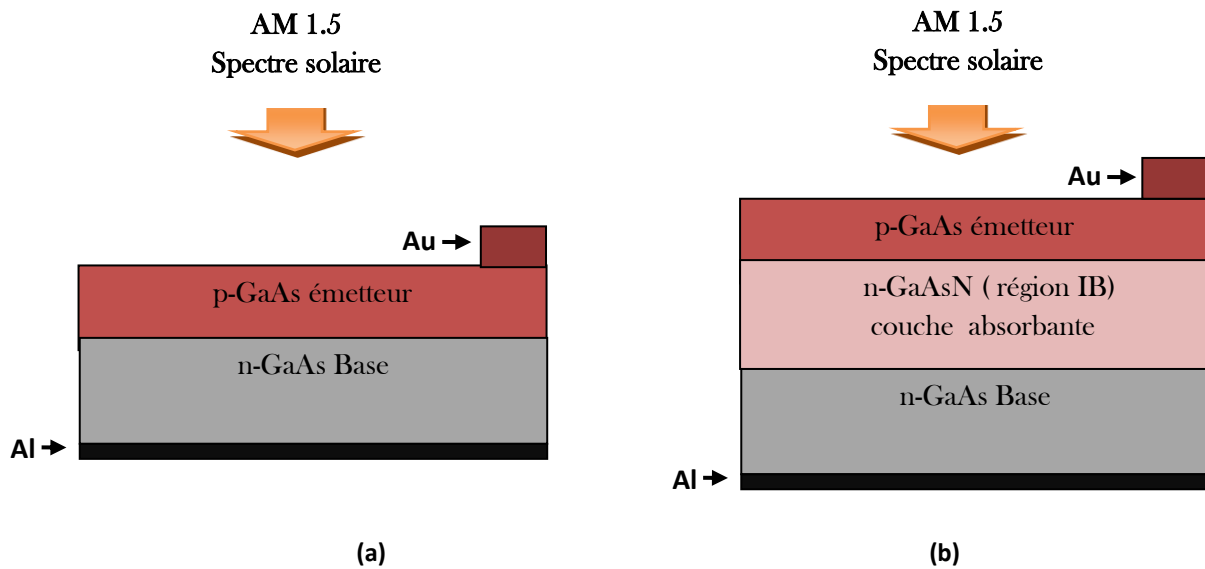


Figure 9: Structures schématiques des dispositifs, (a) d'une cellule solaire GaAs conventionnelle et (b) d'une cellule solaire GaAs à bande intermédiaire (GaAsN) IBSC.

6. RESULTATS ET DISCUSSIONS

Le fonctionnement de la cellule solaire à bande intermédiaire dépend d'un grand nombre de paramètres. Ces paramètres sont liés aux matériaux utilisés et à la géométrie de la cellule et sont interdépendants, ce qui rend indispensable l'étude de leur influence sur les paramètres de sortie de la cellule solaire. Cette étude permettra ainsi de déterminer les paramètres critiques et importants dans le fonctionnement de ce type de cellule et donc l'optimisation des performances de celle-ci.

Pour étudier l'influence d'un paramètre, nous allons le faire varier sur un intervalle donné tout en fixant tous les autres paramètres. Cette démarche sera suivie pour étudier l'influence de chacun des paramètres sur les performances de la cellule solaire à bande intermédiaire.

Pour chaque variation du paramètre donné, nous avons généré les caractéristiques courant-tension $J(V)$ sous l'éclairement AM1.5 G afin d'extraire les paramètres de sortie : la densité de courant de court-circuit J_{sc} , la tension de circuit ouvert V_{oc} , et le rendement de conversion η de la cellule.

Nous allons d'abord étudier l'influence de l'introduction de la bande intermédiaire (IB) dans la couche absorbante de GaAsN notamment en faisant varier la concentration (N_i) dans la bande intermédiaire, le niveau d'énergie de la bande intermédiaire (E_i) dans la bande interdite de GaAsN, et l'épaisseur de la couche absorbante (x_i). Puis, nous nous étudierons l'effet du dopage et de l'épaisseur de la couche émettrice (p-GaAs) et la couche de base (n-GaAs).

La structure de la cellule solaire à base de GaAsN à bande intermédiaire (IBSC) étudiée, est une homojonction où la région IB est prise en sandwich entre les matériaux p-GaAs et n-GaAs comme



c'est indiqué dans la figure 9.b. Le matériau GaAsN est un alliage ternaire $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ avec une concentration en azote (x , N%). Dans notre étude le choix de la composition (x) pour l'alliage $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ est négligé par le fait que nous nous concentrerons sur l'étude du déplacement de la bande intermédiaire dans l'alliage GaAsN tout en gardant les mêmes paramètres du matériau GaAs (le matériau hôte pour l'alliage GaAsN). Théoriquement, la modification de la concentration en azote (x , N%) de l'alliage ternaire $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ permet de modifier le déplacement de la bande interdite (IB) (E_-) et de la bande de conduction (E_+) comme il est illustré dans la figure 10.

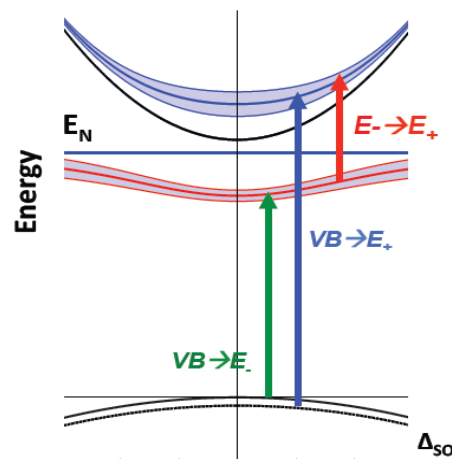


Figure 10: L'interaction avec les états N localisés divise la bande de conduction de matériau origine GaAs (matériau hôte) en sous-bandes de conduction inférieure (E_-) et supérieure (E_+), qui deviennent respectivement IB et CB dans le schéma du dispositif de cellule solaire à bande intermédiaire. Les trois transitions optiques autorisées sont également indiquées [6].

Le tableau 1 présente les paramètres physiques de GaAs et GaAsN utilisés dans la simulation.

matériaux	GaAs (ZB)	GaAsN
<i>Paramètres physiques</i>		
Energie du gap, E_g [eV]	1.42	1.42
Affinité électronique, χ [eV]	4.07	4.07
Densité effective de la bande de conduction, N_c [cm^{-3}]	4.33×10^{17}	4.33×10^{17}
Densité effective de la bande de valence, N_v [cm^{-3}]	1.28×10^{19}	1.28×10^{19}
Mobilité électronique, μ_n [$\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$]	8500 ^l	8500 ^l
Mobilité des trous, μ_p [$\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$]	400	400
Permittivité relative, ϵ_r	12.5	12.5

Tableau 1: Les paramètres physiques de GaAs et GaAsN [15] [16] [17].



Le tableau 2 regroupent respectivement les paramètres technologiques tels que la position énergétique de la bande intermédiaire (E_i), la concentration (N_i), l'épaisseur (x_i) de la couche absorbante GaAsN, ainsi que le dopage et l'épaisseur des couches base et émetteur.

Couches	Paramètres	Valeurs par défaut	Etendu de variation
Couche émettrice p-GaAs	Dopage (cm^{-3})	1×10^{16}	$1 \times 10^{16} - 1 \times 10^{18}$
	Epaisseur (nm)	50	5-200
Couche absorbante (région IB) n-GaAsN	Niveau énergétique de la bande intermédiaire E_i (eV)	0.5	0.1-0.8
	Concentration de la bande intermédiaire N_i (cm^{-3})	1×10^{16}	$1 \times 10^{14} - 1 \times 10^{20}$
	Epaisseur x_i (nm)	6000	300-6000
Couche base n-GaAs	Dopage (cm^{-3})	1×10^{16}	$1 \times 10^{16} - 2 \times 10^{17}$
	Epaisseur (nm)	3000	300-3000

Tableau 2: Valeurs des paramètres utilisés pour la modélisation et la simulation numérique de la cellule solaire à base de GaAsN.

6.1 ETUDE DE L'INFLUENCE DE LA BANDE INTERMEDIAIRE

6.1.1 Effet de la densité et du niveau énergétique de la bande intermédiaire (IB) sur les grandeurs photovoltaïques

La cellule solaire GaAs conventionnelle a été étudiée et optimisée. Elle présente les grandeurs de sortie tels que : $J_{sc} = 29.42 \text{ mA/cm}^2$, $V_{oc} = 0.77 \text{ V}$ et $\eta = 19.32 \%$, pour des paramètres technologiques optimisés.

Dans le cas de l'étude de l'IBSC GaAsN, nous définissons les paramètres tels que l'épaisseur de l'émetteur (p-GaAs) et la base (n-GaAs) sont de 50 nm et 3 μm , respectivement. Le dopage de l'émetteur (p-GaAs) et la base (n-GaAs) sont de $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ et $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, respectivement. L'épaisseur x_i de la couche absorbante (n-GaAsN) est de 2 μm .

La figure 11 montre l'évolution des paramètres photovoltaïques en fonction de la densité N_i de la bande intermédiaire (IB) pour différents niveaux énergétiques E_i de la bande intermédiaire (IB) de la couche absorbante (n-GaAsN).

Le niveau énergétique E_i de la bande intermédiaire IB est fixé au-dessous du minimum de la bande de conduction E_c .



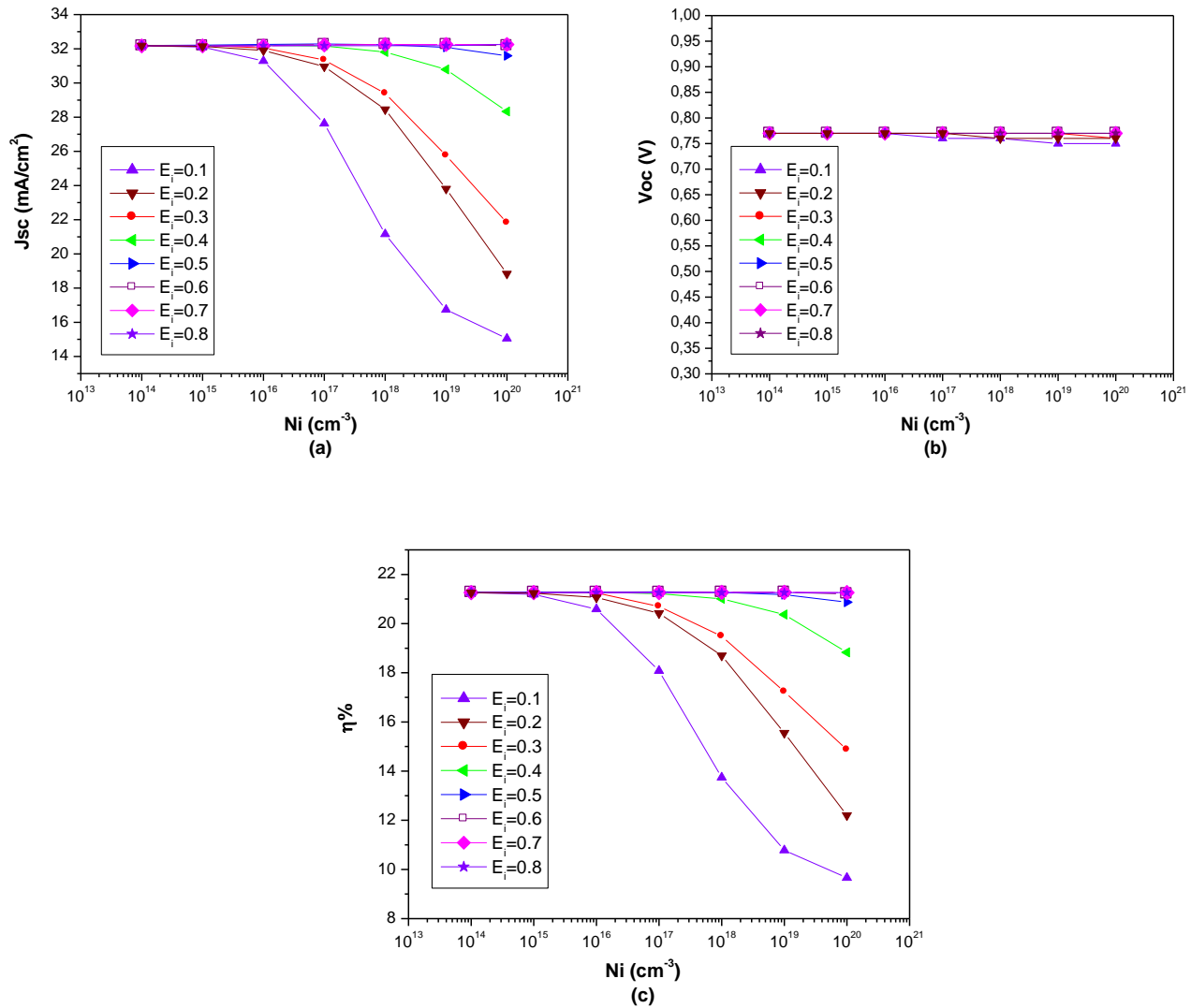


Figure 11: Variation des paramètres photovoltaïques en fonction de la densité N_i de la bande intermédiaire avec différents niveaux énergétique de la bande intermédiaire E_i de la couche absorbante (n-GaAsN).

(a) – Densité de courant de court-circuit J_{sc} , (b) - Tension de circuit ouvert V_{oc} ,

(c) – Rendement de conversion η .

Nous observons à partir des résultats de simulation que pour les niveaux énergétiques au-dessous de la bande de conduction, $E_i = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4$ et 0.5 eV, la densité de court-circuit J_{sc} et le rendement η commencent à diminuer à partir d'une densité de la bande intermédiaire $N_i = 1 \times 10^{16}$ cm^{-3} . Plus précisément, pour $E_i = 0.1$, la densité de court-circuit J_{sc} et le rendement η commence à diminuer à partir de la densité $N_i = 1 \times 10^{15}$ cm^{-3} . Ceci est justifié par le fait que cette cellule ne fonctionne que si la bande intermédiaire est partiellement remplie. Si la bande est pleine, l'absorption entre la bande de valence et la bande intermédiaire est impossible car celle-ci ne peut plus accepter d'électrons. Si la bande intermédiaire est vide, aucune absorption n'est possible entre



elle et la bande de conduction ^[14]. Dans la suite de notre simulation on fixera la concentration de la bande intermédiaire Ni à $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$.

Pour mieux voir l'influence du niveau énergétiques E_i de la bande intermédiaire IB, on a étudié l'évolution des paramètres de sortie de la cellule J_{sc} , V_{oc} et η en fonction de E_i (Figure 12).

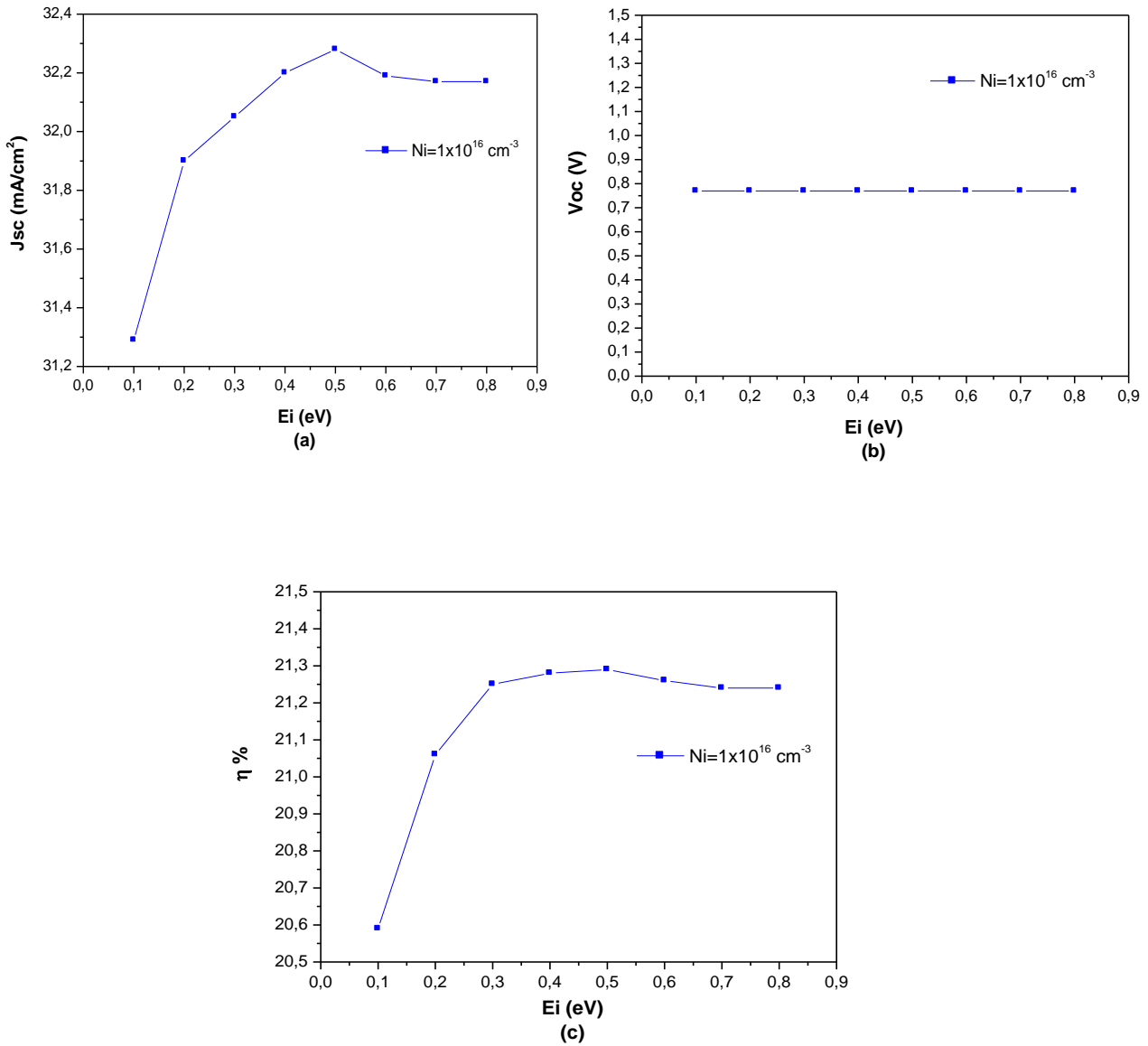


Figure 12: Variation des paramètres photovoltaïques en fonction du niveau énergétique de la bande intermédiaire E_i de la couche absorbante (n-GaAsN).

(a) - Densité de courant de court-circuit J_{sc} , (b) - Tension de circuit ouvert V_{oc} , (c) – Rendement de conversion η .



On remarque que lorsqu'on augmente le niveau d'énergie E_i de 0.1 eV à 0.50 eV, la densité de courant de court-circuit J_{sc} et le rendement de conversion η augmentent jusqu'à leurs valeurs maximales 32.28 mA/cm² et 21.29%, respectivement, puis ils diminuent au-delà de 0.50 eV. Les résultats de simulation montrent que la meilleure position du niveau énergétique E_i de la bande intermédiaire (IB) est à 0.50 eV. On peut conclure que la position énergétique de la bande intermédiaire a une influence sur le courant de court-circuit J_{sc} et par la suite sur le rendement de conversion de la cellule solaire.

La tension de circuit ouvert reste invariante du fait que la tension de fonctionnement est déterminée par la bande interdite la plus grande.

6.1.2 Effet de l'épaisseur de la couche absorbante (n-GaAsN)

La figure 13 montre l'évolution des paramètres photovoltaïques en fonction de l'épaisseur x_i de la couche absorbante (n-GaAsN). Dans ce cas, nous définissons les paramètres de l'IBSC basés sur GaAsN, tels que l'épaisseur de la couche émettrice (p-GaAs) et la base (n-GaAs) de 50 nm et de 3 μ m, respectivement. Le dopage de la couche émettrice (p-GaAs) et de la couche base (n-GaAs) sont de 1×10^{16} cm⁻³.

Le niveau énergétique E_i de la bande intermédiaire IB est fixé à 0.5 eV au-dessous du minimum de la bande de conduction E_c avec une concentration $N_i = 1 \times 10^{16}$ cm⁻³.



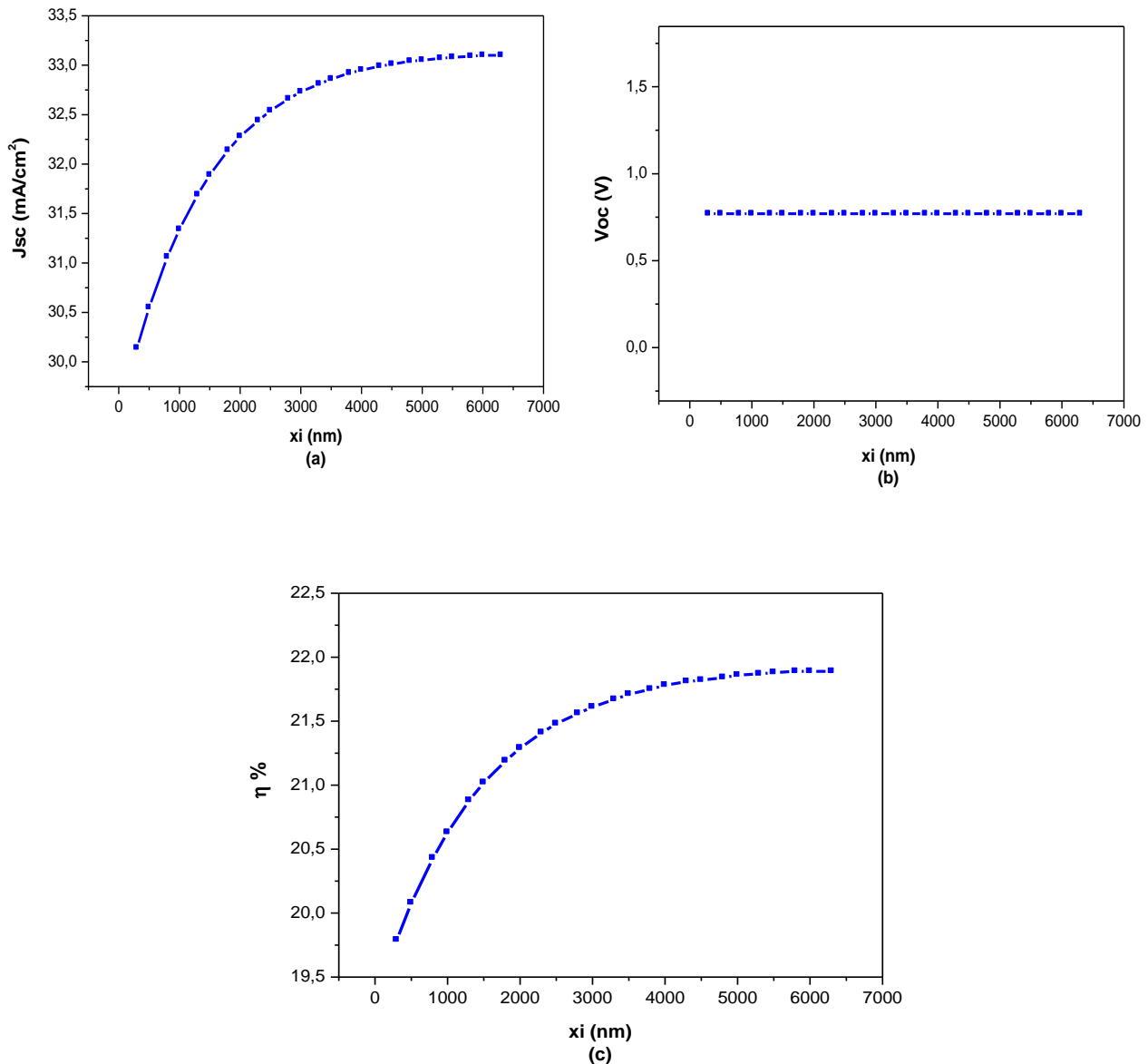


Figure 13: Variation des paramètres photovoltaïques en fonction de l'épaisseur ξ de la couche absorbante (n-GaAsN).

(a) – Densité de courant de court-circuit J_{sc} , (b) - Tension de circuit ouvert V_{oc} , (c) – Rendement de conversion η .

Nous observons de la figure 13, que la densité de courant de court-circuit J_{sc} et le rendement η augmentent avec l'épaisseur de la couche absorbante, ils se stabilisent à partir d'une épaisseur de 5000 nm. La tension de circuit ouvert V_{oc} est quasi constante. La couche absorbante qui contient la bande intermédiaire (IB) doit être suffisamment épaisse pour assurer la pleine absorption des photons.

Le meilleur rendement de conversion ($\eta = 21.89\%$) est obtenu pour une épaisseur $\xi = 6000$ nm de la couche absorbante.



6.2 EFFET DES PARAMETRES TECHNOLOGIQUES DE L'EMETTEUR (P-GaAs)

La figure 14 montre l'évolution des paramètres photovoltaïques en fonction de l'épaisseur de l'émetteur (n-GaAs) pour différentes concentration du dopage Na. Dans ce cas, nous définissons les paramètres de l'IBSC basés sur GaAsN, tels que l'épaisseur de la couche absorbante (n-GaAsN) et la base (n-GaAs) sont de 6 μm et 3 μm , respectivement et le dopage de la couche base (n-GaAs) est de $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$.

Le niveau énergétique E_i de la bande intermédiaire IB est fixé de 0.5 eV au-dessous du minimum de la bande de conduction E_c avec une densité $N_i = 1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$.

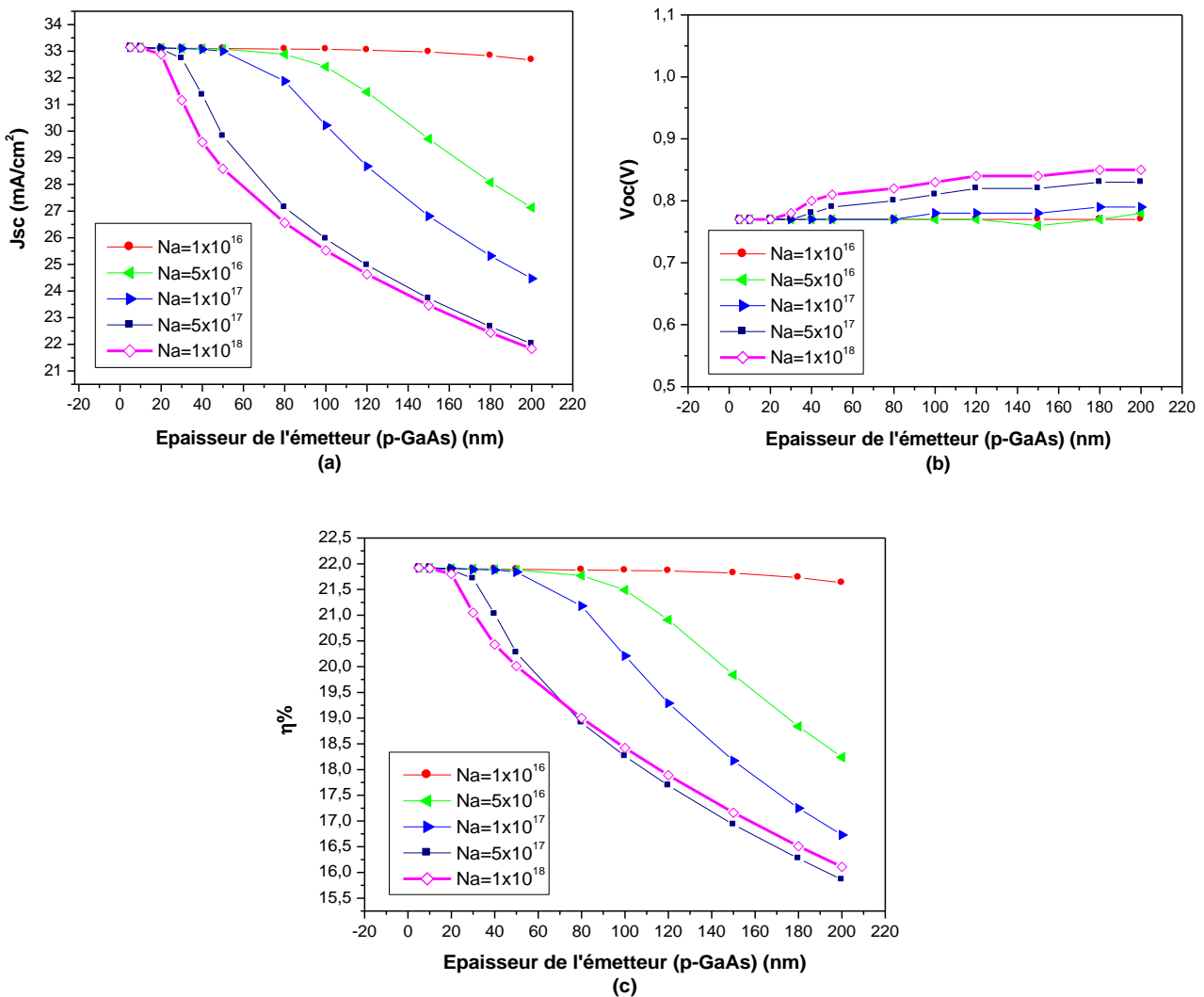


Figure 14: Variation des paramètres photovoltaïques en fonction de l'épaisseur de l'émetteur (p-GaAs) avec différentes concentrations du dopage Na.

(a) – Densité de courant de court-circuit J_{sc} , (b) - Tension de circuit ouvert, V_{oc} , (c) - Rendement de conversion η .



Nous observons de la figure 14 que la densité de courant de court-circuit J_{sc} diminue au fur et à mesure que le dopage et l'épaisseur de la couche émetteur (p-GaAs) augmentent. Pour les faibles épaisseurs de l'émetteur, les porteurs minoritaires photogénérés atteignent facilement la région d'appauvrissement et peuvent donc contribuer au photocourant total. Mais si l'épaisseur de l'émetteur augmente, ces photoporteurs se recombinent avant d'atteindre cette zone et le photocourant diminue.

La tension de circuit ouvert V_{oc} augmente légèrement avec l'épaisseur et augmente significativement avec le dopage N_a .

Le rendement η diminue au fur et à mesure que l'épaisseur et le dopage de la couche émettrice (p-GaAs) augmente.

Le meilleur rendement de conversion ($\eta = 21.91\%$) est obtenu pour un dopage de $1 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ et une épaisseur de 20 nm de la couche émetteur (p-GaAs).

6.3 EFFET DES PARAMETRES TECHNOLOGIQUES DE LA BASE (N-GaAs)

La figure 15 montre l'évolution des paramètres photovoltaïques en fonction de l'épaisseur de l'émetteur (n-GaAs) pour différentes concentrations du dopage N_d . Dans ce cas, nous définissons les paramètres de l'IBSC basés sur GaAsN, tels que l'épaisseur de la couche émettrice (p-GaAs) et de la couche absorbante (n-GaAsN), sont de 20 nm et 6 μm , respectivement. Le dopage de la couche émetteur (n-GaAs) est de $1 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$.

Le niveau énergétique E_i de la bande intermédiaire IB est fixé à 0.5 eV au-dessous du minimum de la bande de conduction E_c avec une densité $N_i = 1 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$.



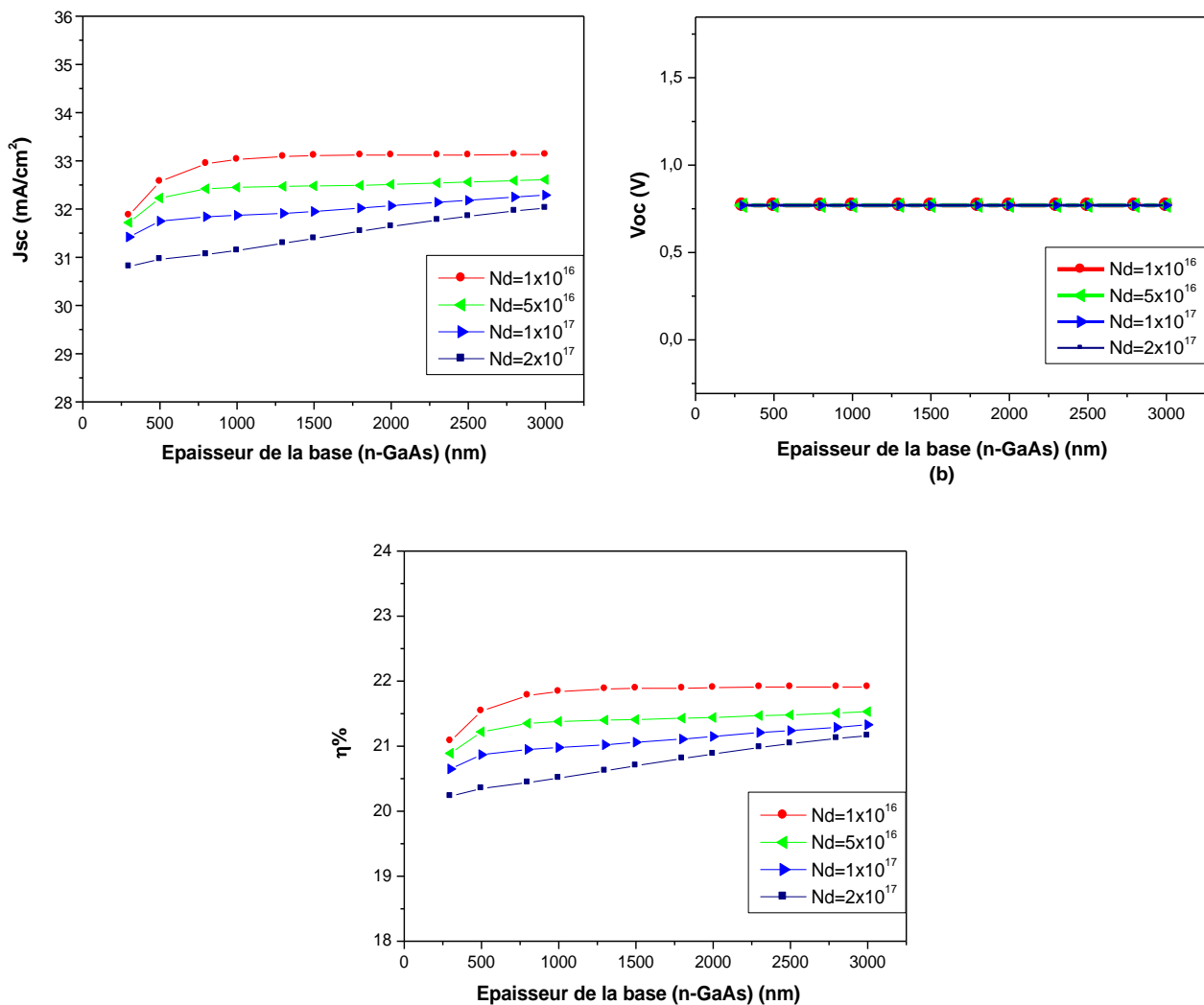


Figure 15: Variation des paramètres photovoltaïques en fonction de l'épaisseur de la base (n-GaAs) avec différentes concentrations du dopage Nd.

(a)– Densité de courant de court-circuit Jsc, (b) - Tension de circuit ouvert, Voc, (c) - Rendement de conversion η .

Nous observons de la figure 15 que la densité de courant de court-circuit Jsc et le rendement η augmentent avec l'épaisseur de la couche base n-GaAs et diminuent avec l'augmentation du dopage.

La tension de circuit ouvert Voc reste constante sur toute la plage de variation du dopage et de l'épaisseur.

Le meilleur rendement de conversion ($\eta = 21.91\%$) est obtenu pour un dopage et une épaisseur de la couche base (n-GaAs) de 1×10^{16} cm⁻³ et de 3 μ m, respectivement.



6.4 ETUDE DE LA CARACTERISTIQUE J-V

La valeur optimale de la concentration de la bande intermédiaire (IB) N_i , du niveau énergétique E_i et de l'épaisseur de la couche absorbante GaAsN sont estimés dans les simulations précédentes avec $E_i=0.5$ eV, $N_i = 1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ et $x_i = 6000\text{nm}$. Ce sont les paramètres essentiels pour qui ont déterminé la performance d'une cellule solaire à bande intermédiaire (IBSC). L'effet de la bande intermédiaire dans la couche absorbante sur la caractéristique $J(V)$ dans la cellule solaire à bande intermédiaire est présenté dans la figure 16, la densité du courant de court-circuit J_{sc} augmente en comparaison avec une cellule GaAs conventionnelle sans bande intermédiaire (IB), la tension de circuit ouvert V_{oc} est quasi constante.

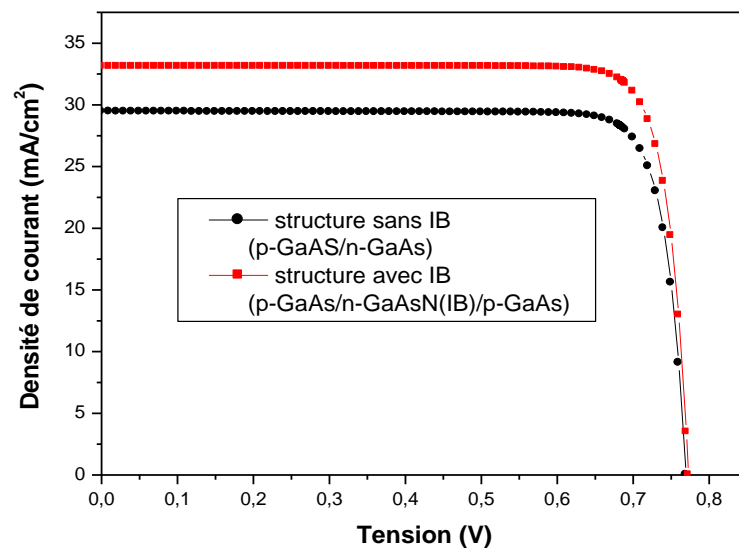


Figure 16: Caractéristique $J(V)$ d'une cellule solaire avec bande intermédiaire (p-GaAs/n-GaAsN(IB)/n-GaAs) et une cellule solaire sans bande intermédiaire (p-GaAs/n-GaAs) sous l'éclairement AM 1.5.

La densité du courant de court-circuit (J_{sc}) est plus élevée pour une cellule solaire à base de GaAsN (avec IB) en comparaison à celle d'une cellule solaire à base de GaAs (sans IB) comme illustre la figure 16. On peut dire aussi que la densité du courant de court-circuit (J_{sc}) augmente en raison de l'absorption additionnelle de la bande intermédiaire (IB). Les cellules solaires à bande intermédiaires fournissent une augmentation de l'absorption en raison d'absorptions supplémentaires à la fois due à l'absorption de la bande de valence (BV) à la bande intermédiaire (IB) et celle de la bande intermédiaire (IB) à la bande de conduction (BC). Par conséquent, dans ce type de cellules, le courant de court-circuit (J_{sc}) peut être augmenté. La tension de circuit ouvert reste invariante du fait que la tension de fonctionnement est déterminée par la bande interdite la plus grande (schéma électrique de la figure 2).



6.5 RENDEMENT QUANTIQUE

Nous avons également simulé le rendement quantique en fonction de la longueur d'onde. Le rendement quantique externe, EQE , est défini comme le rapport du nombre de paires électrons - trous, au nombre de photons incidents, un EQE de 100% indique que chaque photon incident donne lieu à un électron qui contribue aux flux.

Le rendement quantique interne, IQE , est défini comme le rapport du nombre de paires électrons-trous collectés, au nombre de photons absorbés. Contrairement à l' EQE , les photons qui sont perdus par réflexion ou par transmission ne comptent pas.

La figure 17 illustre l' IQE en fonction de la longueur d'onde. Le but recherché est d'avoir une cellule solaire à IQE le plus élevé possible sur un large spectre ^[5,13]. La figure montre que la cellule solaire à bande intermédiaire fournit une large réponse spectrale par rapport à la cellule solaire sans bande intermédiaire. L'existence de la bande intermédiaire fournit une large réponse spectrale au spectre solaire par l'intermédiaire de trois transitions optiques (de la bande de valence à la bande de conduction, de la bande de valence à la bande intermédiaire, et de la bande intermédiaire à la bande de conduction) et par conséquent un rendement plus élevé ^[18]. L'obtention de trois transitions optiques non seulement fournit un rendement plus élevé et une augmentation du spectre solaire mais réduit également des déperditions d'énergies dues à la relaxation thermique des porteurs optiquement excités.

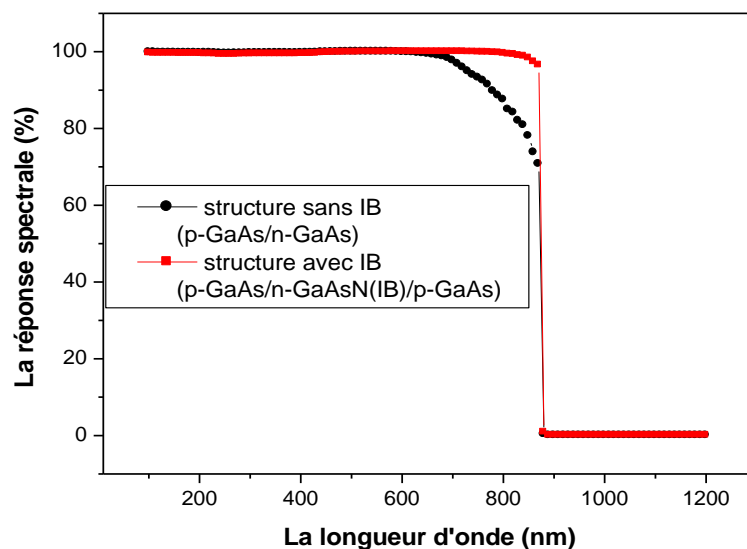


Figure 17: Rendement quantique en fonction de la longueur d'onde d'une cellule solaire à bande intermédiaire p-GaAs/n-GaAsN(IB)/n-GaAs et une cellule solaire conventionnelle p-GaAs /n-GaAs.



Les paramètres technologiques optimisés pour cette structure à base de GaAsN sont résumés dans le tableau suivant (Tableau 2).

Couches	Paramètres	Valeurs
Couche émettrice p-GaAs	Dopage (cm ⁻³)	1×10 ¹⁷
	Epaisseur (nm)	20
Couche absorbante (région IB) n-GaAsN	Niveau énergétique de la bande intermédiaire E _i (eV)	0.5
	Concentration de la bande intermédiaire N _i (cm ⁻³)	1×10 ¹⁶
	Epaisseur x _i (nm)	6000
Couche base n-GaAs	Dopage (cm ⁻³)	1×10 ¹⁶
	Epaisseur (nm)	3000

Tableau 2: Les paramètres optimisés de l'IBSC à base de GaAs_{0.96}N_{0.04}.

- Estimation de la valeur de la fraction d'Azote (x, N) de l'alliage GaAs_{1-x}N_x pour E_i=0.5 eV

Dans notre étude, les résultats de simulation ont montré que la meilleure valeur du niveau d'énergie E_i de la bande intermédiaire (IB) est à 0.50 eV. Pour estimer la fraction d'azote (x, N) du matériau GaAsN correspondant à ce niveau énergétique, nous nous sommes basés sur l'étude de la variation de la transition d'énergie fondamentale de la bande interdite dans GaAsN en fonction de la fraction d'azote (x, N) des travaux de I. Vurgaftman and J. R. Meyer illustré à la figure 18.

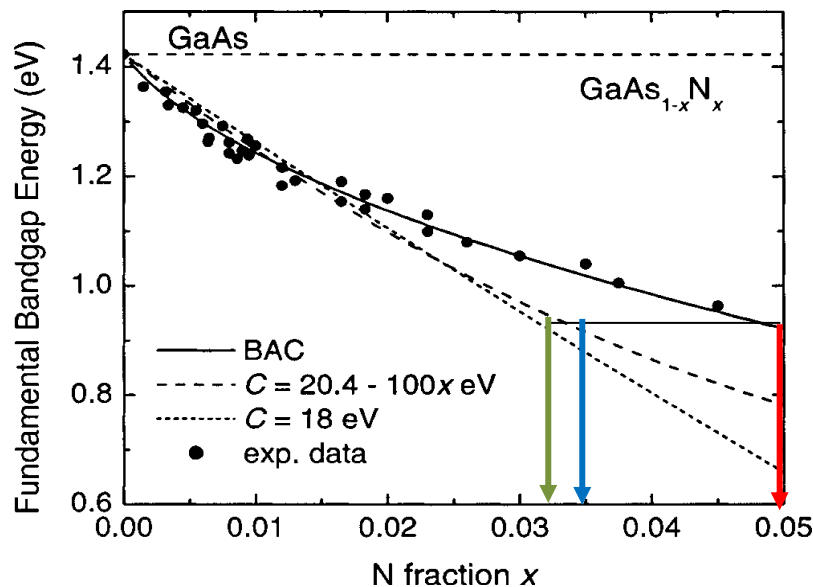


Figure 18: l'énergie de la transition fondamentale de la bande interdite dans GaAsN en fonction de la fraction d'azote x^[19].



La figure 18 représente l'énergie de la transition fondamentale de la bande interdite dans le GaAsN en fonction de la fraction d'azote x , un modèle de BAC, un modèle où le paramètre de courbure C est en fonction de x ($C=20.4-100x$ eV), un modèle où le paramètre de courbure C est constant ($C=18$ eV) et des données expérimentales.

L'énergie du gap de GaAs $E_{g_{GaAs}}=1.42$ eV, le niveau énergétique de la bande intermédiaire E_i est à 0.5 eV du matériau GaAsN (transition d'énergie de 0.5 eV à partir de la bande de conduction du matériau hôte GaAs). Dans ce cas l'énergie du gap du GaAsN est $E_{g_{GaAsN}}= E_{g_{GaAs}}-E_i =0.92$ eV. A partir de la figure 12 on peut estimer la valeur de la fraction d'azote x pour $E_{g_{GaAsN}}=0.92$ eV, soit :

- ✓ $x=0.05$ pour le modèle du BAC et les données expérimentales (courbe solide et cercle).
- ✓ $x=0.035$ pour un paramètre de courbure $C=20.4-100x$ eV (courbe pointillé).
- ✓ $x=0.032$ pour un paramètre de courbure $C=18$ eV (courbe en petit pointillé).

Nous présentons dans le tableau 3 des résultats expérimentaux obtenus dans la littérature pour des cellules simple jonction à base de GaAsN comparés aux cellules simple jonction à base de GaAs et nos résultats qui restent purement théoriques mais qui donnent une indication sur le haut rendement qui peut être obtenu au cas où une amélioration dans la technologie du GaAsN sera faite.

Structures	Jsc (mA)	Voc (V)	η (%)	FF
GaAs (structure P-N à couche mince) ^[20]	24.2	0.98	18.1	0.76
GaAs structure P-N (nos résultats)	29.42	0.77	19.32	0.83
GaAsN (CBE) (structure pn GaAsN avec N=0.85%) ^[21]	15.04	0.662	7.18	0.65
GaAsN (CBE) (structure n ⁺ -GaAs/n-GaAsN/p-GaAsN avec N=0.71% et un contact avant schottky) ^[22]	16.52	0.66	7.1	0.65
IBSC à base de GaAsN (nos résultats)	33.28	0.77	21.92	0.87

Tableau 3: Paramètres de sortie rapportés dans la littérature pour des cellules simple jonction de GaAsN comparés aux cellules simple jonction de GaAs et à bande intermédiaire à base de GaAsN de nos résultats.



7. CONCLUSION

Le travail présenté dans ce chapitre concerne l'étude de cellules solaires à bande intermédiaire IBSC à base de GaAsN. L'objectif principal étant d'optimiser les paramètres technologiques de la cellule photovoltaïque proposée et, par la suite, ses paramètres de sortie.

Les résultats de simulations de cet approche montrent que la structure à bande intermédiaire fournit une amélioration considérable du courant de court-circuit et du rendement de conversion par rapport à la structure sans bande intermédiaire, et aucun changement de la tension de circuit ouvert n'est observé. La conception de la cellule étudiée semble prometteuse, les paramètres clés du succès de cette approche sont:

- le choix de la position énergétique et la concentration de la bande intermédiaire implique le choix de la fraction d'azote (x , N%) du GaAsN joue un rôle très important pour avoir les résultats souhaitables.
- La couche absorbante (GaAsN) qui contient la bande intermédiaire (IB) doit être suffisamment épaisse pour assurer la pleine absorption des photons.
- Il est nécessaire de minimiser l'épaisseur de la couche émettrice (P-GaAs) pour que les porteurs minoritaires photogénérés atteignent facilement la région d'appauvrissement et peuvent donc contribuer au photocourant total.
- Il est nécessaire d'augmenter l'épaisseur de la couche base (n-GaAs) et de minimiser son dopage.

Enfin, nous avons obtenu un rendement de conversion maximale de 21,92% dans cette étude préliminaire pour IBSC à base GaAsN.

Comme perspective, afin d'atteindre un rendement plus élevé, prévu par la théorie, nous suggérons de travailler avec le GaN comme matériau hôte à la place de GaAs avec des fractions d'Arsenic comme niveaux défauts.



REFERENCES

- [1] **A. Luque and A. Martí**, Phys. Rev. Lett. 78 5014-5017, (1997).
- [2] **Y. Okada, N. J. Ekins-Daukes, T. Kita et al.**, Appl. Phys. Lett. 105, 011120; 10.1063/1.4889805, (2014).
- [3] **K. McKenzie**, Thèse de Doctorat : "Development of Intermediate Band Solar Cell through InGaN Quantum Well Structures", Université de Arkansas, Fayetteville (2017).
- [4] **D. Suchet et al.**, "Analytical optimization of intermediate band systems: Achieving the best of two worlds", (2018). DOI: 10.1002/pip.3020.
- [5] **S. Khelifi**, Thèse de Doctorat : "Optimisation des paramètres photovoltaïques d'une cellule solaire réalisée à partir de matériaux ternaires ou quaternaires basés sur les semiconducteurs II-VI", Université de Sidi bel abbès, Algérie (2016).
- [6] **Luce Alexander Vallejo**, these de doctorat : " Engineering Dilute Nitride Semiconductor Alloys for Intermediate Band Solar Cells" , Université de California, Berkeley (2015)
- [7] **Tooru Tanaka, Kin M Yu, Alejandro X Levander, et al.** "Demonstration of ZnTeO Intermediate Band Solar Cell". Japanese Journal of Applied Physics, 50(8):082304, August (2011).
- [8] **N López, L A Reichertz, K M Yu, K Campman, and W Walukiewicz**, "Engineering the electronic band structure for multiband solar cells". Physical Review Letters, 106(2):028701, (2011).
- [9] **J C Harmand, G Ungaro, L Largeau, et G Le Roux**. "Comparison of nitrogen incorporation in molecular-beam epitaxy of GaAsN, GaInAsN, and GaAsSbN". Applied Physics Letters, 77(16):2482–2484, (2000).
- [10] **Arto Aho**, thèse de doctorat : "Dilute Nitride Multijunction Solar Cells Grown by Molecular Beam Epitaxy", Université Tampere de Technologies, Tampere, Finland (2015).
- [11] **Antonio Martí and Antonio Luque**, "Fundamentals of Intermediate Band Solar Cells". pages 209–228, (2012).
- [12] **"AMPS Manual"**, The Electronic Materials and Processing Research Laboratory at the Pennsylvania State University, University Park, Pennsylvania, Pennsylvania State University, (2007).
- [13] **H. Mathieu and H. Fanet**, "Physique des semiconducteurs et des composants électroniques", 6e ed., Dunod, (2009)
- [14] **Y. Okada**, "Intermediate band solar cells: Recent progress and future directions", Applied Physics Reviews 2, 021302 (2015). doi: 10.1063/1.4916561.
- [15] **M. Levinstein, S. Rumyantsev and M. Shur**, "Handbook Series on Semiconductor Parameters" vol. 1,2 , World Scientific, London, (1996).
- [16] **B. Boittiaux**, "Cours d'électronique: Les composants semiconducteurs", 2ème édition, TEC & DOC (EDITIONS) , (1995).
- [17] **S. W. Koch**, "Microscopic Theory of Semiconductors: Quantum Kinetics", Confinement and Lasers, 212, World Scientific, (1995).
- [18] **W. Wang, A S. Lin, et J. D. Phillips**, J. Appl. Phys. Lett. 95, 011103, (2009).
- [19] **I. Vurgaftman, J. R. Meyer, and L. R. Ram-Mohan**, J. Appl. Phys., 89, 5815-5875, (2001).
- [20] **Lee, K., Zimmerman, J. D., Hughes, T. W. & Forrest, S. R.**, " Non-destructive wafer recycling for low-cost thin-film flexible optoelectronics", Adv. Funct. Mater. 24, 4284–5291, (2014).
- [21] **Masafumi Yamaguchi, Boussairi Bouzazi et al.**, "III-V-N materials for super high-efficiency multijunction solar cells", AIP Conference Proceedings 1477, 24 , (2012). doi: 10.1063/1.4753825.
- [22] **B. Bouzazi, N. Kojima, Y. Ohshita, and M. Yamaguchi**, "Capacitance voltage and Current Voltage Characteristics for the Study of High Background Doping and Conduction Mechanisms in GaAsN Grown by Chemical Beam Epitaxy", Journal of Alloys and Compounds, (2012). doi:10.1016/j.jallcom. 2012.11.007.





PARTIE II

**Simulation et caractérisation du dispositif type
SSD à base du matériau GaN pour l'électronique
TéraHertz**

CHAPITRE 1:

ETAT DES CONNAISSANCES SUR LES SSDS A BASE DE GAN

SOMMAIRE

1. INTRODUCTION	116
2. TECHNOLOGIE THZ	117
2.1 SOURCES THZ	117
2.2 DETECTEURS THZ	120
3. EFFET GUNN	122
3.1 CONCEPT DE L'EFFET GUNN	122
3.2 DIODE GUNN CONVENTIONNELLE ET LIMITATIONS	131
3.3 DISPOSITIFS GUNN PLANAIRES	132
3.4 DISPOSITIF DE COMMUTATION AUTOMATIQUE (SSD)	133
3.5 DIODES A COMMUTATION AUTOMATIQUE SSD A BASE DE GAN	136
4. CONCLUSION	154



1. INTRODUCTION

Un défi existant dans l'électronique à haute fréquence (haute vitesse) est l'utilisation du GaN pour réaliser des dispositifs à semiconducteurs avec l'objectif principal d'obtenir des sources, des amplificateurs et des détecteurs dans la gamme térahertz (THz) ^[1-3]. La longueur d'onde du rayonnement dans la bande térahertz (Rayons T) est située dans le spectre électromagnétique entre les fréquences micro-ondes et infrarouge ($100 \text{ GHz} < f < 10 \text{ THz}$, $3 \text{ mm} > \lambda > 30 \text{ }\mu\text{m}$) ^[4], comme on peut le voir sur la figure 1. En d'autres termes, elle se situe entre les limites des domaines de l'électronique et de l'optique ^[5-7].

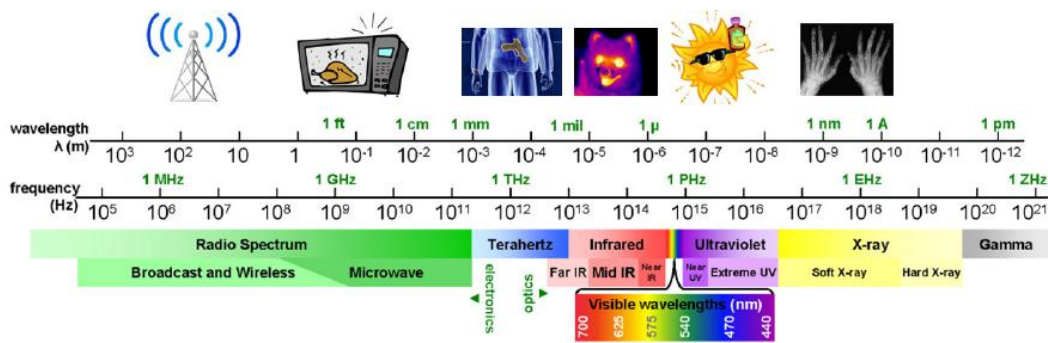


Figure 1: Spectre électromagnétique.

Ces dernières années, cette bande de fréquences a suscité beaucoup d'intérêt scientifique à ses multiples applications potentielles. Une part importante de l'intérêt suscité par le rayonnement THz est due à son degré d'absorption différent par de nombreux matériaux d'intérêt. Par exemple, ce rayonnement est capable de pénétrer dans un grand nombre de matériaux non conducteurs. Il peut traverser des matériaux diélectriques tels que des vêtements, du papier, du carton, du bois, des murs, des objets en plastique et en céramique (molécules non polaires) ^[8]. Le brouillard et les nuages peuvent également être pénétrés, mais ce n'est pas le cas pour le métal, l'eau ou l'ammoniac (molécules polaires). En conséquence, Les longueurs d'onde THz sont considérées comme présentant un grand intérêt pour différentes applications dans divers domaines tels que l'imagerie médicale, la biologie, la sécurité, les télécommunications, la pharmacie, les capteurs, les mécanismes de contrôle de la qualité et dans l'industrie aérospatiale, etc... ^[9-11]. De nombreux efforts sont en cours pour concevoir des dispositifs compacts et à faible coût couvrant cet espace THz. Parmi ces dispositifs, les nanodiodes planaires (SSD) qui sont le sujet de cette partie de dissertation. Les SSD offrent des possibilités intéressantes dans les applications THz pratiques car: (i) elles sont réalisées en une seule étape de nanolithographie en créant simplement des tranchées isolantes dans une couche semiconductrice, (ii) les dispositifs planaires peuvent être agencés en matrices plan focal et (iii) s'ils



sont réalisés avec des semiconducteurs de grande mobilité, ils peuvent atteindre des fréquences de fonctionnement dans la gamme THz à température ambiante. Ces diodes ont été proposées par A. M. Song et al. en 2003 ^[12], peu de temps après, les SSD InGaAs ont démontré une capacité de détection jusqu'à 110 GHz dans une configuration guidée ^[13], et jusqu'à 1.5 THz dans un système à espace libre ^[14] à la température ambiante et même jusqu'à 2.5 THz à 10 K en espace libre ^[15].

Le GaN présente plusieurs caractéristiques qui font de ce semiconducteur un candidat prometteur dans le domaine du TéraHertz tel que sa résistance électrique élevée, directement liée à son grand gap énergétique, sa vitesse de saturation maximale et son faible temps de relaxation par rapport aux autres matériaux III-V généralement utilisés dans les diodes SSD ^[16]. L'utilisation de GaN pour le canal du SSD avait été initialement proposée à des fins d'émission (en générant des oscillations de Gunn ^[17,18]), mais elle a révélé des capacités intéressantes pour la détection de forte puissance ^[19], avec des sensibilités jusqu'à 100 V/W à 0.3 THz avec puissance équivalente de bruit (NEP¹, noise equivalent power) de 280 pW Hz^{-1/2}. Dans une configuration en espace libre, des valeurs de 2.0 et 0.3 V/W ont été obtenues à 0.30 et 0.69 THz ^[20].

Dans le paragraphe suivant, nous allons présenter les différentes techniques de génération des ondes térahertz en mettant l'accent sur les sources électroniques, de même, nous allons présenter les différentes techniques de détection en nous focalisant sur les détecteurs THz fonctionnant à température ambiante.

2. LA TECHNOLOGIE THZ

2.1 SOURCES THZ

L'insuffisance de la technologie THz de nos jours est due au manque de sources compactes basées sur les dispositifs à semiconducteurs capables de fonctionner à température ambiante. En outre, le faible coût, la portabilité et la puissance de ces sources rendraient leurs applications réalisables dans un contexte large. Un bref résumé de ces sources est commodément développé, avec une attention particulière accordée aux propriétés de puissance et de fréquence, discutées ci-dessous.

I. L'une des sources étudiées concerne les multiplicateurs de fréquence. Ceux-ci ont été fabriqués en utilisant différentes technologies et configurations: diode varicap et varistance, diodes varactor à hétéro-barrière (HBVD, hetero-barrier varactor diodes) ou double hétérojonction transistors bipolaires (DHBT, double heterojunction bipolar transistors). En particulier, ceux à base de diodes Schottky GaAs ont été utilisés pendant de nombreuses décennies à des longueurs d'onde submillimétriques. Pour ces diodes Schottky en GaAs, des

¹ La **puissance équivalente de bruit (NEP)** est une mesure de la sensibilité d'un système de détection. Elle est définie comme étant la puissance donnant un rapport signal sur bruit (SNR) de un pour une bande passante de sortie d'un hertz¹. Une bande passante de sortie est l'équivalent d'une demi-seconde en termes de temps d'intégration



améliorations de performances ont été prévues à plus long terme pour les chaînes de multiplicateurs 139 μW (à 1.6 THz) et 32 μW (à 2.4 THz) ^[21], en supposant un fonctionnement à température ambiante et une source de pompage de 150 mW à la bande passante W (75-110 GHz) ^[22]. Avec l'avènement des amplificateurs à ondes millimétriques à base de GaN, des puissances de sortie de 125 mW dans la gamme de fréquences de 270 GHz à 300 GHz ont été produites ^[23]. La puissance de sortie a été multipliée par 1000 par rapport à la technologie GaAs et InP. En considérant les nouveaux développements, ainsi que les progrès récents dans la gestion thermique des multiplicateurs de fréquence ^[24,25], la progression continue avec des amplificateurs de puissance autour de 0.1 THz ou plus ^[24,26], et la perspective de diodes Schottky GaN à tension de claquage élevée pour les multiplicateurs submillimétriques ^[24,27,28]. Il est clair que les sources électroniques cohérentes ont le potentiel de délivrer des milliwatts de puissance monomode accordable bien dans la gamme terahertz.

II. Une autre technologie possible pour atteindre des fréquences dans la gamme THz implique des oscillateurs à transistors ^[22]. La figure 2 résume les résultats de l'état de l'art des amplificateurs de puissance à base de transistors pour oscillateurs et les compare aux dispositifs à deux terminaux actifs sélectionnés dans la plage de fréquences comprise entre 100 et 1000 GHz sans l'utilisation de la combinaison de puissance ^[22].

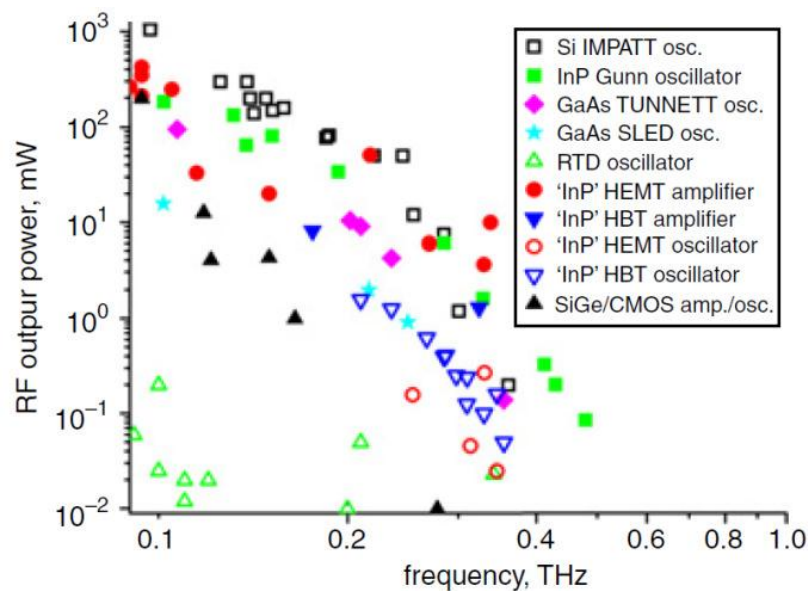


Figure 2: Résultats de l'état de l'art des amplificateurs à transistors, des oscillateurs à transistors et les dispositifs à deux terminaux actifs sélectionnés dans la plage de fréquences comprise entre 100 et 1000 GHz à la température ambiante ^[22].



Les performances des circuits intégrés monolithiques à ondes millimétriques (MMIC, monolithic millimetre-wave integrated circuits) se rapprochent des puissances de sortie, dans la gamme de fréquences 100 GHz-260 GHz, qui jusqu'ici n'ont été possibles qu'avec des diodes à base de silicium (Si) à avalanche à résistance négative aux hyperfréquences (IMPATT, IMPact ionization Avalanche Transit-Time diode) [22, 29, 30]. Les transistors bipolaires à hétérojonction (HBT) InP/InGaAs sont les dispositifs préférés pour les amplificateurs THz et les oscillateurs en comparaison avec les HBT AlGaAs/GaAs, car ils fournissent des fréquences de fonctionnement plus élevées [22].

Le développement rapide de l'électronique radiofréquence nécessite l'introduction de matériaux à large bande interdite tel que le GaN en raison de son potentiel de densité de puissance de sortie élevée, de tension de fonctionnement élevée et d'impédance d'entrée élevée. Au cours de la dernière décennie, les dispositifs RF basés sur du GaN ont connu des progrès considérables dans de nombreux domaines: la croissance des matériaux, la technologie de traitement et la structure des dispositifs à la conception MMIC. La densité de puissance de sortie a atteint 40 W/mm [31], soit plus d'un ordre de grandeur supérieur au GaAs [32].

III. Une autre technologie possible disponible pour travailler dans la gamme THz est celle des dispositifs actifs à deux terminaux (Figure 2 [22]). Ce sont les premiers dispositifs à semiconducteurs à être utilisés dans les oscillateurs hyperfréquences et leur grand avantage est qu'ils sont plus simples à fabriquer par rapport aux dispositifs à trois terminaux. Les dispositifs actifs à deux terminaux génèrent une puissance de sortie en fournissant une résistance différentielle négative (NDR, Negative Differential Resistance) à la fréquence d'intérêt. Les dispositifs pertinents aux ondes submillimétriques sont les diodes à effet tunnel résonnant (RTD, resonant-tunnelling diodes), les dispositifs tunnel à injection et temps de transit (TUNNETT, TUNNEL injection Transit-Time devices), les dispositifs électroniques à super réseau (SLED, super lattice electronic devices) et les dispositifs à électrons transférés (TED, également appelés dispositifs Gunn) [22]. L'accès à la gamme THz à travers le NDR est toujours un problème difficile. À cet effet, les dispositifs Gunn sont également en cours d'exploration. Par exemple, les dispositifs InP Gunn dans un mode de troisième harmonique ont donné 330 mW à 412 GHz et 86 mW à 479 GHz à température ambiante [22]. De plus, des oscillations THz dans une diode Gunn plane submicronique $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ ont été observées pour la première fois, fonctionnant à une fréquence fondamentale supérieure à 300 GHz [33]. De plus, un oscillateur à diodes Gunn planaire basé sur AlGaAs/GaAs avec une fréquence fondamentale de fonctionnement de 120 GHz a été réalisé. Celle-ci représente la fréquence fondamentale la plus élevée pour une diode Gunn à base de GaAs [34].



2.2 DETECTEURS THZ^[35]

La détection dans le régime térahertz revêt une importance particulière pour l'astronomie et la spectroscopie. Alors que la science spatiale a toujours été la principale force motrice, il y a eu un intérêt croissant dans de nouveaux domaines tels que la sécurité et la communication de données. En conséquence, des types de détecteurs existants ainsi que de nouveaux types fonctionnant à des fréquences térahertz sont constamment développés pour une bande passante plus large et un bruit plus faible. La détection à faible bruit en régime térahertz est souvent réalisée à l'aide de détecteurs à bande carrée (square-law- detectors) tels que le détecteur à diode Schottky. Le fonctionnement à polarisation nulle réduit le bruit de $1/f$. Dernièrement, les transistors à effet de champ à structure métal-oxyde-semiconducteur (MOSFET, metal-oxide-semiconductor field-effect transistors) ont été explorés en tant que détecteur térahertz. La diode à commutation automatique (SSD) est un dispositif moins exploré offrant un potentiel de détection térahertz à polarisation nulle. Le SSD génère une relation non linéaire courant-tension (I-V) via un effet de champ. Lorsque le premier SSD a été présenté, il a été décrit comme un transistor à effet de champ avec des canaux de taille nanométrique et des grilles latérales connectées au drain, formant une diode à deux bornes. La caractéristique I-V non linéaire permet la détection en loi carrée et les SSD utilisant le gaz d'électrons bidimensionnel (2DEG) d'hétérostructures III-V ont été utilisés pour la détection directe. Dans des conditions cryogéniques, la détection a été démontrée jusqu'à 2.5 THz à l'aide de diodes SSD InGaAs. À la température ambiante, une détection directe à polarisation nulle a été démontrée jusqu'à 1.5 THz avec des SSD au GaAs et 0.3 THz avec des SSD au GaN.

La figure 3 donne un aperçu de l'état de l'art des NEP (puissance équivalente de bruit) des détecteurs directs à température ambiante. Le détecteur métal-semiconducteur (diode Schottky) a plus de cent ans et fournit aujourd'hui un état de l'art des NEP jusqu'à 1 THz et au-delà, avec une polarisation nulle, dans des configurations quasi optiques et sur plaquette (wafer). Des progrès récents sur les diodes Schottky ont été réalisés avec des contacts semiconducteurs en semi-métal, atteignant un NEP de $0.4 \text{ pW/Hz}^{1/2}$ à 100 GHz. Les diodes Schottky à polarisation nulle ont été intégrées dans des circuits intégrés monolithiquement hyperfréquences (MMIC) et métamorphiques HEMT (mHEMT).



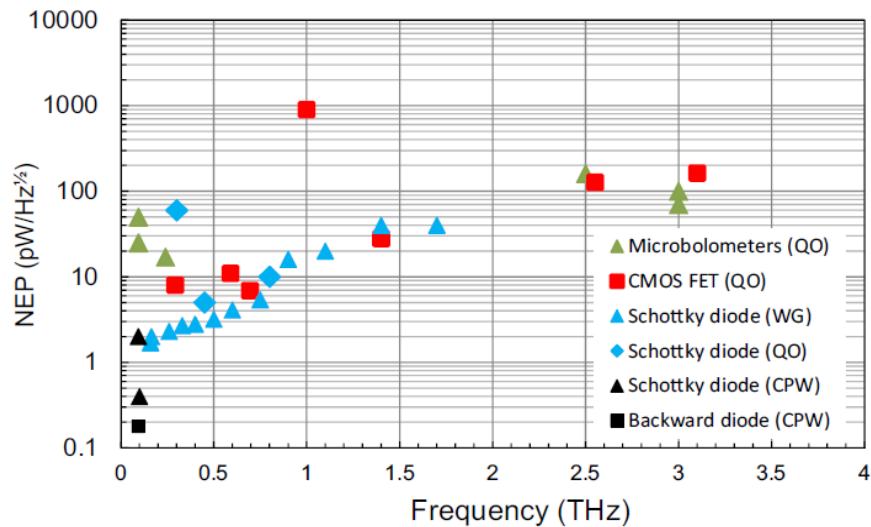


Figure 3: Détecteurs directs térahertz à la température ambiante. Les diodes Schottky montées dans un guide d'onde (WG), dans une configuration quasi-optique (QO), dans des mesures sur tranche (CPW), CMOS FET (QO), microbolomètres (QO) et diodes inversées à hétérostructure^[35].

Les diodes inversées à hétérostructure (Heterostructure backward diodes) produisent des courbures plus grandes que les diodes Schottky, ce qui donne un NEP de $0.18 \text{ pW/Hz}^{1/2}$ mesuré à 94 GHz.

Les microbolomètres fournissent un état de l'art de la détection directe à des fréquences au-delà de 2 THz en mesurant la résistance des éléments sensibles à la température ambiante. Les microbolomètres ont l'inconvénient de nécessiter une polarisation et ont un temps de réponse en millisecondes plus lent que les diodes Schottky.

Au cours des dix dernières années, les transistors à effet de champ à semiconducteurs complémentaires à l'oxyde de métal (CMOS FET, complimentary metal-oxide-semiconductor field-effect transistor) sont devenus des détecteurs prometteurs. Bien que les FET soient polarisés avec une tension de grille, ils montrent un courant à polarisation nul, permettant un faible bruit. Un NEP de quelques centaines de GHz à 4.3 THz a été démontré ces dernières années, ce NEP est proche de celui atteint par la diode Schottky, en utilisant des longueurs de grille modérées de 150 nm. La haute performance et l'intégration facile avec d'autres technologies CMOS s'ouvrent aux réseaux de détecteurs térahertz à faible coût.

Dans cette partie de dissertation, on s'intéresse aux diodes planaires SSD qui se basent dans leur fonctionnement sur l'effet Gunn. Un aperçu sur l'effet Gunn va être présenté dans le paragraphe ci-dessous.



3. EFFET GUNN

En séquence temporelle (tension-temps), l'oscillation de tension qui se produit lorsqu'une tension de polarisation appliquée dépasse un certain seuil s'appelle l'effet Gunn, du nom de son découvreur J. B. Gunn [36]. La fréquence de fonctionnement libre de l'oscillation dépend des propriétés du matériau et de la géométrie du dispositif lui-même. Ceci est dû à l'effet d'électrons transférés présenté par certains semiconducteurs composés binaires et ternaires. Un dispositif à semiconducteurs à deux terminaux qui convertit le courant continu en RF en utilisant cet effet est communément appelé diode Gunn. Le principe de l'effet d'électrons transférés est présenté ici en discutant du transport d'électrons dans les champs bas et haut, de la mobilité différentielle négative et de l'instabilité conduisant à la formation de domaine dans les diodes Gunn.

3.1 CONCEPT DE L'EFFET GUNN

3.1.1 Transfert électronique intervallée

Le transfert électronique intervallée résulte de la forme particulière de la structure de bande de certains semiconducteurs III-V tels que les GaAs, l'InP ou encore le GaN qui est le matériau sur lequel nous avons principalement travaillé. Comme indiqué sur la figure 4, le GaN est un semiconducteur à bande interdite directe, cela se traduit par le fait que le minimum de sa bande de conduction qui est dans sa vallée principale dite gamma (Γ) est dans le même axe que le maximum de sa bande de valence au centre de la zone de Brillouin ($k=0$). Comme on peut le remarquer sur le modèle simplifié de la structure de bandes du würtzite GaN, d'autres vallées encore appelées satellites existent, il s'agit principalement de la vallée M-L et de la vallée A.

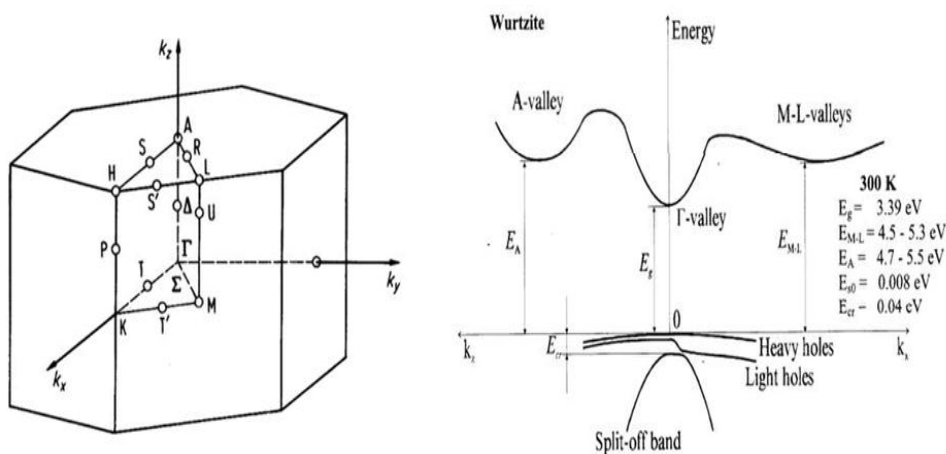


Figure 4: Première zone de Brillouin et structures de bandes du GaN würtzite [16].



A la température ambiante (300 K), la majorité des électrons libres résiduels qui ont acquis de l'énergie due à l'agitation thermique se trouvent dans le bas de la bande de conduction de la vallée gamma. A l'équilibre thermique, la dispersion des électrons engendrée par des collisions multiples avec les atomes du réseau ou des défauts est isotrope d'où un mouvement global nul de l'ensemble des électrons. La vitesse thermique moyenne des électrons est donnée par ^[16]:

$$V_{thermique} = \left(\frac{3kT}{m_{eff}} \right)^{\frac{1}{2}} \quad \text{Eq.1}$$

où m_{eff} est la masse effective des électrons dans le semiconducteur, k la constante de Boltzmann et T la température.

Lorsqu'on applique sur le semiconducteur un champ électrique relativement faible, la force électrostatique qui en découle, force les électrons libres à se déplacer parallèlement au champ électrique, lesquels se déplacent dorénavant avec en plus de la vitesse thermique, la vitesse de dérive (équation 2). Cette vitesse d'entraînement des électrons s'obtient en écrivant l'équation de la conservation de la quantité de mouvement. En prenant en compte le temps moyen entre deux collisions des électrons avec les atomes du réseau ou des défauts dus aux imperfections structurales du cristal, on obtient ^[16]:

$$V_{dérive} = \left(\frac{q\tau_c}{m_{eff}} \right) E \quad \text{Eq.2}$$

τ_c est le temps moyen entre deux collisions consécutives, encore appelé temps de relaxation, q est la charge de l'électron.

La densité de courant de conduction est donnée par ^[16]:

$$J_{conduction} = qnV_{dérive} \quad \text{Eq.3}$$

Où n est le nombre d'électrons libres dans le semiconducteur.

On peut voir dans l'équation de la vitesse de dérive, que cette dernière est proportionnelle au champ électrique appliqué avec une constante que l'on appelle la mobilité μ ^[16] :

$$\mu = \frac{q\tau_c}{m_{eff}} \quad \text{Eq.4}$$

On remarque dans l'équation 4, deux facteurs principaux interviennent dans la mobilité des électrons et donc affectent la vitesse de dérive, et par conséquent le courant de conduction. Le premier est le temps de libre parcours moyen des électrons qui est la conséquence de plusieurs types de collisions, soit avec les phonons (issus de la vibration du réseau), soit avec les impuretés ionisées ou principalement avec les atomes du réseau, il est donc fortement dépendant de la



température. En effet, en augmentant la température, on augmente les vibrations du réseau cristallin et donc les collisions ce qui diminue la mobilité des électrons. Le deuxième facteur qui entre en ligne de compte pour la compréhension de l'effet Gunn est la masse effective des électrons. La masse effective s'obtient à partir de la relation de dispersion entre l'énergie et le vecteur d'onde et est donnée par ^[16]:

$$m_{eff} = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2 E(k)}{d^2 k}} \quad \text{Eq.5}$$

On remarque que la masse effective dépend du tenseur d'ordre 2 des dérivées secondes de l'énergie par rapport au vecteur d'onde, or en géométrie différentielle, nous savons qu'une dérivé d'ordre deux est proportionnelle à une courbure. Dans le cas présent, l'inverse de la masse effective est donc une mesure de la courbure de la structure de bande tel que présenté sur la figure 4. En d'autres termes, plus la courbure de la structure de bande est étroite comme c'est le cas de la vallée centrale, plus la masse effective est petite et donc la mobilité est plus grande. La masse effective est donc liée au niveau d'énergie dans la bande de conduction et on retiendra que dans une bande à forte courbure, on trouve des porteurs de charge dit « légers » alors que dans une bande à faible courbure, les porteurs de charge sont dit « lourds » ^[16].

Dans un semiconducteur, les porteurs de charge ne sont pas distribués uniformément dans le volume, leur mouvement s'effectue donc dans un sens qui tend à uniformiser leur distribution spatiale. En effet, dans un endroit où la concentration en porteurs est très forte, l'interaction entre les porteurs est très grande et la densité d'énergie est plus grande que là où la concentration en porteur est plus faible. Pour établir l'équilibre, les porteurs vont diffuser dans le sens opposé à celui du gradient de concentration (loi de Fick), le flux de porteurs qui résulte de ce mouvement donne naissance à un courant dit de diffusion qui est proportionnel à leur gradient de concentration. Le courant de diffusion est donc proportionnel à la densité de charges via l'équation donnée ci-dessous ^[16].

$$J_{diffusion_n} = -qF_n = qD_n \frac{dn}{dx} \quad \text{Eq.6}$$

Où D_n est le coefficient de diffusion des électrons.

Il est important de mentionner que le courant de diffusion peut être très grand même si la densité de particules est faible. Une relation importante qui relie le coefficient de diffusion D à la mobilité μ est donnée par la relation d'Einstein ^[16]:

$$\frac{\mu}{D} = \frac{q}{k_B T} \quad \text{Eq.7}$$



Quand un champ électrique est appliqué dans un semiconducteur, la densité de courant totale dépend de la diffusion et de la conduction électrique ^[16]:

$$J_{total} = J_{conduction} + J_{diffusion} \tag{Eq.8}$$

$$J_{total} = -\frac{nq^2\tau_c}{m_{eff}} - eD_n \frac{dn}{dx} \tag{Eq.9}$$

Lorsque ce champ électrique est augmenté de façon considérable et atteint une valeur critique qui dépend du matériau, la vitesse des électrons n'est plus proportionnelle au champ électrique appliqué (Figure 5).

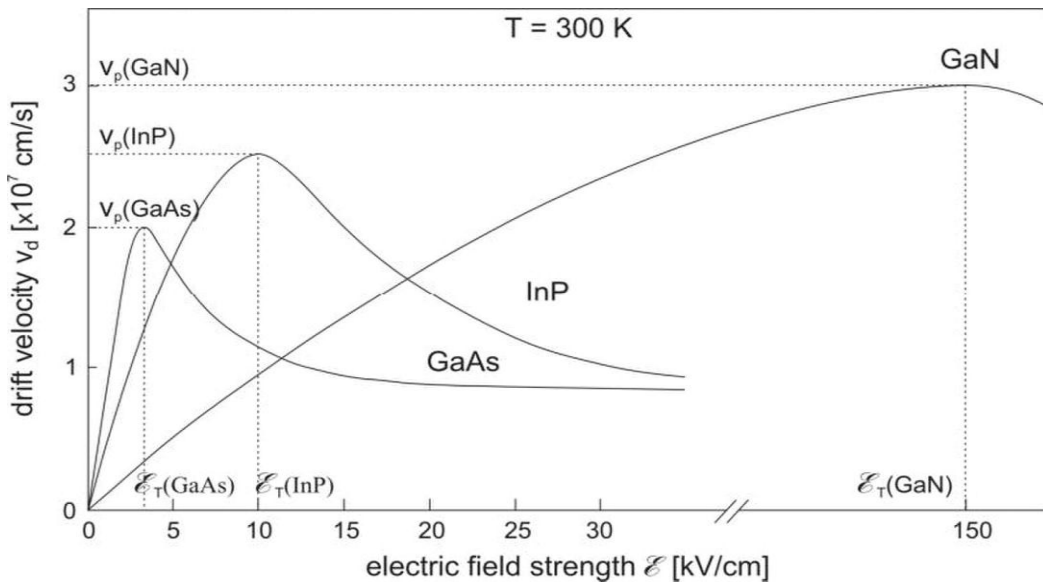


Figure 5: Évolution de la vitesse moyenne de dérive $v_{dérive}$ des électrons à 300 K en fonction du champ électrique E pour le GaAs, l’InP et le GaN ^[37].

La figure 5 montre la vitesse de dérive moyenne en fonction du champ électrique appliqué pour le GaN, le GaAs et l’InP. La vitesse de dérive augmente avec le champ électrique jusqu’à atteindre un champ électrique critique appelé également champ électrique de seuil. Au-delà de ce champ électrique de seuil, le matériau est le siège d’une mobilité différentielle négative et la vitesse de dérive moyenne commence à diminuer. Le champ électrique de seuil est très dépendant du matériau utilisé comme on peut le voir sur la figure 5. Il est de l’ordre de 3.5 kV/cm pour le GaAs, 10 kV/cm pour l’InP et il est compris entre 140-170 kV/cm pour le GaN selon les valeurs rapportées dans la littérature ^[16].



En effet, pour des forts champs électriques, l'énergie cédée par les électrons au réseau cristallin lors des chocs devient trop importante, c'est ce qu'on appelle le phénomène de « porteurs chauds » du fait que les porteurs ne sont plus en équilibre thermique avec le réseau. Dans ce régime de survitesse, les électrons peuvent être amenés à occuper des états d'énergie plus élevés dans la bande de conduction et donc de quitter la vallée centrale pour une vallée satellite. Dans le cas du GaN, matériau utilisé dans nos travaux de thèse, pour que les électrons puissent changer de vallée pour atteindre par exemple la vallée M-L ou encore appelée U, il faut que leur énergie cinétique soit supérieure à l'énergie de transfert intervallée qui est d'environ 1.5 eV^[16]. Conformément à la théorie de la bande d'énergie, pour le matériau GaN, la structure de bande est exposée à la figure 6.

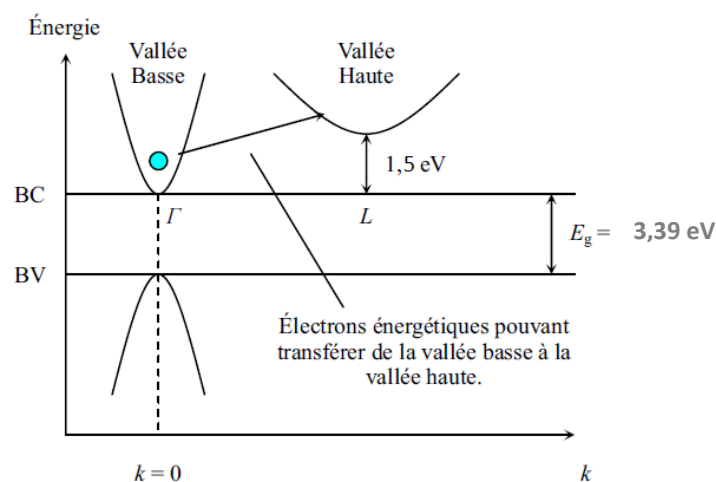


Figure 6: Bande d'énergie en fonction du vecteur d'onde pour le GaN^[38].

Quelques propriétés basiques du nitrure de gallium sont résumées dans le Tableau 1. Afin de pouvoir faire des comparaisons avec d'autres matériaux utilisés pour réaliser des diodes Gunn, nous avons rajouté dans ce tableau les propriétés des matériaux GaAs et InP. Les paramètres importants comme la largeur de bande interdite, l'énergie de séparation entre les différentes vallées satellites et la vallée principale gamma sont marquée en gras.



Paramètres	GaAs	InP	GaN	
Structure cristalline	Zinc blende	Zinc blende	Würtzite	Zinc blende
Paramètres de maille	5.6532(a)	5.8687(a)	3.16-3.19(a) 5.12-5.19(c)	4.52(a)
Conductivité thermique(W/cm.°C)	0.55	0.68	1.3	1.3
Champ électrique de claquage	4×10^5	5×10^5	3.3×10^6	5×10^6
Mobilité électronique ($cm^2/V.s$)	8500	5400	440	1000
Energie du gap à 300K	1.424	1.344	3.39	3.2
Energie de séparation entre la vallée Γ et la vallée satellite L ou $M - L$ (eV)	0.29	0.59	1.1-1.9	1.6-1.9
Energie de séparation entre la vallée Γ et la vallée satellite X ou A (eV)	0.48	0.85	1.3-2.1	1.4
Constante diélectrique statique	12.9	12.5	8.9	9.7
Constante diélectrique dynamique	10.89	9.61	5.35	5.3
Masse effective des électrons dans la vallée central Γ	$0.063m_0$	$0.08m_0$	$0.2m_0$	$0.13m_0$
Affinité électronique (eV)	4.07	4.38	4.1	4.1
Coefficient de diffusion des électrons (cm^2/s)	≤ 200	130	25	25
Densité effective d'états de la bande de conduction	4.7×10^{17}	5.7×10^{17}	2.3×10^{18}	1.2×10^{18}

Tableau 1: Propriétés de base du GaAs , InP et GaN ^[16].

Une fois dans la vallée L , dont la courbure de bande est moins élevée que celle de la vallée gamma, la masse effective des électrons diminue. Non seulement leur masse effective diminue, mais en plus ces électrons sont soumis à un processus de diffusion du à leur gradient (variation spatiale) de concentration ^[16]. La combinaison de ces deux effets explique pourquoi la mobilité dans la vallée L (μ_L) est nettement plus petite que celle dans la vallée principale (μ_Γ), on assiste donc à l'apparition d'une résistance différentielle négative (Figure 7, partie II).

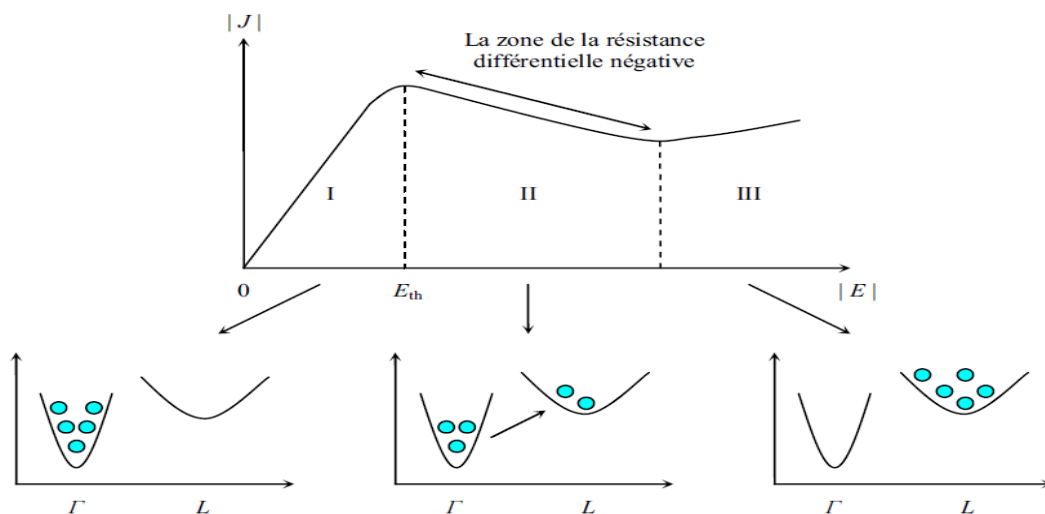


Figure 7: Modèle du transfert intervallée ^[38].



La figure 7 montre le modèle du transfert intervallée. Dans la partie 1, tous les électrons sont situés dans la vallée Γ et la densité de courant est quasiment proportionnelle au champ électrique, avec l'augmentation de la polarisation, nous entrons dans la partie 2. Dans cette partie, une partie des électrons transfèrent de la vallée basse vers vallée haute, où la masse effective des électrons est plus élevée et donc la mobilité des électrons devient plus petite que celle dans la vallée basse. La densité de courant commence à diminuer lorsque nous augmentons la tension appliquée. Donc la partie 2 est la zone où la résistance différentielle est négative. Si nous continuons à augmenter la polarisation, tous les électrons s'accumulent dans la vallée haute et la densité de courant recommence à augmenter.

Considérons maintenant que n_Γ et n_L soient respectivement, la densité d'électrons dans la vallée principale gamma et dans la vallée satellite L, la vitesse moyenne d'entraînement des porteurs peut s'écrire ^[16]:

$$v_{dérive}(E) = \frac{\mu_\Gamma n_\Gamma + \mu_U n_L}{n_\Gamma + n_L} E \quad \text{Eq.10}$$

Pour de forts champ électrique, supérieur à 150 kV/cm ^[16], beaucoup d'électrons ont suffisamment d'énergie pour « sauter » et l'occupation de la vallée satellite L augmente. Définissons donc Φ comme étant l'occupation relative de la vallée L ^[16]:

$$\Phi = \frac{n_L}{n_\Gamma + n_L} \quad \text{Eq.11}$$

Si l'on émet l'hypothèse que la mobilité ne dépend plus du champ électrique, la dérivée de l'équation 10 donne :

$$\frac{dv_{dérive}(E)}{dE} = \mu_\Gamma - (\mu_\Gamma - \mu_L) \left(\Phi + \frac{d\Phi}{dE} E \right) \quad \text{Eq.12}$$

Pour avoir une mobilité différentielle négative, la condition suivante doit être vérifiée:

$$\frac{dv_{dérive}(E)}{dE} < 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{d\Phi}{dE} > \frac{\mu_\Gamma - \mu_L}{E} \Phi \quad \text{Eq.13}$$

La mobilité dans la vallée gamma étant plus grande que celle dans la vallée U, le rapport $\frac{\mu_\Gamma}{\mu_\Gamma - \mu_L}$ est plus grand que 1. L'occupation relative Φ de la vallée U étant, par définition, inférieure à 1, le terme $d\Phi/dE$ sera toujours positif, ce qui montre que l'occupation relative de la vallée L augmente bien avec le champ électrique. L'équation (13) démontre bien que le transfert intervallée peut provoquer l'apparition d'une mobilité différentielle négative.



En résumé, pour que la mobilité différentielle négative puisse apparaître, le matériau semiconducteur doit remplir les conditions suivantes ^[38]:

- L'écart d'énergie ΔE entre le minimum de la vallée principale gamma et le minimum de la vallée secondaire doit être plus grand que l'énergie thermique ($kT= 25$ meV à la température ambiante 300 K) afin d'éviter une occupation des électrons due à l'énergie thermique dans la vallée secondaire sous un faible champ électrique
- La largeur de la bande interdite doit être supérieur à ΔE afin d'éviter l'ionisation par impacts des électrons avant que le transfert intervallée ne commence.
- La masse effective des électrons dans la vallée secondaire doit être plus grande que celle de la vallée principale.
- La mobilité des électrons dans la vallée secondaire doit être plus petite que celle dans la vallée principale.

3.1.2 Instabilité et formation de domaine

Les dispositifs électroniques transférés sont intrinsèquement instables. L'instabilité est due à la formation d'une région de charge d'espace qui croît de manière exponentielle avec le temps en raison d'un petit changement aléatoire de la densité de porteurs dans le semiconducteur. Cette instabilité comme expliqué dans la référence ^[39] est discuté ci-dessous.

Dans un dispositif semiconducteur à dopage uniforme avec une concentration électronique N_D , un processus de bruit ou une variation du niveau de dopage ou certains défauts cristallins peuvent provoquer une fluctuation spontanée de la densité électronique (N). Cette fluctuation spontanée forme un dipôle, consistant en une région d'accumulation et d'appauvrissement avec un gradient de champ électrique. La non-uniformité de la charge d'espace est liée au champ électrique par l'équation de Poisson suivante:

$$q(N - N_D) = \varepsilon_0 \varepsilon_r \frac{dE}{dx} \quad \text{Eq.14}$$

où ε_0 et ε_r sont respectivement la permittivité de vide et relative, et N_D la densité de dopage. Si le champ électrique moyen est inférieur au champ de seuil, les électrons soumis à un champ électrique plus élevé se déplaceront plus rapidement que ceux situés dans la zone de bas champ. La charge d'espace remplirait alors la région d'appauvrissement, ce qui atténuerait les fluctuations dues à la relaxation diélectrique.

Considérons maintenant le cas où le champ électrique appliqué est supérieur au champ électrique de seuil E_T : la vitesse de dérive des électrons diminue dans la région du champ supérieur, entraînant une croissance de la fluctuation de la charge d'espace avec le champ électrique local associé au



temps, comme indiqué dans figure 8. Cette croissance exponentielle du champ électrique se poursuit jusqu'à ce qu'un domaine stable se forme, comme le montre la figure 8 (c). Pour que la chute de tension totale à travers le dispositif reste la même, le champ électrique en dehors du domaine reste en dessous du niveau de seuil, assurant ainsi la stabilité. On peut voir sur la figure 8 (c) que le champ électrique dans le domaine atteint une valeur de crête E_P , alors qu'en dehors du domaine, le champ électrique E_R est inférieur à la valeur de seuil. La charge d'espace présente en raison de la différence de vitesse est stabilisée par l'accommodation dans le champ électrique ($E_R < E_T$) et un domaine stable est formé. De plus, cela signifie que lorsque le domaine est stable, un autre domaine ne se développe pas car E_R reste inférieur à E_T .

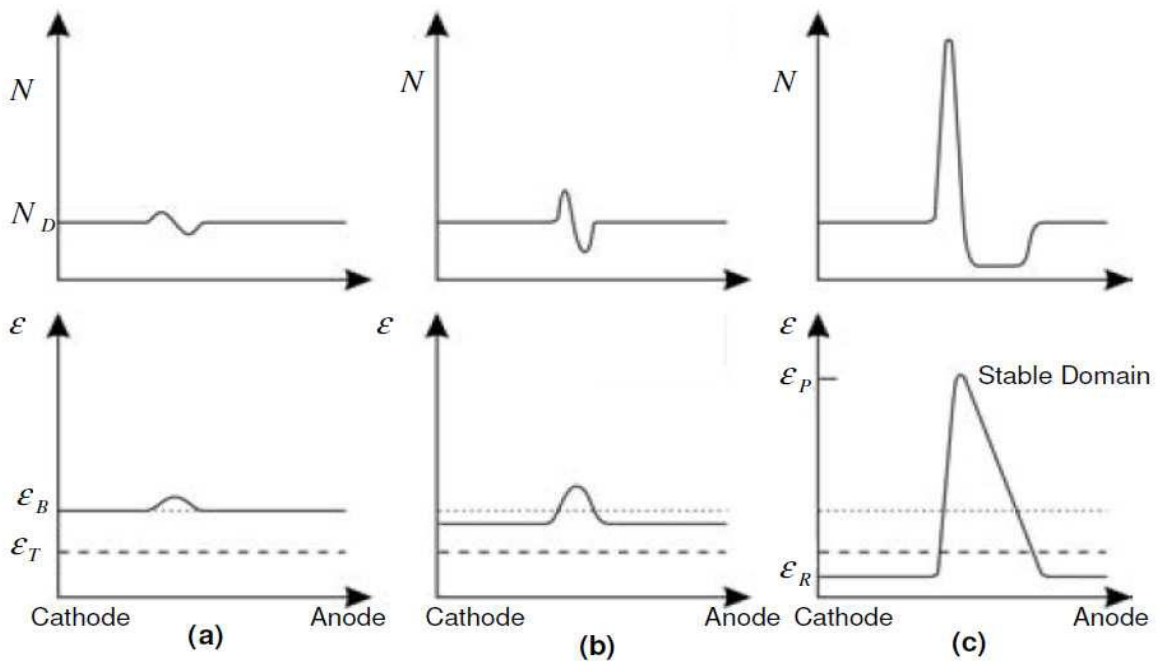


Figure 8: Formation de domaines dipolaires stables avec la croissance de la charge d'espace ^[39].

Le matériau GaN a une grande vitesse de dérive V_D (vitesse pic $\sim 3 \times 10^7$ cm/s). Au fur et à mesure que le domaine se développe, le courant dans un circuit externe diminue en raison de la chute du champ en dehors du domaine. Lorsque le domaine atteint l'anode, le gradient de champ électrique devient nul et le domaine s'effondre. Les valeurs du champ électrique externe et du courant augmentent jusqu'à ce qu'ils atteignent la valeur de seuil et permettent à un autre domaine de se former à la cathode. Le courant externe oscille donc à une fréquence inversement proportionnelle à la longueur de transit l_t (distance entre le point de formation du domaine et l'anode).

La fréquence d'oscillation peut donc s'exprimer par:

$$f_0 = \frac{V_D}{l_t} \tag{Eq.15}$$



3.2 DIODE GUNN CONVENTIONNELLE ET LIMITATIONS

La diode Gunn dans sa forme de base est un dispositif homogène avec des contacts ohmiques à chaque extrémité. Le dispositif a une structure en sandwich et comprend des couches de contact aux extrémités, avec une région de passage entre les deux, comme indiqué sur la figure 9. Comme décrit précédemment, la longueur de la région de transit détermine partiellement la fréquence de fonctionnement du dispositif. Cependant, la formation de domaine dans les diodes Gunn conventionnelles ne se produit pas dans la partie initiale de la région de transit, où les électrons sont accélérés aux niveaux d'énergie requis pour le transfert entre les vallées. Cette partie initiale est appelée la zone morte. Ainsi, la formation de domaine se produit à une certaine distance de la cathode en fonction de la polarisation appliquée. Cela réduit la longueur effective de la région de transit et agit en tant que résistance parasite positive, ce qui dégrade la résistance négative globale et entraîne une réduction du rendement de conversion DC-RF. Généralement, la longueur de la zone morte est d'environ 40% de la longueur de transit dans les dispositifs à haute fréquence ^[40]. La tension appliquée détermine le point de nucléation du domaine, ce qui rend la longueur de transit effective et donc la fréquence de fonctionnement très sensible à la tension appliquée.

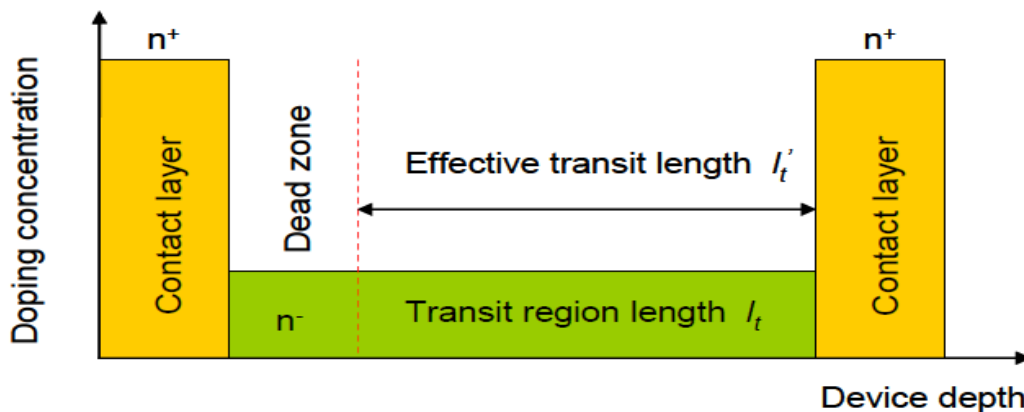


Figure 9: Structure conventionnelle de la diode Gunn.

Des résultats expérimentaux plus récents concernant les diodes Gunn à domaine unique de Gunn indiquent que la fréquence de fonctionnement des diodes Gunn à GaAs s'étend à 122 GHz, où une puissance de sortie du second harmonique de 40 mW a été rapportée à la référence ^[41].

Les performances des diodes Gunn à base de GaN, telles que rapportées dans la littérature, sont principalement basées sur la simulation. La puissance de sortie à des fréquences aussi élevées que 675 GHz obtenue par simulation ^[42], bien que ces prédictions supposent de manière irréaliste que les effets de l'auto-échauffement ne dégrade pas de manière significative l'efficacité de la diode.



3.3 DISPOSITIFS GUNN PLANAIRES

L'intérêt initial pour le développement de dispositifs Gunn planaires provenait de l'application potentielle des dispositifs logiques à grande vitesse car la géométrie plane était idéale pour la production en série. Cependant, la recherche sur ces dispositifs pour des circuits logiques a été entravée dans les années 1970 par des problèmes de matériaux semiconducteurs et de contact avec les dispositifs. Mais ces derniers temps, ils ont retenu l'attention des chercheurs en raison de la forte demande de sources à ondes millimétriques et THz. Dans les dispositifs Gunn planaires, le flux de courant est parallèle aux couches épitaxiales, comme indiqué sur la figure 10; contrairement à l'écoulement perpendiculaire dans les dispositifs verticaux. Les dispositifs planaires répondent aux exigences de la génération de haute fréquence et présentent des avantages par rapport aux dispositifs verticaux. En particulier avec les progrès de la croissance des plaquettes et de la technologie de fabrication, les dispositifs nanométriques utilisant des matériaux semiconducteurs de haute qualité sont fiables et faciles à réaliser.

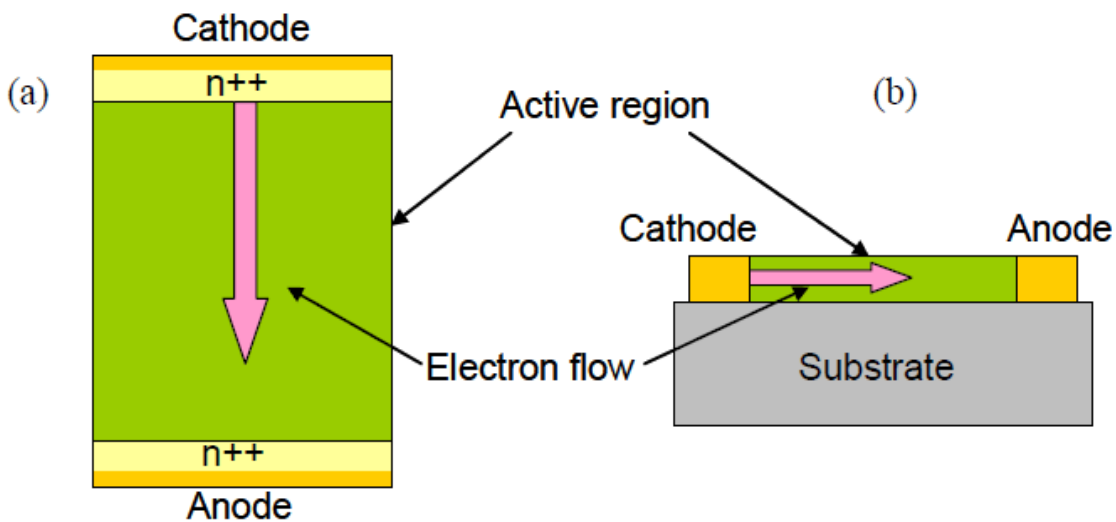


Figure 10: Schéma du flux d'électrons dans (a) une diode Gunn verticale et (b) une diode Gunn planaire.

Comparées aux dispositifs Gunn verticaux conventionnels, les diodes Gunn planaires présentent plusieurs avantages. Premièrement, elles ont une séparation anode-cathode contrôlée par lithographie qui détermine la fréquence d'oscillation du dispositif. Ce n'est pas le cas avec la diode Gunn conventionnelle, car une fois la tranchée est développée, la séparation de l'anode-cathode est fixée. En d'autres termes, la fréquence d'oscillation du temps de transit est fixée à moins que des circuits d'accord appropriés soient utilisés; même dans ce cas, le réglage du circuit est très limité. D'autre part, les structures planaires permettent une grande souplesse dans le réglage de la distance anode-cathode et donc des fréquences d'oscillation. Potentiellement, de tels dispositifs peuvent



osciller à plusieurs centaines de gigahertz ou même à des fréquences THz une fois que la distance est réduite à des dimensions submicroniques. Deuxièmement, les structures planaires sont compatibles avec d'autres circuits plans, tels que des composants à base de guides d'onde coplanaires (CPW), de sorte que des circuits et des systèmes complexes, tels que des émetteurs-récepteurs, puissent être fabriqués sur une seule puce sans problèmes d'intégration. Une telle connexion continue entre les sources de signal et les circuits intégrés monolithiques à hyperfréquences (MMIC) améliorera considérablement la productivité et la reproductibilité, ce qui n'est pas réalisable avec les dispositifs Gunn verticaux conventionnels car chaque dispositif individuel doit être clivé et encapsulé dans une cavité. Il est certain que les diodes Gunn planaires peuvent être confrontées à des problèmes, tels qu'une faible puissance ou un faible bruit de phase par rapport aux diodes Gunn classiques. Cependant, les structures planaires permettent l'association d'un grand nombre de périphériques afin d'améliorer les performances énergétiques.

3.4 DISPOSITIF DE COMMUTATION AUTOMATIQUE (SSD)

Le concept de dispositif de commutation automatique (Self Switching Diode, SSD) a été introduit en 2003 par A.M. Song et al ^[12,40]. C'est un nanodispositif non linéaire dont la caractéristique I-V (Figure 11 et 12) correspond à celle d'une diode classique, mais sans utiliser de jonction dopante ni de barrière tunnel. De plus, la tension d'activation peut être réglée en modifiant simplement la largeur du canal.



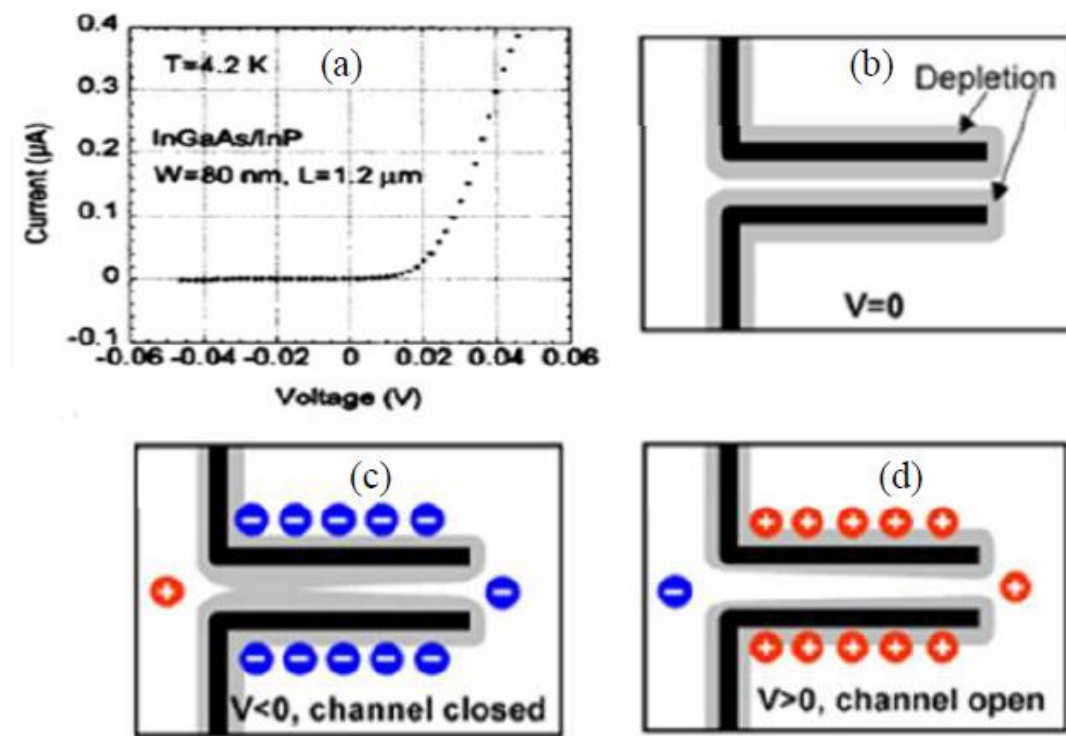


Figure 11: (a) Caractéristique I-V typique de la diode à commutation automatique (SSD). Le SSD a été fabriqué sur un substrat InGaAs/InP avec une longueur de canal de $1.2\text{ }\mu\text{m}$ (L) et une largeur de canal de 80 nm (W). La mesure a été effectuée à une température basse de 4.2 K . (b) Illustration des régions d'appauvrissement aux limites provoquées par les charges aux états de surface des tranchées gravées. En fonction du signe de la tension appliquée V , la largeur effective du canal sera (c) réduite ou (d) augmentée, ce qui donnera la caractéristique de type diode ^[12].

Depuis ses débuts, les propriétés et les performances du dispositif ont été explorées dans de nombreuses expériences ^{[12,14] [45-51]}; et des études de caractérisation approfondies ont été réalisées à l'aide de modèles ^[49-50] et de simulations ^[51-53]. Des développements plus récents incluent la détection des fréquences micro-ondes ^[13, 45] et THz ^[41,49] à la température ambiante et des simulations de Monte Carlo (MC) ^{[52] [55-57]} montrant les oscillations de fréquence THz dans le dispositif, ce qui en fait un émetteur potentiel dans cette plage.

Le SSD est un dispositif unipolaire à deux terminaux, comme illustré à la figure 11 (b). Deux tranchées isolantes en forme de L sont gravées à travers le semiconducteur, formant une couche non symétrique avec un canal conducteur défini entre les bornes. La largeur de canal effective du dispositif SSD est en réalité plus étroite que sa taille physique, en raison des régions d'appauvrissement situées aux limites gravées. Ces régions d'appauvrissement sont causées par les charges aux états de surface des tranchées isolantes. Comme on peut le voir sur la figure 11 (a), le



canal effectif est presque pincé dans des conditions de polarisation nulle en raison de ces régions d'appauvrissement. Une polarisation négative appliquée à l'anode induit des charges négatives autour des tranchées, épuisant ainsi le canal et empêchant la circulation du courant (Figure 11 (c)). En revanche, une polarisation positive neutralise l'épuisement latéral, élargissant la largeur effective du canal et permettant au courant de s'écouler facilement (Figure 9 (d)). Ce mécanisme de commutation automatique produit une caractéristique courant-tension (I-V) fortement non linéaire. Contrairement à une diode classique, le principe de fonctionnement du SSD est basé sur la rupture de symétrie géométrique à l'échelle nanométrique. Le SSD peut fonctionner avec un seuil de tension zéro défini géométriquement, indépendamment du matériau utilisé (Figure 12), ce qui le rend idéal pour les applications hyperfréquences.

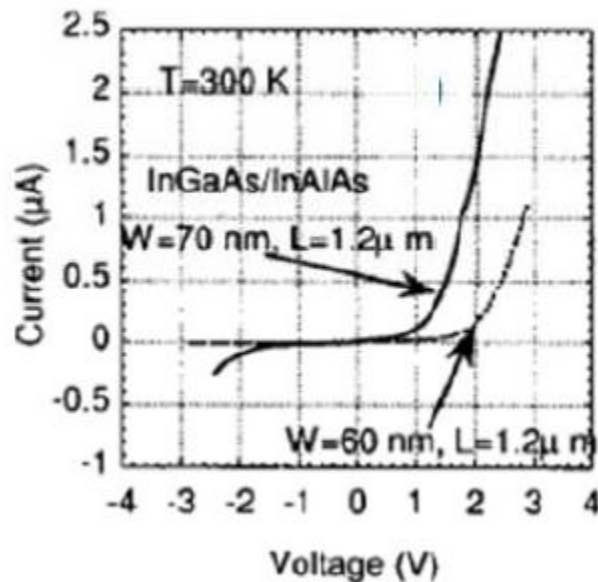


Figure 12: Caractéristiques I-V de deux diodes SSD avec W et L différents = 1.2 µm. Les deux diodes SSD ont été fabriqués sur un substrat InGaAs/InAlAs. La tension d'activation diminue lorsque W augmente de 60 nm à 70 nm ^[12].

Des DSS ont été fabriqués avec divers matériaux, notamment le gaz d'électrons bidimensionnel (2DEG) dans le GaAs ^[14], l'InGaAs ^[12, 13], le GaN ^[54], le silicium sur isolant (SOI) ^[49, 53], films minces organiques ^[47, 58] et oxydes de métal ^[59, 60]. La zone active du SSD est facilement définie par une seule étape de lithographie à haute résolution, telle que la lithographie par faisceau d'électrons (Figure 13 (a)). Le processus en une étape simplifie et rend la fabrication des nanodiodes compatible avec des méthodes de fabrication économiques, telles que la lithographie par nanoimpression (NIL) ^[47, 61]. Un grand nombre de diodes SSD peuvent être fabriqués en parallèle les uns avec les autres en une seule étape sans nécessiter d'interconnexion ^[13, 15], ce qui réduit favorablement



l'impédance de l'ensemble du dispositif (Figure 13 (b)). La géométrie du dispositif peut également tirer parti de NIL ^[62,63] à plusieurs niveaux, qui peut potentiellement être utilisé pour définir des structures intégrées à haute densité avec un coût relativement bas.

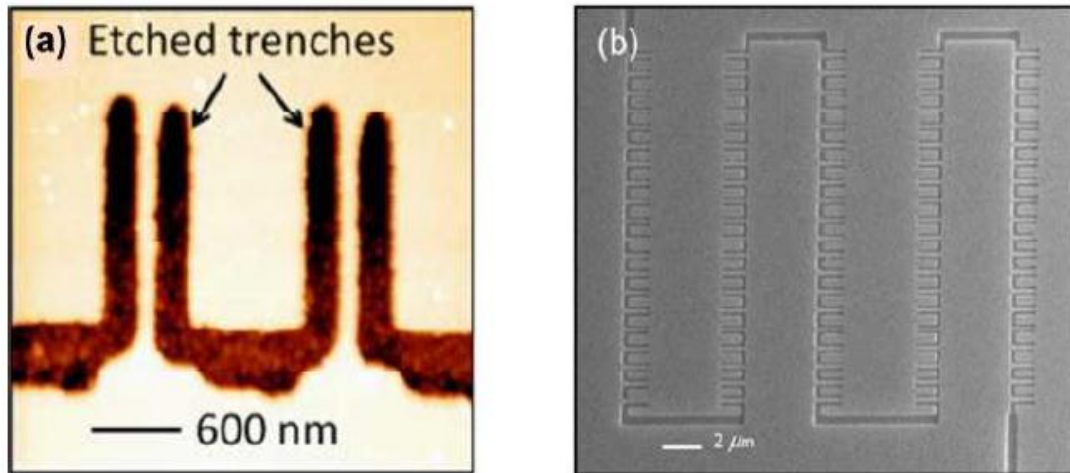


Figure 13: (a) Micrographie à force atomique de deux diodes SSD connectés en parallèle, fabriqués par lithographie par faisceau d'électrons. La longueur et la largeur du canal sont respectivement de 1.5 µm et 130 nm ^[14]. (b) Image MEB de 100 diodes SSD connectés en parallèle, fabriqués à l'aide d'une seule étape de lithographie sans couches d'interconnexion ^[64].

3.5 DIODES A COMMUTATION AUTOMATIQUE SSD A BASE DE GAN

3.5.1 Etat de l'art des SSD à base de GaN

En 2009 ^[65], T. González et al dans leur travail « Analyse Monte Carlo des oscillations Gunn dans des nanodiodes asymétriques à bande interdite étroite et large » ont démontré par un moyen de simulation Monte Carlo, la pertinence des nanodiodes asymétriques planaires pour le développement des oscillations Gunn à la fois dans des semiconducteurs à bande interdite étroite et large. Ils ont conclu que pour les SSD GaN, des oscillations à des fréquences de plusieurs centaines de GHz peuvent être obtenues (Figure 14) et les réseaux de diodes SSD en parallèle peuvent fournir des niveaux de courant suffisamment élevés pour des applications pratiques.



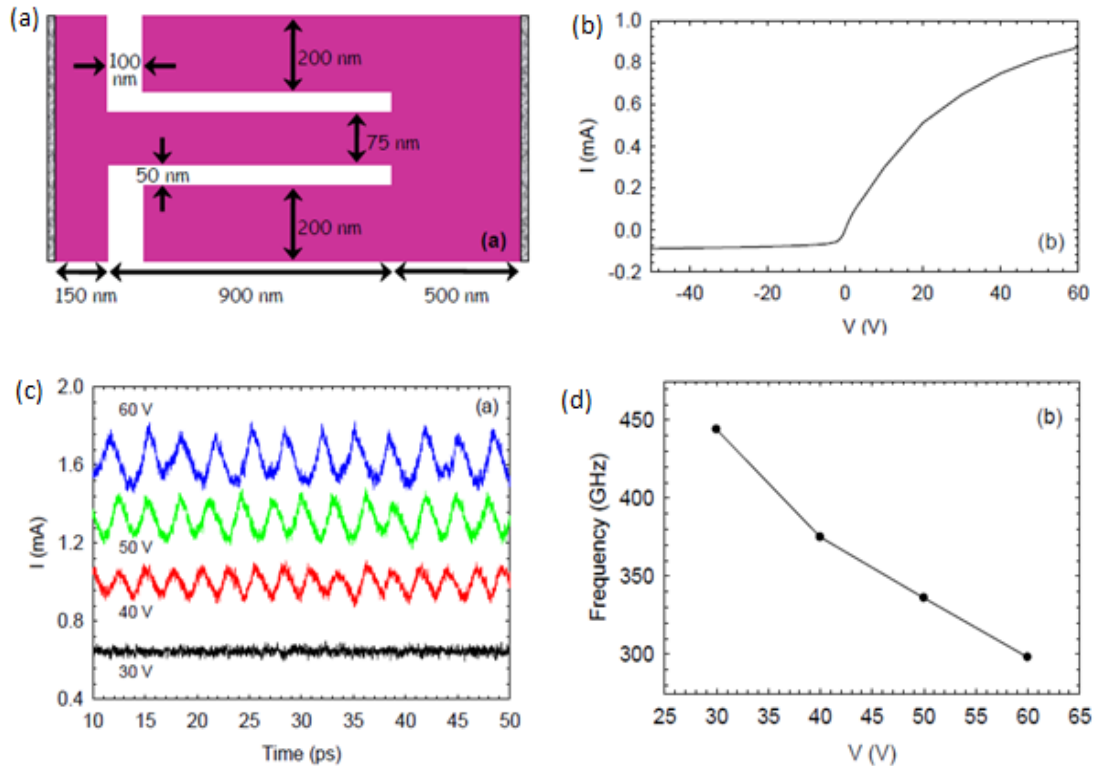


Figure 14: (a) Géométrie du SSD GaN. (b) caractéristique I-V. (c) Séquences de courant calculées pour plusieurs tensions appliquées (chaque séquence est déplacée de 0.25 mA par rapport à la précédente afin d'être clairement distinguée). (d) Fréquence des oscillations de courant en fonction de la tension appliquée [65].

En 2010 [57], K. Y. Xu et all dans leur travail « Etude des oscillations THz dans des nanodispositifs planaires à base de GaN », la faisabilité des oscillations THz, dans une diode unipolaire nanométrique plane à base de GaN ou dans un dispositif à commutation automatique (SSD), est analysée à l'aide de simulations Monte Carlo. L'origine des oscillations THz est liée à l'effet Gunn. La dépendance des oscillations de Gunn sur les paramètres géométriques et les conditions de polarisation a été étudiée. En utilisant les paramètres appropriés, la fréquence d'oscillation peut atteindre 0.6 THz. De plus, les applications potentielles sont discutées en termes de facilité de dissipation de chaleur et de génération d'oscillations à différentes fréquences sur une seule puce, contrairement à une diode Gunn à structure verticale classique.

En 2011 [66], A. Íñiguez -de-la-Torre et all dans leur travail « Corrélation entre l'amélioration du bruit de courant basse fréquence et les oscillations haute fréquence dans des nanodiodes planaires à base de GaN », ont présenté une étude de simulation Monte Carlo dans laquelle ils proposent d'utiliser la densité spectrale de bruit basse fréquence afin de déduire si des oscillations de Gunn ont lieu dans des SSD GaN. Les résultats de MC montrent que le bruit basse fréquence augmente



considérablement pour les polarisations proches de la tension de seuil des oscillations de Gunn, se produisant à des fréquences beaucoup plus élevées, exprimées en centaines de gigahertz. En raison de la difficulté inhérente à détecter des fluctuations aussi rapides, la mesure du bruit basse fréquence peut s'avérer un outil très utile pour prévoir les oscillations de courant à des fréquences inférieures au térahertz dans ces dispositifs.

En 2012 ^[17], A. Íñiguez-de-la-Torre et all dans leur travail «Recherche des oscillations Gunn THz dans les nanodiodes planaires GaN », ont analysé la potentialité des nanodiodes asymétriques planaires à base de GaN pour la génération de signaux THz exploitant l'effet Gunn. Les simulations MC ont été utilisées pour confirmer le principe de fonctionnement des diodes et la dépendance de leurs performances en fonction de plusieurs paramètres géométriques et physiques. Ils ont conclu que les diodes SSD d'une longueur de canal de 1 μm présentent des oscillations pour des tensions supérieures à 30 V à des fréquences supérieures à 300 GHz. Un premier lot de diodes (un défi de la technologie GaN en raison de leurs petites dimensions) a été fabriqué avec succès. Cependant, aucune oscillation n'a été trouvée en raison de l'influence forte et inattendue de la charge de surface identifiée au moyen de simulations MC (dans laquelle un modèle de charge auto-cohérent était nécessaire pour reproduire les courbes expérimentales I-V). Un tel modèle a mis en évidence la présence d'une charge de surface accrue dans des conditions éloignées de l'équilibre en raison des très hautes tensions appliquées aux diodes (nécessaires au déclenchement des oscillations). L'appauvrissement induit par la charge de surface réduit la concentration de porteurs dans le canal à un niveau qui empêche l'apparition d'oscillations. Les simulations MC indiquent que des canaux plus larges dans lesquels la concentration de porteurs est élevée et des géométries améliorées pour contrer l'influence de la charge de surface doivent être utilisés dans les futures opérations de fabrication afin de générer des oscillations Gunn.

En 2013 ^[19], Paul Sangaré et all dans leur travail « Démonstration expérimentale de la directe térahertz détection à température ambiante dans les nanocanaux asymétriques AlGaIn/GaN », ont étudié les possibilités d'utilisation de diodes SSD à base d'AlGaIn/GaN en tant que détecteurs THz. Des diodes à commutation automatique ont été fabriquées pour la première fois dans ce système utilisant des technologies de gravure en creux et d'implantation d'ions. Ces nanodispositifs présentent une bonne réactivité et un bon niveau de bruit. Les résultats sont bien expliqués à l'aide de simulations de Monte Carlo et d'une étude de la non-linéarité de la caractéristique I-V. Des sensibilités jusqu'à 100 V/W sont obtenues à 0.3 THz avec une puissance de bruit équivalente à 280 pW/Hz^{1/2}. De plus, en ce qui concerne le bruit thermique, qui est proportionnel à la résistance, ils ont conclu que la puissance équivalente au bruit des nanodispositifs étudiés peut être fortement réduite en utilisant de plus grands réseaux de nanocanaux connectés en parallèle et que ce type de



nanodétecteur direct à base de GaN pourrait être un candidat compétitif pour la détection térahertz à l'échelle nanométrique.

En 2013 ^[67], J. Torres et all dans leur travail « Nanocanaux non linéaires pour la détection hétérodyne térahertz a température ambiante », ont démontré que des nanodiodes à commutation automatique (SSD) peuvent être utilisées comme mélangeurs pour la détection hétérodyne sous-THz. Dans cette étude le fonctionnement des dispositifs de détection hétérodyne en espace libre a été mesuré à la température ambiante avec RF jusqu'à 0.32 THz et expliqué en raison de la non-linéarité à haute fréquence à l'aide de simulations Monte Carlo. Une largeur de bande de fréquence intermédiaire de 40 GHz est obtenue (Figure 15).

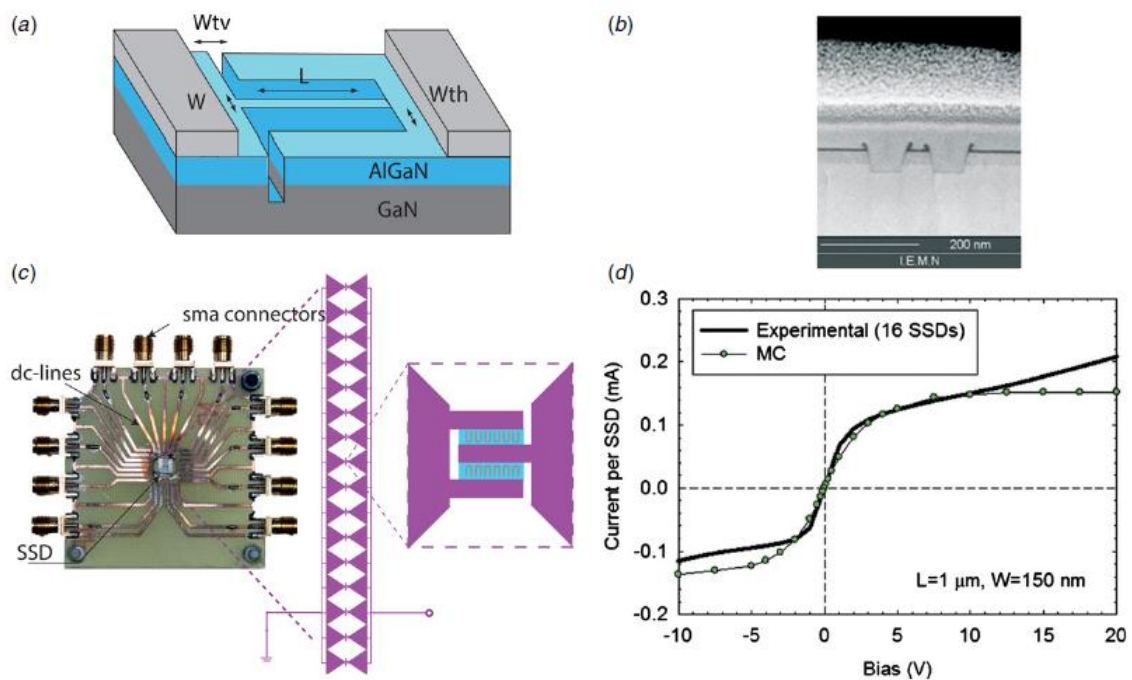


Figure 15: (a) Géométrie SSD, avec W et L la largeur et la longueur du canal, et Wth et Wtv la largeur des tranchées horizontales et verticales, respectivement. (b) Une vue focalisée, coupée par un faisceau d'ions, du profil de la tranchée dans les SSD fabriqués. (c) Image des dispositifs montrant le support diélectrique avec une ligne continue imprimée et les connecteurs SMA. Le schéma montre que les dispositifs sont composés d'un réseau de 16 antennes en nœuds papillon avec 64 diodes SSD sur chacun. (d) Caractéristique courant-tension d'un SSD d'une longueur de 1 µm. La ligne continue représente les mesures, où les points représentent les résultats des simulations de Monte Carlo ^[67].

En 2013 ^[68], Jean-François Millithaler et all, dans leur travail « Analyse Monte Carlo des effets thermiques dans les diodes à commutation automatique », ont comparé le comportement statique mesuré expérimentalement avec des calculs effectués à l'aide de simulations de Monte Carlo. Ils ont analysé l'influence de la température sur les caractéristiques I-V d'un SSD avec L = 500 nm et



$W = 500$ nm ainsi que sur les oscillations à haute fréquence et ils ont montré qu'une augmentation de la température de 200 K (pour une polarisation de 30 V) ne suffit pas pour supprimer l'effet d'oscillation.

En 2014 ^[69], Ignacio Íñiguez-de-la-Torre et al, dans leur article « Fonctionnement des nanodiodes planaires GaN en tant que détecteurs et mélangeurs THz », ont effectué, au moyen de simulations de Monte Carlo et de mesures expérimentales, une optimisation géométrique des nanodiodes à base de GaN pour la détection directe à large bande térahertz (en termes de réactivité) et le mélange (en termes de puissance de sortie). Les capacités de la diode à commutation automatique (SSD) sont analysées pour déterminer les différentes dimensions du canal à la température ambiante. La détection du signal jusqu'à la limite de 690 GHz de la configuration expérimentale a été réalisée avec une polarisation nulle. La réduction de la largeur de canal augmente la réactivité de la détection, tandis que la réduction de la longueur réduit la réactivité mais augmente la fréquence de coupure. Dans le cas de la détection hétérodyne, une largeur de bande intrinsèque d'au moins 100 GHz a été trouvée. La puissance de fréquence intermédiaire (FI) augmente pour les SSD courts, tandis que l'optimisation en termes de largeur de canal est un compromis entre une non-linéarité plus élevée (obtenue pour les SSD étroits) et un niveau de courant élevé (obtenu pour les SSD larges). De plus, les performances RF peuvent être améliorées par polarisation, les performances optimales étant atteintes, comme prévu, lorsque la non-linéarité DC est maximale.

En 2014 ^[18], J.-F. Millithaler et al, dans leur article « Conception en forme de V optimisée de nanodiodes de GaN pour la génération d'oscillations de Gunn » ont proposé une géométrie particulière pour la nanodiode, appelée forme en V (V-SSD) (Figure 16), où la largeur du canal est intentionnellement augmentée en s'approchant de l'anode. Cette conception réduit l'effet des charges superficielles côté anode et elle est plus favorable à l'apparition d'oscillations de Gunn, qui apparaissent à des niveaux de courant inférieurs et avec des tensions de seuil plus faibles par rapport à la géométrie carrée standard. Ce qui améliore l'efficacité énergétique de la diode à commutation automatique en tant qu'émetteur d'ondes submillimétriques.



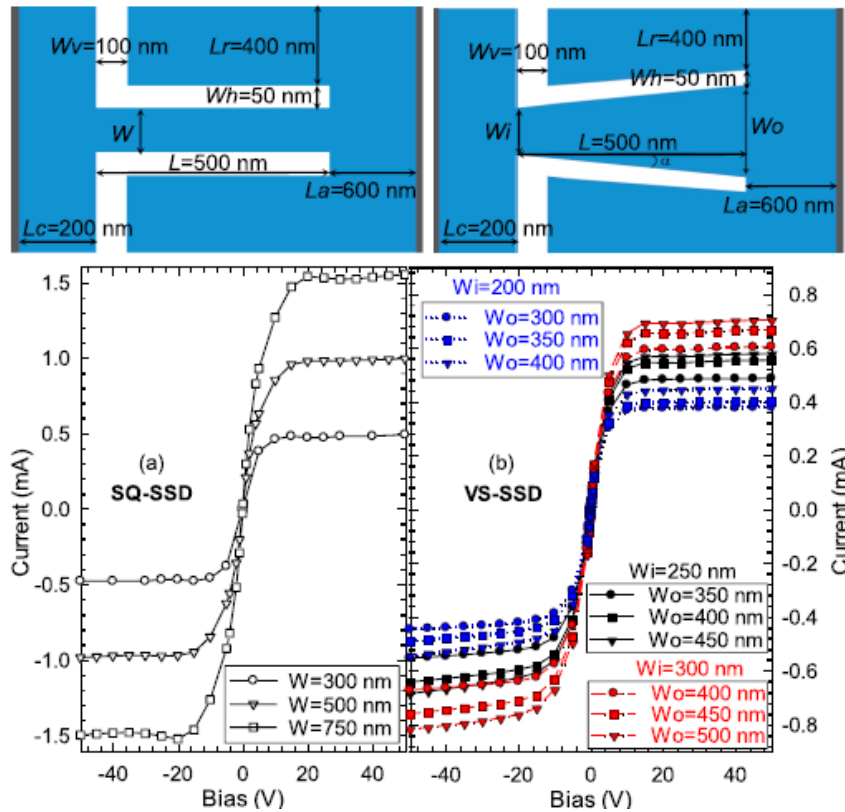


Figure 16: Courbes I-V à 300K pour (a) SQ-SSD et (b) VS-SSD (avec les géométries esquissées en haut), pour une longueur de $L=500$ nm et des largeurs de canal différentes.

En 2016 ^[20], Carlos Daher et al, dans leur travail « Détection directe et hétérodyne à la température ambiante de 0.28–0.69 THz sur la base de nanocanaux unipolaires GaN 2-DEG », une démonstration expérimentale de nanodiodes asymétriques à base de GaN comme détecteurs directs et hétérodynes jusqu'à 0.69 THz a été réalisée à température ambiante. Des sensibilités de 2 et 0.3 V/W en espace libre ont été obtenues à 0.30 et 0.69 THz, respectivement. Un signal de fréquence intermédiaire (FI) a été mesuré jusqu'à 40 et 13 GHz dans les mêmes gammes de fréquences. La caractérisation des nanodiodes comme mélangeurs n'a montré aucun écart de linéarité entre la puissance d'entrée RF et la sortie IF. Les simulations de Monte Carlo, utilisées pour estimer les pertes de conversion intrinsèque des nanodispositifs de 27 dB à 0.69 THz, ont confirmé ces résultats.

En 2018 ^[70], H -Sánchez-Martín, dans leur travail « Réseaux de nanodiodes GaN avec une conception améliorée pour la détection de sous-THz à polarisation nulle », des diodes à commutation automatique (SSD) à base de GaN ont été fabriquées pour la première fois sur un substrat de SiC. Ils ont été caractérisés comme des détecteurs de puissance RF dans une large gamme de fréquences allant jusqu'à 220 GHz, indiquant une fréquence de coupure d'environ 200 GHz. A basse fréquence, les mesures RF présentent une détection de loi carrée avec une réactivité en accord avec les calculs



effectués au moyen d'un modèle quasi-statique basé sur la forme de la courbe I–V. En exploitant un tel modèle, une simple caractérisation DC permet de définir des règles de conception permettant d'optimiser le fonctionnement pratique des matrices de diodes en tant que détecteurs de puissance RF. Comme stratégie pour améliorer les performances des diodes SSD fonctionnant comme des détecteurs à polarisation nulle à température ambiante, en termes de réactivité et de puissance équivalente au bruit, ils suggèrent: (i) la réduction de la largeur du canal et (ii) l'augmentation du nombre de diodes en parallèle afin de réduire l'impédance totale du dispositif à une valeur qui coïncide avec trois fois celle de la ligne de transmission (ou de l'antenne) à laquelle ils sont connectés.

3.5.2 PROPRIETE DU MATERIAU GAN UTILISE DANS LA FABRICATION DES SSD

3.5.2.1 Structure cristalline

Le nitrure de gallium cristallise sous deux formes différentes, intéressante pour la microélectronique, mais également pour l'électronique, la première forme cristalline correspond à la structure hexagonale (structure würtzite). La seconde est la forme cubique (structure zinc-blende). Nous nous intéresserons principalement à la structure würtzite qui reste la plus stable et utilisable pour la fabrication des SSD à base de GaN. La structure würtzite a une maille élémentaire hexagonale de paramètre de maille $a=0.3188$ nm et $c=0.5185$ nm à température ambiante (Figure 17). La maille élémentaire contient six atomes de chaque type. Elle est composée de deux sous réseaux hexagonal imbriqués l'un dans l'autre, où chaque type d'atome est décalé suivant l'axe c de 62% de la maille élémentaire ^[38].

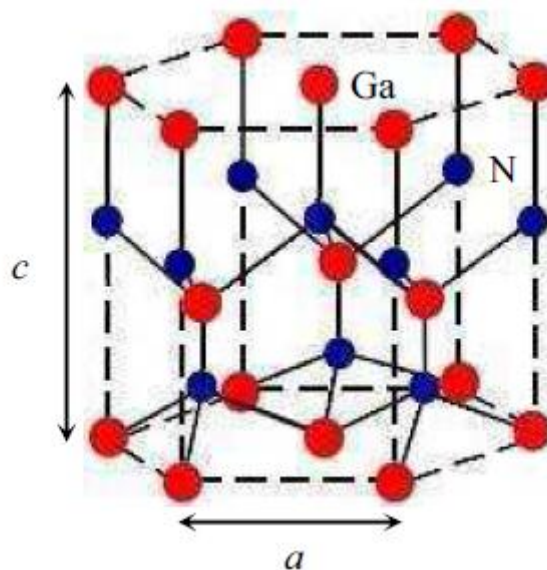


Figure 17: représentation du réseau cristallin du GaN dans sa structure hexagonale de type würtzite.



3.5.2.2 Structure de bande

La figure 18 représente le diagramme de bandes du GaN würtzite suivant des lignes de haute symétrie de la zone irréductible de Brillouin calculé par la méthode "Empirical pseudopotential method" [71]. Ce diagramme montre la nature de gap direct du GaN würtzite. Le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence sont situés au centre de la zone de Brillouin. À 300K, la largeur du gap généralement admise est autour de 3.4 eV.

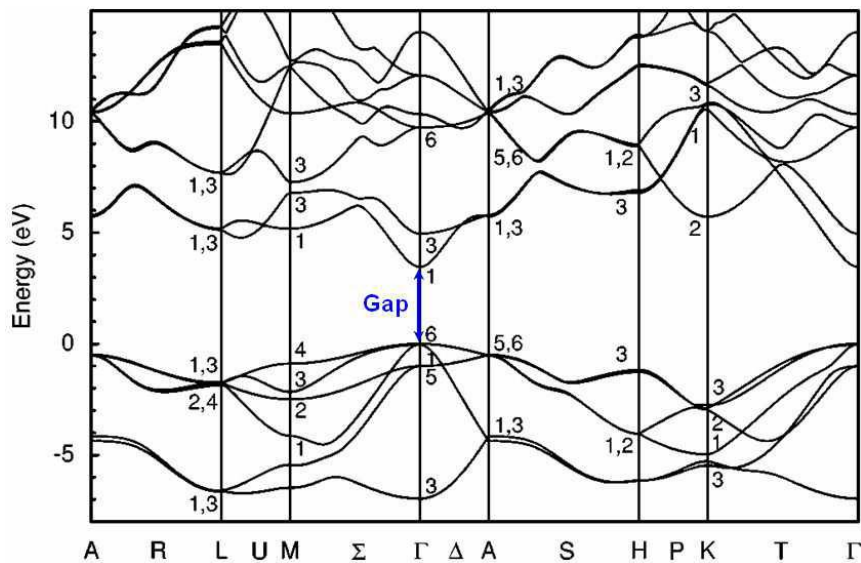


Figure 18: Structure de bande de GaN würtzite selon les lignes à haute symétrie dans la zone de Brillouin.

3.5.2.3 Densité de porteurs

Théoriquement, avec un gap de 3.4 eV, la densité de porteurs intrinsèque dans le GaN est extrêmement faible ($\sim 10^{-6} \text{cm}^{-3}$). En pratique, le matériau non intentionnellement dopé se trouve toujours de type n, avec des densités électroniques évoluant de 10^{16} à 10^{19}cm^{-3} (suivant les modes et les conditions de croissance), résultant de défauts survenant durant la croissance (l'incorporation d'impuretés, lacunes de gallium ou d'azote, gallium en position antisite, etc...). Des densités résiduelles plus faibles peuvent parfois être mesurées: elles résultent alors de la compensation des impuretés donneuses par une implantation d'accepteurs profonds [72].

Le GaN peut également être dopé intentionnellement et de manière contrôlée. Plusieurs atomes dopants de type n (Si, Ge, O) se sont, à ce jour, révélés efficaces. Le plus couramment retenu est le silicium, dont le niveau donneur se situe à 30 meV sous la bande de conduction. On peut ainsi, de cette manière parfaitement reproductible, obtenir des dopages aussi denses que 10^{19}cm^{-3} [68].



Le dopage de type p est en revanche beaucoup plus difficile à réaliser. L'élément le plus approprié à ce dopage est le magnésium (Mg). Par ailleurs, la qualité cristallographique de GaN étant fortement dégradée pour des concentrations de Mg supérieures à 10^{20}cm^{-3} , il est extrêmement difficile d'obtenir des couches avec des densités de trous supérieures à 10^{18}cm^{-3} [72].

3.5.2.4 Champ de claquage

Le champ de claquage (noté E_c , unité : V/cm) est la valeur du champ électrique maximum que peut supporter le matériau. On peut supposer que la forte valeur de la bande interdite doit engendrer un champ maximum relativement élevé. Effectivement, si en théorie $E_c = (E_g)^{1/2}$, il est estimé à 2 MV/cm, les mesures le situent à des valeurs localisées entre 1 et 3 MV/cm [72]. Notons que ces valeurs sont comparables à celles qui sont obtenues dans le SiC [72].

3.5.2.5 Effet de polarisation

❖ **Polarisation spontanée**

Il existe, dans le GaN de type würtzite, une polarisation macroscopique non nulle. Cette polarisation est appelée polarisation spontanée. Elle résulte de la non superposition des barycentres de charges positives et négatives. En effet, l'électronégativité de l'azote est plus importante que celle du gallium, la répartition du nuage électronique le long d'une liaison Ga-N est donc dirigée vers l'atome d'azote. On peut considérer que l'atome d'azote présente une charge -Q et l'atome gallium une charge +Q. Chaque liaison Ga-N présente donc un moment dipolaire. La figure 19 présente la contribution des différents moments dipolaires autour d'un atome de gallium. Leur somme est non nulle à cause de la non idéalité de la structure würtzite GaN ($c/a = \sqrt{8/3}$) [73]. Elle forme un dipôle élémentaire parallèle à l'axe c et orienté de l'atome d'azote vers l'atome de gallium. Ces dipôles élémentaires s'ajoutent pour donner dans la structure une polarisation spontanée macroscopique du matériau.

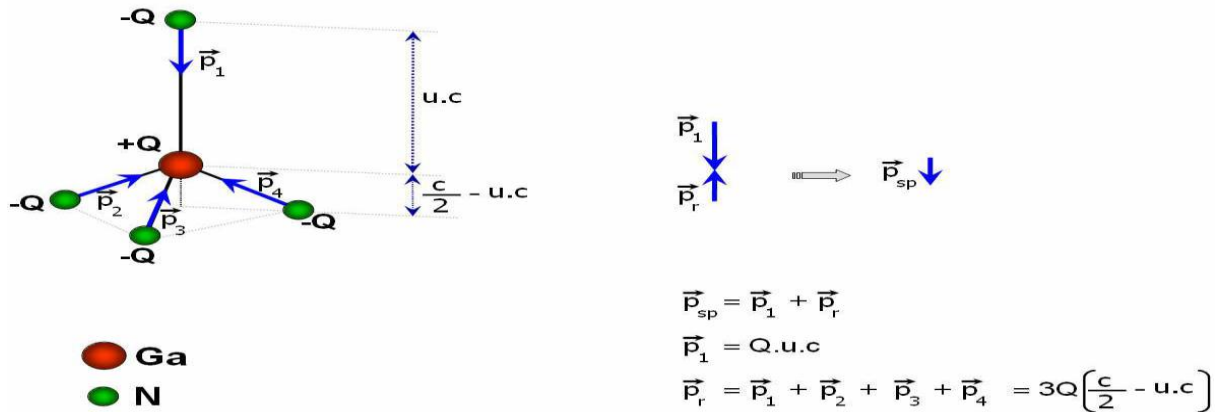


Figure 19: Contribution des différents moments dipolaires pour la génération de la polarisation spontanée.



La structure würtzite n'est pas symétrique par rapport au plan (0001). En effet, les directions [0001] et [000 $\bar{1}$] ne sont pas équivalentes. Pour le nitrure de gallium, il existe deux arrangements possibles des atomes de gallium et d'azote lors de la croissance. Dans le cas où la liaison orientée Ga-N pointe vers la surface, on dit que l'on a une polarité gallium ou face Ga (Figure 20 (a)). Dans le cas contraire, on a une polarité azote ou face N (Figure 20 (b)). Il convient de noter que la polarité d'une couche ne présage pas de la nature des atomes en surface. Par exemple, une couche à polarité gallium peut aussi bien se terminer par des atomes de gallium que par des atomes d'azote en surface.

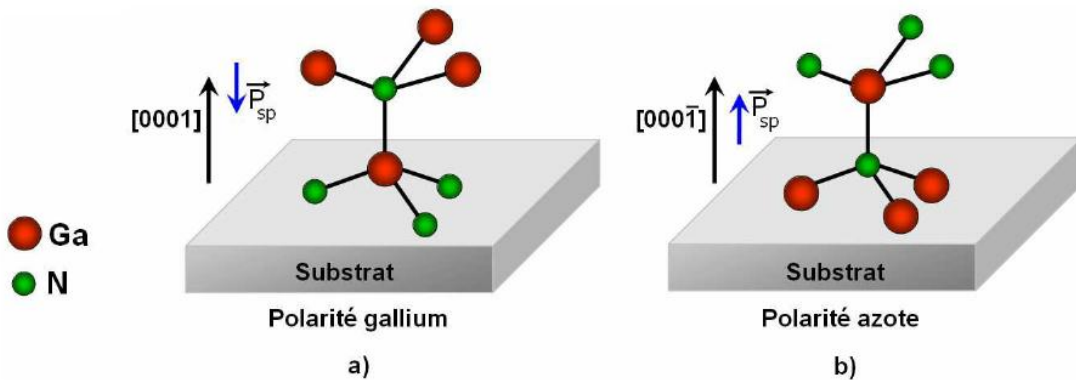


Figure 20: Polarités gallium et azote dans le GaN würtzite.

A l'intérieur du matériau, les charges liées se compensent. Par contre, à la surface, la séparation des charges du dernier plan de dipôle n'est plus compensée, ce qui va faire apparaître des plans de charges de signe opposé d'un côté et de l'autre du cristal (Figure 21).

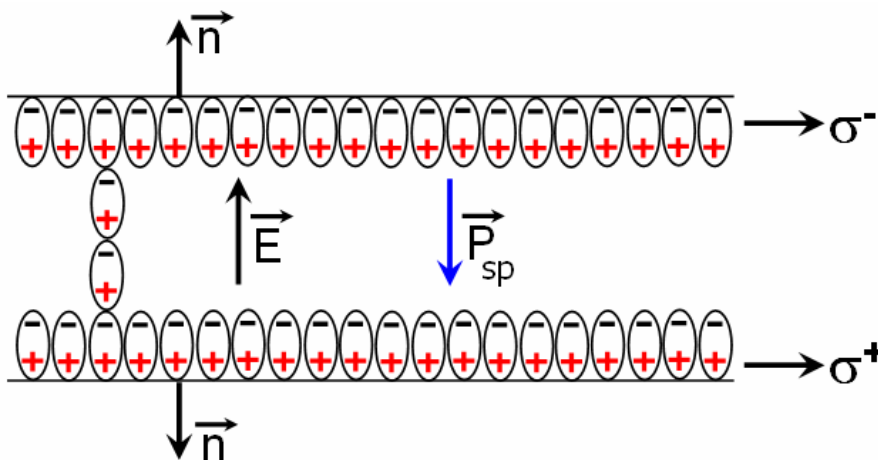


Figure 21: Génération d'un champ électrique E et de la charge superficielle par la polarisation spontanée dans un cristal GaN würtzite avec polarité gallium.



Une polarisation P quelle que soit son origine, induit à la surface du cristal une densité surfacique de charge σ donnée par :

$$\sigma = \vec{P}\vec{n} \quad \text{Eq.16}$$

Où \vec{n} est le vecteur unitaire normal à la surface et orienté vers l'extérieur.

La valeur de la polarisation spontanée du GaN en polarisation gallium est estimée à -0.029 Cm^{-2} [74], ce qui correspond à un champ électrique de l'ordre 3 MV/cm et une densité surfacique de charge de $1.8 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$.

❖ La polarisation piézoélectrique

Le GaN est souvent élaboré sur saphir, Carbure de Silicium (SiC) ou Silicium. Le désaccord de maille entre GaN et son substrat impose une contrainte (extension ou compression) dans le plan de base des couches GaN. La déformation de la maille du GaN entraîne un déplacement des barycentres des charges et donc une modification de la polarisation spontanée. Cet effet peut être considéré comme l'apparition d'une polarisation dite "piézoélectrique" (P_{pz}) qui renforce ou affaiblit la polarisation spontanée.

Dans le cas du GaN polarité gallium, lorsque le matériau subit une déformation en tension biaxiale dans le plan perpendiculaire à l'axe de croissance, le vecteur polarisation piézoélectrique est orienté dans le même sens que le vecteur polarisation spontanée. La polarisation dans le cristal et la charge surfacique augmentent (Figure 22(a)). En revanche, si le matériau subit une déformation en compression biaxiale dans le plan perpendiculaire à l'axe de croissance, le vecteur polarisation piézoélectrique est orienté dans le sens opposé du vecteur de polarisation spontanée. La polarisation dans le cristal et la charge surfacique diminuent (Figure 22(b)). Ceci sera opposé pour le cas de polarité N (pour plus de détails, se reporter à la référence [75]).



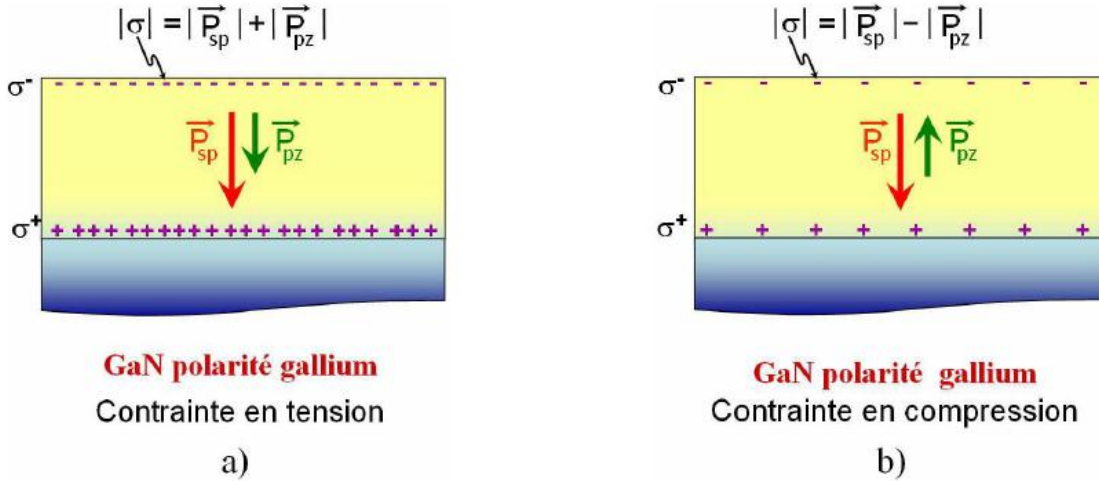


Figure 22: Effet de contrainte sur la polarisation et la charge surfacique d'une couche GaN polarité gallium.

La polarisation piézoélectrique P_{pz} dépend linéairement de la déformation du paramètre de maille a et s'exprime par la relation suivante [76]:

$$P_{Pz_{GaN}} = 2 \frac{a-a_0}{a_0} \left(e_{31} - e_{33} \frac{C_{13}}{C_{33}} \right) \quad \text{Eq.17}$$

Où a_0 et a sont les paramètres de maille du matériau relaxé et en contrainte respectivement; e_{31} , e_{33} les constantes piézoélectriques; C_{13} , C_{33} les constantes élastiques. Les valeurs de ces constantes rapportées dans la littérature sont [76]:

$$e_{31} = -0.49 \text{ C/m}^2 \quad e_{33} = 0.73 \text{ C/m}^2 \quad C_{13} = 103 \text{ GPa} \quad C_{33} = 405 \text{ GPa}$$

En conclusion, la polarisation totale dans le GaN de type würtzite est la somme de deux composantes parallèles à l'axe c : la polarisation spontanée et la polarisation piézoélectrique. La polarisation spontanée peut générer des champs électriques de l'ordre de 3 MV/cm dans les matériaux de type III-V. La polarisation piézoélectrique dépend linéairement de la déformation du paramètre de maille a et peut être comparable avec la polarisation spontanée. Elle peut renforcer ou affaiblir la polarisation spontanée selon la contrainte.

L'avantage de ces polarisations est la possibilité de créer un gaz bidimensionnel d'électrons (ou 2DEG pour Two Dimensional Electron Gas) de très forte densité et à mobilité élevée à l'interface d'une hétérostructure AlGaN/GaN dont on parlera dans les parties qui suivent.



3.5.2.6 Substrats pour l'hétéro-épitaxie

Le problème rencontré pour l'épitaxie du nitrure de gallium est qu'il n'existe pas de substrat en accord de maille. Les substrats les plus utilisés à l'heure actuelle sont le saphir (Al_2O_3), le carbure de silicium (6H-SiC) et le silicium (Si). Leurs caractéristiques relatives à l'épitaxie sont reportées dans le tableau 2.

Matériau	Paramètre de maille (Å)	Coefficient d'expansion thermique (10^4 K^{-1})	Conductivité thermique ($\text{W.K}^{-1}.\text{cm}^{-1}$)
Al_2O_3	a=4.758	7.5	0.5
	c=12.99	8.5	
6H-SiC	a=3.08	4.2	4.9
	c=15.12	4.68	
Si	a=5.4301	3.59	1.5
GaN	a=3.189	5.59	1.5
	c=5.18	3.17	

Tableau 2: Caractéristiques des substrats les plus employés pour la croissance du GaN ^[77].

Historiquement, c'est sur saphir qu'ont été obtenus les premiers résultats significatifs pour la croissance de GaN (diodes électroluminescentes, 1994, S. Nakamura, Nichia Chemicals). Ce substrat est aujourd'hui le plus couramment utilisé. Si sa transparence en fait un substrat de choix pour l'optoélectronique, sa faible conductivité thermique (Tableau 2) limite la réalisation de dispositifs de puissance. Enfin, le désaccord paramétrique et la différence des coefficients de dilatation thermique entre le GaN et le saphir induisent une compression importante des couches épitaxiées et donc une courbure importante du substrat ^[78].

Les substrats 6H-SiC présentent une très bonne conductivité thermique et électrique, ce qui en fait un substrat de choix pour la réalisation de dispositifs de puissance. De plus le SiC a un paramètre de maille relativement proche de celui du GaN comparé au saphir et au silicium. Néanmoins, son prix reste prohibitif et son coefficient de dilatation thermique est plus faible que celui du GaN. Ce qui induit une contrainte extensive lors du refroidissement et donc l'apparition de fissures pour des couches épaisses ($>3\text{-}5 \mu\text{m}$) ^[78].

Le silicium présente un attrait important par son prix beaucoup plus faible que celui des deux matériaux cités précédemment, sa disponibilité en wafer de grande taille (jusqu'à 12") et sa bonne conductivité thermique qui en font un candidat de choix pour les composants de puissance. De plus,



la croissance du GaN sur silicium pourrait permettre l'intégration de dispositifs à base de nitrures d'éléments III avec les nombreuses technologies de la filière silicium. Enfin, la possibilité de graver chimiquement le substrat silicium permet la réalisation de traitements technologiques en face arrière (connections électriques, drains thermiques, etc...), ou encore l'obtention de couches autosupportées de GaN, pouvant éventuellement être transférées sur d'autres substrats d'accueil. Cependant, le silicium présente un fort désaccord paramétrique et une différence de coefficient de dilatation thermique importante avec le GaN (Tableau 2). La contrainte extensive générée au cours du refroidissement reste un point critique pour la croissance de couches non fissurées d'épaisseur supérieure à 3 μm [78].

Le choix d'un tel substrat est le compromis entre le fonctionnement du dispositif et son coût. Le problème du désaccord de maille peut être réduit par les couches tampons.

3.5.2.7 Hétérostructure AlGaN/GaN

❖ L'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$

Pour calculer les effets de la polarisation dans l'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ nous avons besoin des valeurs des paramètres de maille, de la polarisation spontanée, des constantes piézoélectriques et des constantes élastiques d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$. Ces valeurs sont estimées à partir de la loi de Vegard (interpolation linéaire entre les valeurs de GaN et AlN) qui s'écrit sous la forme [76] :

$$a_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}} = xa_{\text{AlN}} + (1 - x)a_{\text{GaN}} \quad \text{Eq.18}$$

Les valeurs de ces paramètres sont regroupées dans le tableau 3 [76].

Paramètre	GaN	AlN
$a(\text{\AA})$	3.189	3.112
$c(\text{\AA})$	5.185	4.982
$P_{sp}(\text{C}/\text{m}^2)$	-0.029	-0.081
$e_{31}(\text{C}/\text{m}^2)$	-0.49	-0.6
$e_{33}(\text{C}/\text{m}^2)$	0.73	1.46
$C_{31}(\text{GPa})$	103	108
$C_{33}(\text{GPa})$	405	373

Tableau 3: Les paramètres de maille, la polarisation spontanée, les constantes piézoélectriques et les constantes élastiques du GaN et d'AlN [76].



L'alliage $Al_xGa_{1-x}N$ est un semiconducteur à gap direct quel que soit le taux d'aluminium. Par contre, la variation de la largeur de bande interdite de l'alliage $Al_xGa_{1-x}N$ en fonction de x n'est pas tout à fait linéaire. Elle s'exprime par [76]:

$$E_{Al_xGa_{1-x}N}^g = xE_{AlN}^g + (1-x)E_{GaN}^g - bx(1-x) \tag{Eq.19}$$

où $E_{Al_xGa_{1-x}N}^g$, E_{AlN}^g , E_{GaN}^g sont respectivement les largeurs de bande interdite de l'alliage $Al_xGa_{1-x}N$, d'AlN et du GaN ; b le terme de non linéarité représentant la déviation par rapport à la loi linéaire de type Vegard. La diversité de valeurs de b rapportées dans la littérature s'explique par une grande dispersion dans la qualité des couches épitaxiées et par la difficulté à séparer les effets dus aux contraintes et aux fluctuations de composition d'alliage. En analysant les valeurs théoriques et expérimentales, Vurgaftman [79] recommande $b = 0.7\text{eV}$ pour les deux types d'AlGaN wurtzite et zinc-blende. L'énergie de la bande interdite des alliages III-N recommandée par Vurgaftman en fonction du paramètre de maille a est présentée dans la figure 23.

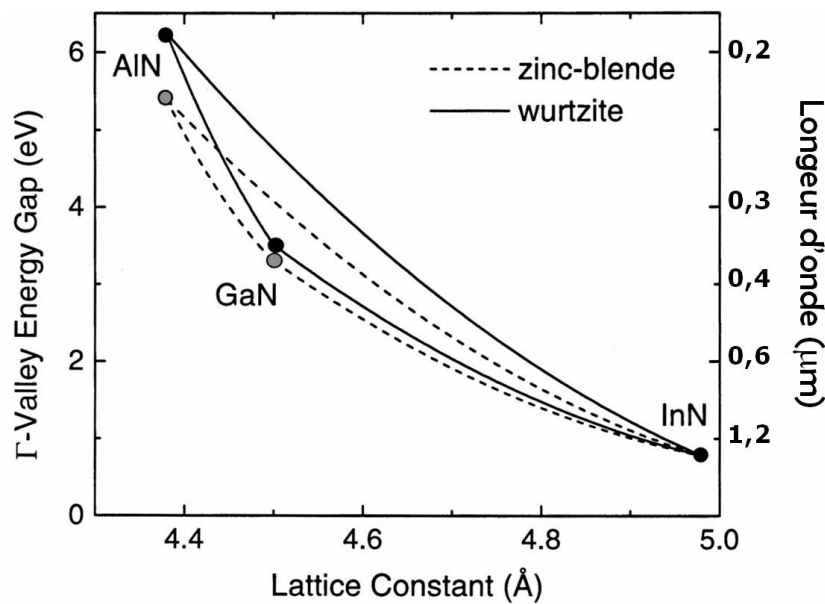


Figure 23: L'énergie de la bande interdite des alliages III-N recommandée par Vurgaftman en fonction du paramètre de maille a [79].

La figure 23 montre un des intérêts des nitrures d'éléments III. C'est la possibilité de couvrir un large spectre de longueur d'onde allant du très proche infrarouge (1.55 μm avec InN) à l'ultraviolet profond (200 nm avec AlN) par variation du taux des éléments III dans l'alliage. On notera cependant que cette variation du gap s'accompagne d'une large variation du paramètre de maille (de 4.38 à 4.98 Å), ce qui complique encore plus les difficultés d'épitaxie de ces matériaux.



❖ Le gaz bidimensionnel d'électrons

- Mécanisme de la formation du gaz bidimensionnel d'électrons

Considérons une couche d'AlGaN sur une couche GaN sans contrainte. Elles sont toutes les deux de polarité gallium. Les paramètres de maille de la couche d'AlGaN sont plus faibles que ceux de la couche GaN. La couche d'AlGaN est donc contrainte en tension.

Les vecteurs de polarisation dans ces deux couches et les charges surfaciques sont présentés dans la figure 24.

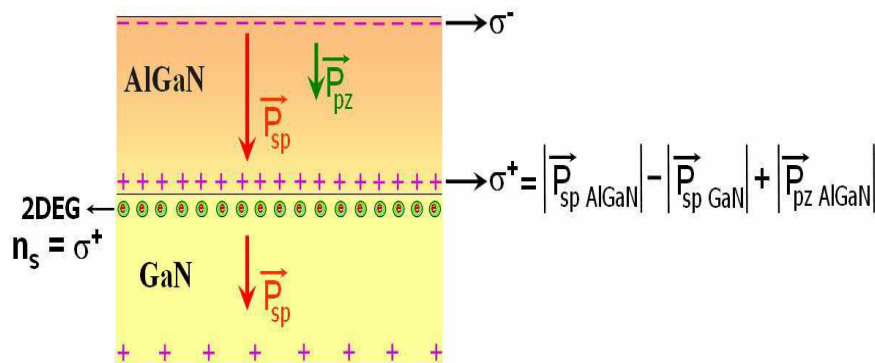


Figure 24: Mise en évidence de la formation du 2DEG à l'interface AlGaN/GaN [75].

Dans ce cas, on obtient une densité de charges fixes positives à l'interface telle que :

$$\sigma^+ = |P_{spAlGaN}| - |P_{spGaN}| + |P_{pzAlGaN}| \tag{Eq.20}$$

Cette charge positive est compensée par la présence d'électrons à l'interface formant un gaz confiné à cette interface qu'on appelle gaz bidimensionnel d'électrons (2DEG pour Two Dimensional Electron Gas). La couche AlGaN est appelée "barrière", la couche GaN où se trouvent les électrons à l'interface est appelée "canal".

Notons qu'il n'y a aucun dopage intentionnel de la barrière AlGaN. Les électrons confinés à l'interface peuvent venir de plusieurs sources : des défauts intrinsèques, des impuretés dans la couche tampon GaN, la barrière AlGaN, ou encore des états de surface [80-82].

Les électrons sont confinés à l'interface par le fort champ électrique de polarisation. Par conséquent la densité d'électrons dans le gaz 2D d'électron dépend de l'état de contrainte des couches, du taux d'aluminium et de l'épaisseur de la barrière. Ceci sera clarifié dans les parties suivantes.



-Influence du taux d'aluminium

On peut constater que l'augmentation du taux d'aluminium engendre un accroissement de la polarisation spontanée et piézoélectrique dans la couche d'AlGa_xN et donc de la densité du gaz 2D d'électrons. En réalité, au-delà de $x = 0.38$, le paramètre de maille a du GaN décroît sensiblement et entraîne une contrainte du GaN en compression [76]. Et à partir de $x = 0.5$ la qualité cristalline se dégrade et une relaxation partielle de la couche d'AlGa_xN apparaît [76]. Le taux d'aluminium le plus utilisé pour l'hétérojonction AlGa_xN/GaN dans la littérature est d'environ 30% [76].

-Influence de l'épaisseur de la barrière

Pour un taux d'aluminium d'environ 30%, l'évolution de la densité du gaz 2D d'électrons en fonction de l'épaisseur de la barrière rapportée dans plusieurs études est assez homogène [80] [83] [84]. En effet, la densité du gaz 2D d'électrons est négligeable pour une épaisseur en dessous de 5 nm, elle augmente fortement entre 5 à 10 nm puis sature à partir de 25 nm. La figure 25 en donne un exemple. La structure standard pour les hétérostructures Al_xGa_{1-x}N/GaN actuelles est constituée d'une barrière de 20 à 30 nm d'Al_{0.3}Ga_{0.7}N épitaxiée sur GaN. La densité du gaz 2D d'électrons moyenne rapportée dans la littérature pour une telle structure est de l'ordre de $1.3 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ [76] [83] [84].

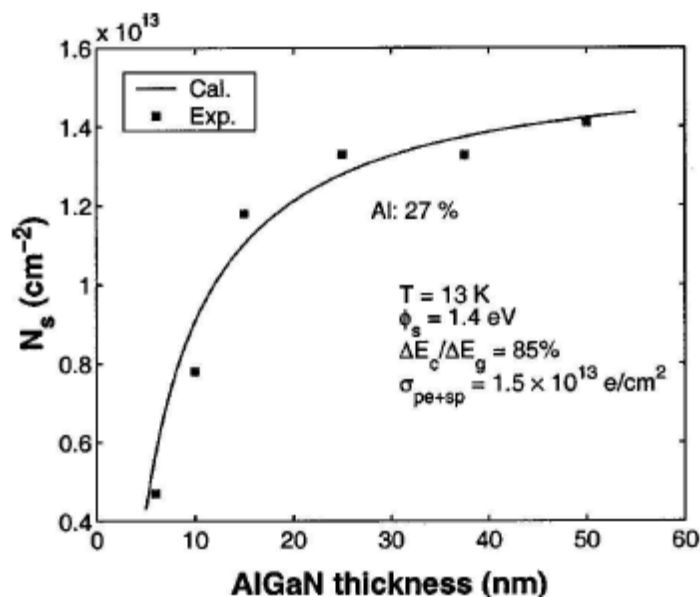


Figure 25: La densité du 2DEG en fonction de l'épaisseur de la barrière AlGa_xN. Le taux d'Aluminium dans la barrière est de 27% [83].

-La mobilité du gaz bidimensionnel d'électrons

Les performances d'un transistor réalisé sur une hétérostructure AlGa_xN/GaN dépendent principalement des propriétés intrinsèques (la densité et la mobilité) du gaz 2D d'électrons. Comme nous l'avons vu, la densité d'électrons (n_s) dans le gaz 2D dépend surtout de l'épaisseur de la



barrière et de sa composition en aluminium. La mobilité des électrons quant à elle dépend de nombreux mécanismes de diffusion élastiques et inélastiques des porteurs sur les défauts de la structure : impuretés ionisées, rugosité d'interface, phonons acoustiques et optiques, désordre d'alliage, dislocations traversantes. Ces mécanismes sont plus ou moins dominants selon la température et le taux d'aluminium. Compte tenu de tous ces facteurs limitants, plusieurs études ont calculé l'évolution de la mobilité du gaz 2D d'électrons en fonction de la température et du taux d'aluminium ^{[82] [84]}. La figure 26 en donne un exemple, sur cette figure la mobilité est quasiment constante jusqu'à $x = 30\%$. Au-delà, elle diminue avec le taux d'aluminium. En effet, les taux d'aluminium élevés conduisent à des densités d'électrons élevées où le gaz d'électrons en moyenne se rapproche de l'interface AlGaN/GaN et se trouve par conséquent plus affecté par la structure de celle-ci ^[81]. Notons également que la qualité de la barrière diminue et que l'impact des diffusions élastiques liées au désordre d'alliage augmente avec l'augmentation du taux d'aluminium ^[85].

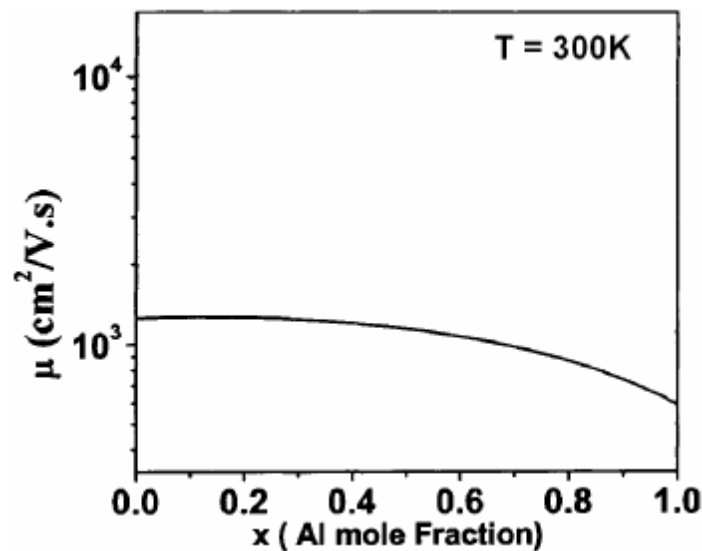


Figure 26: Mobilité du gaz 2D d'électrons en fonction du taux d'aluminium à 300 K d'une hétérojonction Al_xGa_{1-x}N/GaN dont l'épaisseur de la barrière est de 35 nm ^[85].

La mobilité moyenne des structures standards Al_xGa_{1-x}N/GaN ($x \sim 0.3$; d'AlGaN $\sim 20 - 30$ nm) à température ambiante rapportée dans la littérature varie entre 1000–1500 cm²/Vs ^{[76] [83] [84]}.



4. CONCLUSION

Dans ce chapitre, nous avons rappelé l'intérêt de la technologie terahertz en présentant un état de l'art de différents sources et détecteurs terahertz. Nous avons présenté les origines de la résistance différentielle négative et de l'oscillation Gunn, ainsi que le critère d'oscillation de type Gunn. Ensuite, nous avons présenté les limitations des diodes Gunn conventionnelles et l'intérêt des diodes Gunn planaires (SSD) en se basant sur le point de la technologie et l'application.

Comme notre étude concerne les SSDs à base de GaN, nous avons présenté un état de l'art des travaux réalisés dans ce contexte. Nous avons décrit la structure cristalline, l'effet de la polarisation du GaN et son alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, l'hétérostructure AlGaN/GaN et la formation du Gaz 2D d'électrons. Nous avons vu que la densité du gaz 2D d'électrons dépend de la contrainte, du taux d'aluminium et de l'épaisseur de la barrière.



REFERENCES

- [1] **Marso M.** "GaN for THz sources. SPIE OPTO: International Society for Optics and Photonics"; (2011).
- [2] **El Fatimy A, Tombet SB, Tepe F, Knap W, Veksler D, Romyantsev S, et al.** "Terahertz detection by GaN/AlGaIn transistors". *Electron Lett*; 42(23):1342-1344, (2006).
- [3] **Samoska LA.** "An overview of solid-state integrated circuit amplifiers in the submillimeter-wave and THz regime. *Terahertz Science and Technology*", *IEEE Transactions*; 1(1):9-24, (2011).
- [4] **Sakai K.** Book: "Terahertz optoelectronics". Berlin: Springer; (2005).
- [5] **Carr GL, Martin MC, McKinney WR, Jordan K, Neil GR, Williams GP.** "High-power terahertz radiation from relativistic electrons". *Nature*; 420(6912):153-156; (2002).
- [6] **Gružinskis V, Starikov E, Shiktorov P, Reggiani L, Saraniti M, Varani L.** "Generation and amplification of microwave power in submicron n⁺nn⁺ diodes". In: Selberherr S, Stippel H, Strasser E, editors. Vienna: Springer Vienna; (1993).
- [7] **Gružinskis V, Starikov E, Shiktorov P, Reggiani L, Varani L.** "Linear and nonlinear analysis of microwave power generation in submicrometer n⁺nn⁺ InP diodes". *J Appl Phys*; 76(9):5260-5271; (1994).
- [8] **Liu Z, Su K, Gary DE, Federici JF, Barat RB, Michalopoulou Z.** "Video-rate terahertz interferometric and synthetic aperture imaging". *Appl Opt*; 48(19):3788-3795; (2009).
- [9] **Tonouchi M.** "Cutting-edge terahertz technology". *Nature photonics*; 1(2):97- 105; (2007).
- [10] **Belkin MA, Capasso F, Belyanin A, Sivco DL, Cho AY, Oakley DC, et al.** Terahertz quantum-cascade-laser source based on intracavity difference-frequency generation. *Nature Photonics*; 1(5):288-292; (2007).
- [11] **Siegel PH.** Terahertz technology in biology and medicine. *Microwave Symposium Digest, 2004 IEEE MTT-S International: IEEE*; (2004).
- [12] **A. M. Song and M. Missous,** "Unidirectional electron flow in a nanometer-scale semiconductor channel: A self-switching device". *Appl. Phys. Lett.* **83**, 1881 (2003); <https://doi.org/10.1063/1.1606881>.
- [13] **C. Balocco, A. M. Song, M. Aberg, A. Forchel, T. González, J. Mateos, I. Maximov, M. Missous, A. A. Rezazadeh, J. Saijets, L. Samuelson, D. Wallin, K. Williams, L. Worschech and H. Q. Xu,** "Microwave detection at 110 GHz by nanowires with broken symmetry", *Nano Letters* **5**, 1423 (2005).
- [14] **C. Balocco, S. R. Kasjoo, X. F. Lu, L. Q. Zhang, Y. Alimi, S. Winnerl and A. M. Song,** "Room-temperature operation of a unipolar nanodiode at terahertz frequencies ", *Appl. Phys. Lett.* **98**, 223501 (2011).
- [15] **C. Balocco, M. Halsall, N. Q. Vinh and A. M. Song,** "THz operation of asymmetric-nanochannel devices", *J. Phys.: Condens. Matter* **20**, 384203 (2008).
- [16] **A.D.P. SANGARE,** thèse de doctorat, "Analyses des potentialités des diodes de types SSD à base de GaN pour les applications d'émission et détection en gamme de fréquence millimétriques et submillimétriques", Université des sciences et technologies de Lille, France (2013).
- [17] **Iñiguez-de-la-Torre A, Iñiguez-de-la-Torre I, Mateos J, González T, Sangaré P, Faucher M, Grimbert B, Brandli V, Ducournau G and Gaquière C,** " Searching for THz Gunn oscillations in GaN planar nanodiodes", *J. Appl. Phys.* 111 113705 ; (2012).
- [18] **Millithaler J F, Iñiguez-de-la-Torre I, Iñiguez-de-la-Torre A, González T, Sangaré P, Ducournau G, Gaquière C and Mateos J,** "Optimized V-shape design of GaN nanodiodes for the generation of Gunn oscillation ", *Appl. Phys. Lett.* 104 073509 ; (2014).
- [19] **P.Sangaré, G.Ducournau, B. Grimbert, V.Brandli, M.Faucher, C.Gaquière, A. Iñiguez-de-la-Torre, I. Iñiguez-de-la-Torre, J. F. Millithaler, J.Mateos, and T.González,** « Experimental demonstration of direct terahertz detection at room-temperature in AlGaIn/GaN asymmetric nanochannels", *Journal of Applied Physics* 113, 034305 (2013); <https://doi.org/10.1063/1.4775406>.



- [20] **Daher C, Torres J, Iñiguez-de-la-Torre I, Nouvel P, Varani L, Sangaré P, Ducournau G, Gaquière C, Mateos J and González T**, " Room Temperature Direct and Heterodyne Detection of 0.28–0.69-THz Waves Based on GaN 2-DEG Unipolar Nanochannels ",. IEEE Trans. Electron Devices **63**, 353–359 (2016). <https://doi.org/10.1109/TED.2015.2503987>.
- [21] **Siles JV, Grajal J**. " Physics-based design and optimization of Schottky diode frequency multipliers for terahertz applications" . Microwave Theory and Techniques, IEEE Transactions; 58(7):1933-1942; (2010).
- [22] **Eisele H**. "State of the art and future of electronic sources at terahertz frequencies". Electronics Letters; 46(26):s8-s11; (2010).
- [23] **Alderman B, Henry M, Maestrini A, Grajal J, et al**. "High power frequency multipliers to 330 GHz". Microwave Integrated Circuits Conference (EuMIC), 2010 European; (2010).
- [24] **Maestrini A, Ward JS, Gill JJ, Lee C, Thomas B, Lin RH, et al**. " A frequency-multiplied source with more than 1 mW of power across the 840-900-GHz band ". Microwave Theory and Techniques, IEEE Transactions; 58(7):1925-1932; (2010).
- [25] **Lee C, Ward J, Lin R, Schlecht E, et al**. "A wafer-level diamond bonding process to improve power handling capability of submillimeter-wave Schottky diode frequency multipliers". Microwave Symposium Digest, 2009. MTT'09. IEEE MTT-S International: IEEE; (2009).
- [26] **Pukala D, Samoska L, Gaier T, Fung A, Mei X, Yoshida W, et al**. " Submillimeter-wave InP MMIC amplifiers from 300-345 GHz". Microwave and Wireless Components Letters, IEEE; 18(1):61-63; (2008).
- [27] **Schwierz F**. "An electron mobility model for wurtzite GaN". Solid-state electronics; 49(6):889-895; (2005).
- [28] **Siles JV, Grajal J**. " Capabilities of GaN Schottky multipliers for LO power generation at millimeter-wave bands". Proc. 19th International Symposium on Space Terahertz Technology; (2008).
- [29] **Kai C, Thrower WF, Hayashibara GM**. "Millimeter-wave silicon IMPATT sources and combiners for the 110-260 GHz range". Microwave Symposium Digest, 1981 IEEE MTT-S International; (1981).
- [30] **Ino M, Ishibashi T, Ohmori M. C.W**. "oscillation with p+-p-n+ silicon IMPATT diodes in 200 GHz and 300 GHz bands". Electronics Letters; 12(6):148-149; (1976).
- [31] **Wu YF, Moore M, Saxler A, Wisleder T, et al**. "40-W/mm double field-plated GaN HEMTs". Device Research Conference, 2006 64th; (2006).
- [32] **Mishra UK, Shen L, Kazior TE, Wu Y**. "GaN-based RF power devices and amplifiers". Proc IEEE; 96(2):287-305 ;(2008).
- [33] **Khalid A, Pilgrim NJ, Dunn GM, Holland MC, Stanley CR, Thayne IG, et al**. "A planar Gunn diode operating above 100 GHz". Electron Device Letters, IEEE; 28(10):849- 851 ;(2007).
- [34] **Maricar MI, Glover J, Khalid A, Li C, Evans G, Cumming DS, et al**. "An AlGaAs/GaAsbased planar Gunn diode oscillator with a fundamental frequency operation of 120 GHz". Microwave Opt Technol Lett; 56(10):2449-2451; (2014).
- [35] **Andreas Westlund**, thèse de doctoral, "Self-Switching Diodes for Zero-Bias Terahertz Detection", Université des Technologies, Gothenburg, Sweden (2015).
- [36] **J. B. Gunn**, "Microwave oscillations of current in III-V semiconductors," Solid-State Communications, **1**, 88 (1963).
- [37] **H. Ibach et al**. book: "Solid-State Physics-An Introduction to Principles of Materials Science". Springer Verlag, (2003).
- [38] **X. Tang**, thèse de doctorat, « Optimisation théorique et expérimental de composants hyperfréquence de la filière nitrure de Gallium à partir d'études physico-thermiques et électriques », Université des sciences et technologies de Lille, France (2013).



- [39] **G. S. Hobson**, book: "The Gunn Effect": Clarendon Press, Oxford (1974).
- [40] **N. Couch, et al.**, "Hot electron injection in millimetre wave Gunn diodes," *Solid-State Electronics*, 32, 1685 (1989).
- [41] **Nigel Priestley and Novak Farrington**, "Millimetre-Wave Gunn diode technology and applications", (2010) .<https://www.semanticscholar.org/paper/MILLIMETRE-WAVE-GUNN-DIODE-TECHNOLOGY-AND-Priestley-Farrington/41e9ac4b5856be568fb1dfcce3d8ba6958d93452#related-papers>.
- [42] **Garcia S, Iniguez-de-la-Torre I, Perez S, Mateos J, Gonzalez T.** "Numerical study of sub-millimeter Gunn oscillations in InP and GaN vertical diodes: Dependence on bias, doping, and length". *J Appl Phys*; 114(7):074503; (2013).
- [43] **R. P. Joshi, S. Viswanadha, P. Shah, and R. D. Del Rosario**, " Monte Carlo analysis of GaN-based Gunn oscillators for microwave power generation", *J. Appl. Phys.* 93, 4836-4842 (2003).
- [44] **S. M. Townsend**, PhD thesis "AlGaAs/GaAs graded gap Gunn diodes for autonomous intelligent cruise control radar applications", University of Manchester, UK (1999).
- [45] **A. Song, et al.**, "Diode-like characteristics of nanometer-scale semiconductor channels with a broken symmetry," *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, **21**, 1116 (2004).
- [46] **C. Balocco, et al.**, "Low-frequency noise of unipolar nanorectifiers," *Applied Physics Letters*, **99**, 113511 (2011).
- [47] **J. Kettle, et al.**, "Fabrication of poly (3-hexylthiophene) self-switching diodes using thermal nanoimprint lithography and argon milling," *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures*, **27**, 2801 (2009).
- [48] **A. Song, et al.**, "Nanometer-scale two-terminal semiconductor memory operating at room temperature," *Applied Physics Letters*, 86, 042106 (2005).
- [49] **M. Aberg, et al.**, "Silicon self-switching-device based logic gates operating at room temperature," *Proceedings of the Norchip Conference*, 40 (2004).
- [50] **M. Aberg and J. Saijets**, "DC and AC characteristics and modeling of Si SSD-nano devices," *Proceedings of the European Conference on Circuit Theory and Design*, 1/15 (2005).
- [51] **M. Aberg, et al.**, "Simulation and modeling of self-switching devices," *Physica Scripta*, 123 (2004).
- [52] **K. Xu, G. Wang, and A. Song**, "Gunn oscillations in a self-switching nanodiode," *Applied Physics Letters*, 93, 233506 (2008).
- [53] **G. Farhi, et al.**, "Electrical characteristics and simulations of self-switching diodes in SOI technology," *Solid-State Electronics*, **51**, 1245 (2007).
- [54] **C. Gaquiere, et al.**, "Wide band gap self-switching nanodevices for THz applications at room temperature," *European Microwave Integrated Circuits Conference*, 589 (2011).
- [55] **T. Gonzalez, et al.**, "Monte Carlo analysis of Gunn oscillations in narrow and wide band-gap asymmetric nanodiodes," *Journal of Physics: Conference Series*, 012018 (2009).
- [56] **T. Gonzalez, et al.**, "THz generation based on Gunn oscillations in GaN planar asymmetric nanodiodes," *International Conference on Indium Phosphide & Related Materials*, 1 (2010).
- [57] **K. Xu, et al.**, "Study of THz Oscillations in GaN-Based Planar Nanodevices," *Symposium on Photonics and Optoelectronics*, 1 (2010).
- [58] **L. A. Majewski, et al.**, "Fast polymer nanorectifiers for inductively coupled RFID tags," *Mater. Sci. Eng. B*, 147, 289 (2008).
- [59] **J. Kettle, R. Perks, and R. Hoyle**, "Fabrication of highly transparent self-switching diodes using single layer indium tin oxide," *Electronics Letters*, 45, 79 (2009).
- [60] **M. Y. Irshaid, et al.**, "Zinc-oxide-based planar nanodiodes operating at 50 MHz," *Applied Physics Letters*, 99, 092101 (2011).



- [61] **J. Kettle, et al.**, "Fabrication of planar organic nanotransistors using low temperature thermal nanoimprint lithography for chemical sensor applications," *Nanotechnology*, 21, 075301 (2010).
- [62] **E. Lausecker, et al.**, "Self-aligned imprint lithography for top-gate amorphous silicon thin-film transistor fabrication," *Applied Physics Letters*, 96, 263501 (2010).
- [63] **Y. Huang, et al.**, "Top-gate amorphous silicon TFT with self-aligned silicide source/drain and high mobility," *Electron Device Letters, IEEE*, 29, 737 (2008).
- [64] **C. Balocco and A. Song**, "Novel Semiconductor Nanodevices for Detections of THz Signals", 1st IEEE International Conference on Nano/Micro Engineered and Molecular Systems, 1292 (2006).
- [65] **T. González, I. Iñiguez-de-la Torre, D. Pardo, J. Mateos and A. M. Song**, "Monte Carlo analysis of Gunn oscillations in narrow and wide band-gap asymmetric nanodiodes", *Journal of Physics: Conference Series* 193 (2009) 012018.
- [66] **A. Iniguez-de-la-Torre, I. Iniguez-de-la-Torre, J. Mateos, and T. Gonzalez**, "Correlation between low-frequency current-noise enhancement and high-frequency oscillations in GaN-based planar nanodiodes: A Monte Carlo study", *APPLIED PHYSICS LETTERS* 99, 062109 (2011)
- [67] **J. Torres, P. Nouvel, A. Penot, L. Varani, P. Sangaré, B. Grimbert, M. Faucher, G. Ducournau, C. Gaquière, I. Iniguez-de-la-Torre, J. Mateos and T. Gonzalez**, "Nonlinear nanochannels for room temperature terahertz heterodyne detection", *Semicond. Sci. Technol.* 28 (2013) 125024.
- [68] **J. F. Millithaler, I. Iñiguez-de-la-Torre, T. González, J. Mateos, P. Sangaré, G. Ducournau, C. Gaquiere**, "Monte Carlo analysis of thermal effects in self-switching diodes", published in: (2013) Spanish Conference on Electron Devices, DOI: 10.1109/CDE.2013.6481338.
- [69] **I. Iñiguez-de-la-Torre, C. Daher, J.F. Millithaler, J. Torres, P. Nouvel, L. Varani, P. Sangaré, G. Ducournau, C. Gaquière, T. González**, "Operation of GaN Planar Nanodiodes as THz Detectors and Mixers", *IEEE TRANSACTIONS ON TERAHERTZ SCIENCE AND TECHNOLOGY*, VOL. 4, NO. 6, (2014).
- [70] **H Sánchez-Martín, S Sánchez-Martín, I Iñiguez-de-la-Torre, S Pérez, J A Novoa, G Ducournau, B Grimbert, C Gaquière, T González and J Mateos**, "GaN nanodiode arrays with improved design for zero-bias sub-THz detection", *Semicond. Sci. Technol.* 33 09501 ;(2018).
- [71] **Daniel Fritsch, Heidemarie Schmidt, and Marius Grundmann**, "Band-structure pseudopotential calculation of zinc-blende and wurtzite AlN, GaN, and InN" *Phys. Rev. B* 67, 235205 (2003).
- [72] **Nicolas DEFRA_CE**, "Caractérisation et modélisation de dispositifs de la filière nitrure pour la conception de circuits intégrés de puissance hyperfréquences" Thèse de doctorat de l'Université des Sciences et Technologies de Lille, (2007).
- [73] **Heinz Schulz and K.H. Thiemann**, "Crystal structure refinement of Al and Ga" *Solid State Communications* 23, 815 (1977).
- [74] **Fabio Bernardini and Vincenzo Fiorentini**, "Spontaneous polarization and piezoelectric constants of III-V nitrides" *Physical Review B* 56, 10024 (1997).
- [75] **Nicolas Vellas**, "Etudes Expérimentales de Transistors HFET de la Filière Nitrure de Gallium pour des Application de Puissance Hyperfréquences" Thèse de doctorat de l'Université de Lille, France, (2003).
- [76] **O. Ambacher, J. Smart, J. R. Shealy, N. G. Weimann, K. Chu, M. Murphy, W. J. Schaff, L. F. Eastman, R. Dimitrov, L. Wittmer, and M. Stutzmann, W. Rieger and J. Hilsenbeck**, "Two-dimensional electron gases induced by spontaneous and piezoelectric polarization charges in N and Ga-face AlGaIn/GaN heterostructures" *Journal of Applied Physics*, 85, 3222 (1999).
- [77] **H. Morkoç, S. Strite, G. B. Gao, M. E. Lin, B. Sverdlov, and M. Burns**, "Largeband-gap SiC, III-V nitride, and II-VI ZnSe-based semiconductor device technologies" *Journal of Applied Physics*, 76, 1363 (1994).



- [78] **Nicolas BARON**, "Optimisation de l'épitanie sous jets moléculaires d'hétérostructures à base de Ga : application aux transistors à haute mobilité d'électrons sur substrat silicium" Thèse de doctorat de l'Université de Nice-Sophia Antipolis, (2009).
- [79] **I. Vurgaftman and J. R. Meyer**, "Band parameters for nitrogen-containing semiconductors" *Journal of Applied Physics* 94, 3675 (2003).
- [80] **J. P. Ibbetson, P. T. Fini, K. D. Ness, S. P. DenBaars, J. S. Speck, and U. K. Mishra**, "Polarization effects, surface states, and the source of electrons in AlGaIn/GaN heterostructure field effect transistors" *Applied Physics Letters* 77, 250 (2000).
- [81] **G. Koley, M. G. Spencer**, "On the origin of the two-dimensional electron gas at the AlGaIn/GaN heterostructure interface" *Applied Physics Letters* 86, 42107 (2005).
- [82] **L. Hsu and W. Walukiewicz**, "Effect of polarization fields on transport properties in AlGaIn/GaN heterostructures" *Journal of Applied Physics*, 89, 1783 (2003).
- [83] **Yifei Zhang, I. P. Smorchkova, C. R. Elsass, Stacia Keller, James P. Ibbetson, Steven Denbaars, and Umesh K. Mishra, Jasprit Singh**, "Charge control and mobility in AlGaIn/GaN transistors: Experimental and theoretical studies" *Journal of Applied Physics*, 87, 7981 (2000).
- [84] **Sten Heikman, Stacia Keller, Yuan Wu, James S. Speck, Steven P. DenBaars, and Umesh K. Mishra**, "Polarization effects in AlGaIn/GaN and GaN/AlGaIn /GaN heterostructures" *Journal of Applied Physics*, 93, 10114 (2003).
- [85] **A. Asgari, M. Kalafi, and L. Faraone**, "Effects of partially occupied sub-bands on two-dimensional electron mobility in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ heterostructures" *Journal of Applied Physics*, 95, 1185 (2004).



CHAPITRE 2:

SIMULATION 2D ET 3D SOUS ENVIRONNEMENT ATLAS-SILVACO DES SSDS A BASE DE GAN

SOMMAIRE

1. INTRODUCTION	161
2. LE SIMULATEUR SILVACO	162
2.1 PRESENTATION DU LOGICIEL SILVACO	162
2.2 PHYSIQUE DU DISPOSITIF	165
2.3 MODELES PHYSIQUES	167
3. SIMULATION DES SSDS	173
3.1 SIMULATION ATLAS DES SSDs à 2D	176
3.2 SIMULATION ATLAS DES SSDs à 3D	184
4. CONCLUSION	190



1. INTRODUCTION

Le calcul/la simulation à l'aide de la modélisation permet de concevoir, tester et évaluer rapidement des dispositifs à semiconducteurs sans les fabriquer physiquement. Cela se traduit par d'énormes avantages en termes de réduction des coûts et de réduction considérable des délais de mise sur le marché, car différentes structures de dispositifs peuvent être étudiées en très peu de temps. Les packages de simulation disponibles à présent sont des outils très puissants, répondant aux normes industrielles. Ceux-ci sont souvent utilisés pour obtenir des paramètres de performance du dispositif tels que les profils de potentiel, de porteurs et de courant au sein du dispositif pendant le fonctionnement, qui ne peuvent pas être mesurés expérimentalement.

Les dispositifs à semiconducteurs peuvent être modélisés de deux manières. L'une consiste à déterminer les propriétés électriques des terminaux d'un périphérique en fonction de résultats empiriques et à modéliser celui-ci à l'aide de techniques telles que l'ajustement de la spline (**spline fitting**¹). L'autre méthode consiste à étudier les processus de transport des porteurs se déroulant dans le dispositif. Ce dernier, basé sur la physique et utilisé dans ce travail, offre trois avantages majeurs: i) il est prédictif, ii) il fournit un aperçu, et iii) il capte les connaissances de manière à faciliter la compréhension des divers phénomènes agissant au sein du dispositif.

Ce chapitre débutera par une présentation du logiciel SILVACO, logiciel qui est utilisé pour mener à bien nos simulations, puis par la présentation des résultats obtenus.

La première partie sera consacrée à l'explication des différents outils de SILVACO, en particulier l'outil ATLAS qui permet d'établir le code de simulation de dispositifs électroniques. Nous présenterons aussi les différents segments du code, de la définition de la structure à l'obtention des résultats. Les modèles physiques qui vont être utilisés pour nos simulations seront aussi présentés.

Le but de notre étude est de développer un modèle de simulation sous ATLAS-SILVACO des dispositifs SSDs à base de GaN et de le valider. Ainsi, la deuxième partie sera consacrée aux résultats de simulations d'ATLAS à 2D et d'ATLAS à 3D obtenus par les différentes structures SSDs à base de GaN. Une comparaison entre les résultats des deux systèmes de simulation 2D et 3D et les résultats expérimentaux sera abordée. Ces résultats seront suivis par quelques modestes interprétations physiques. Une deuxième comparaison entre les résultats obtenus par simulation ATLAS 3D, simulation Monte-Carlo et expérimentaux des SSDs à large canal sera analysée.

¹ **spline fitting** est une méthode d'ajustement d'une courbe lisse à un ensemble d'observation de bruit en utilisant une fonction spline - un polynôme lisse par morceaux qui peut être utilisé pour représenter des fonctions sur de grands intervalles, où il serait peu pratique d'utiliser un seul polynôme approximatif.



2. LE SIMULATEUR SILVACO

2.1 PRESENTATION DU LOGICIEL SILVACO

Le progiciel de simulation utilisé dans ce travail est un simulateur commercial ATLAS de SILVACO. Les packages SILVACO sont devenus un outil majeur pour les entreprises de semiconducteurs qui souhaitent acquérir des capacités de simulation basées sur la physique car les dispositifs à semiconducteurs sont de plus en plus petits et rapides et la conception et les performances des circuits intégrés dépendent de plus en plus des effets liés au processus. SILVACO est également le principal fournisseur de logiciels de conception assistée par ordinateur (TCAD) pour les simulations semiconducteurs/électroniques. Parmi les principaux outils inclus dans ce logiciel, citons ATHENA, ATLAS, DECKBUILD, TONYPLOT, etc... Tout au long de ce travail, les dispositifs ont été construits à l'aide de DECKBUILD et les simulations ont été exécutées dans ATLAS. Les sorties ont été visualisées avec TONYPLOT. Un résumé sur les outils utilisés est donné ci-après.

2.1.1 DECKBUILD

Interactive Runtime Environment est l'environnement central permettant l'utilisation interactive de simulateurs de processus et de périphériques. Il fournit de nombreuses fonctionnalités importantes. Une interface utilisateur graphique pour la spécification de plateforme d'entrée (input deck) permet aux utilisateurs d'éviter la syntaxe de saisie spécifique au simulateur. Les informations sont saisies dans une série de fenêtres contextuelles. Lorsque la spécification est terminée, DECKBUILD produit automatiquement un jeu d'entrée syntaxiquement correct. Les decks peuvent être édités par l'utilisateur à tout moment. Plusieurs decks sont générés si les paramètres d'entrée sont mis en boucle et peuvent être extraits des résultats calculés. Plusieurs simulateurs peuvent être appelés à partir d'une même plateforme d'entrée (input deck) et le transfert d'informations entre les simulateurs est transparent pour l'utilisateur. DECKBUILD permet à l'utilisateur de contrôler avec précision le fonctionnement, l'arrêt, la pause ou le redémarrage d'une plateforme d'entrée (input deck) en une seule étape. Il fournit une fonction d'historique qui permet à l'utilisateur de revenir en arrière sur un point précédent du jeu, puis de poursuivre les calculs à partir de ce point précédent. Cette fonctionnalité est extrêmement utile pour développer de manière interactive une spécification de flux de processus simulée.

2.1.2 ATLAS

ATLAS de SILVACO est un simulateur de semiconducteurs qui a été largement utilisé dans les milieux universitaires et industriels. Les entreprises notables qui utilisent ATLAS sont Advanced Micro Devices Corporation, Harris Semiconductor, la NASA, Sensitron Semiconductor et Science



Applications International Corporation (SAIC). Parmi les établissements d'enseignement qui utilisent ATLAS figurent l'Université de Californie à Berkeley, l'Université de Stanford et l'Université de Californie à San Diego. Depuis les années 1970, ATLAS a été continuellement perfectionné pour être plus réaliste dans une large gamme de configurations de dispositifs à semiconducteurs.

ATLAS est un logiciel polyvalent, modulaire et extensible pour la simulation des dispositifs en deux et trois dimensions. La simulation est réalisée en discrétisant les équations décrivant le fonctionnement d'un dispositif sur un réseau à deux ou trois dimensions, constituée d'un grand nombre de points de la grille appelés nœuds. Le logiciel de simulation ATLAS est construit autour de modèles basés sur la physique. Ces modèles basés sur la physique sont essentiellement une description mathématique des différents phénomènes, tels que la génération de porteurs, la recombinaison et le transport, responsables du fonctionnement du dispositif. Les modèles décrivent la dynamique de la génération de porteurs, de la recombinaison et de l'injection ainsi que du transport dans différentes régions matérielles du dispositif et du couplage entre les régions. Ces modèles sont quantifiés en équation différentielle et transposés sur le réseau pour simuler le transport de porteurs à travers une structure de dispositif. Les concentrations en électrons et en trous sont calculées, ainsi que leur variation spatiale et leur dépendance aux propriétés du matériau, ainsi que leur polarisation. Le simulateur prédit également les caractéristiques électriques du dispositif, par exemple les courants aux bornes associés aux structures physiques spécifiées et à différentes conditions de polarisation. Ces résultats peuvent être utilisés pour caractériser le fonctionnement en courant continu et alternatif du dispositif et pour fournir des informations sur les aspects physiques de son fonctionnement, à condition qu'ils incluent toute la physique importante du dispositif. Ces modèles consistent en un ensemble d'équations fondamentales reliant le potentiel électrostatique, la densité de charge et les densités de porteurs dans un domaine de simulation. Un avantage important de ce type de modèle réside dans le fait qu'il peut non seulement être utilisé pour prédire les caractéristiques courant-tension aux bornes des dispositifs aux fins de comparaison avec les mesures des dispositifs, mais également pour rechercher les origines du comportement observé et les facteurs limitant les performances du dispositif.

ATLAS résout trois types d'équations fondamentaux lors de la simulation d'un dispositif à semiconducteur: l'équation de Poisson, les équations de continuité et les équations de transport, y compris les modèles de transport de drift-diffusion et Energy Balance, qui seront expliqués plus loin dans ce chapitre. L'équation de Poisson relie la densité de charge d'espace au potentiel électrostatique et permet de calculer les champs électriques en fonction du potentiel. Les équations de transport sont toutes dérivées de l'équation de transport de Boltzmann. Pour la plupart des applications, le modèle de transport drift-diffusion est utilisé. Le modèle de transport Energy Balance



ou les modèles hydrodynamiques sont jugés nécessaires aux simulations uniquement pour les petits dispositifs submicroniques

2.1.3 Entrées et sorties ATLAS

Comme indiqué ci-dessous, la plupart des simulations ATLAS utilisent deux entrées: un fichier texte contenant des commandes à exécuter par ATLAS et un fichier de structure définissant la structure à simuler. ATLAS produit trois types de sortie. La sortie au moment de l'exécution fournit un guide sur la progression des simulations en cours d'exécution. Elle contient les messages d'erreur et d'avertissement. Les fichiers log stockent toutes les tensions et tous les courants du terminal à partir de l'analyse du périphérique, et les fichiers de solution stockent des données bidimensionnelles et tridimensionnelles relatives aux valeurs des variables de solution dans le périphérique pour un seul point de polarisation.

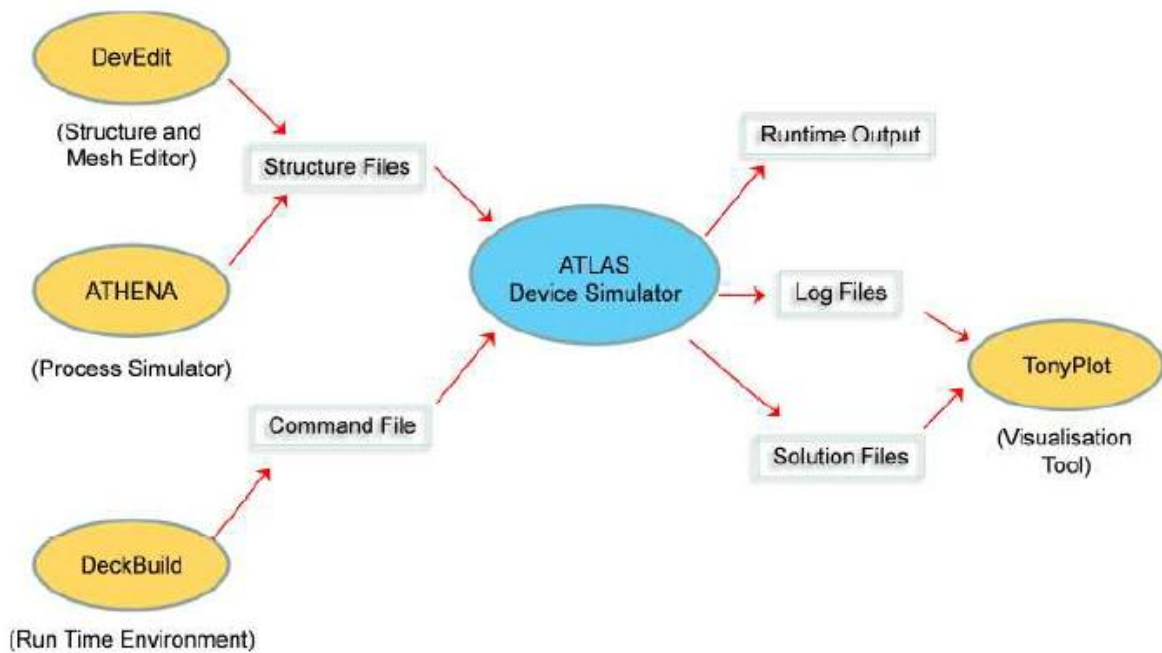


Figure 1: Entrées et sorties d'ATLAS ^[1].

Chaque fichier d'entrée doit contenir ces cinq groupes dans l'ordre. Si on ne le fait pas, cela provoquera généralement un message d'erreur et l'arrêt du programme, et cela pourrait entraîner un fonctionnement incorrect du programme. Par exemple, les paramètres de matériau ou les modèles introduits dans le mauvais ordre peuvent ne pas être utilisés dans les calculs. L'ordre des instructions dans la définition du maillage, la définition structurelle et les groupes de solutions est également important. ATLAS utilise son sous-moteur «Blaze» pour les simulations de dispositifs à



hétérostructure. Blaze est un simulateur des dispositifs 2D polyvalent utilisé pour les matériaux III-V. Il est appelé par défaut pour les hétérostructures ayant une structure de bande dépendante de la position. Pendant les simulations, il modifie les équations de transport de charge pour prendre en compte les effets des structures de bande dépendantes de la position ^[1].

2.1.4 TONYPLOT

TONYPLOT (outil de visualisation) fournit des fonctionnalités complètes de visualisation scientifique interactive. Tous les moyens habituels d'affichage des données scientifiques sont pris en charge. Ceux-ci comprennent les tracés x-y avec axes linéaires et logarithmiques, les tracés de surface et de contour, les diagrammes de Smith et les tracés polaires. L'utilisateur peut spécifier pratiquement toutes les caractéristiques des tracés, y compris le texte et la position des labels. Des capacités complètes de copie papier sont également prises en charge. TONYPLOT comprend des fonctionnalités d'animation permettant de visualiser une séquence de graphiques de manière à présenter des solutions en fonction de certains paramètres. Le paramètre peut être modifié sous le contrôle du curseur, ou les images peuvent être bouclées en continu, une fonctionnalité très utile pour développer une vision physique.

2.2 PHYSIQUE DU DISPOSITIF

La technique de simulation est une technique numérique qui parvient aux caractéristiques terminales du dispositif en résolvant les équations aux dérivées partielles décrivant la physique des matériaux et les effets des potentiels et des hétérojonctions sur le transport des porteurs. Ces équations comprennent l'équation de Poisson, les équations de continuité des porteurs et les équations de transport de chaque porteur (électrons et trous). Ces équations doivent être résolues simultanément et de manière cohérente dans chaque région du dispositif. Ici, une brève description des équations de base des semiconducteurs impliquées est fournie.

2.2.1 Equation de Poisson

L'équation de Poisson concerne la distribution du champ électrique dans l'espace de charge et est donnée en une dimension par ^[2] :

$$\frac{dE(x)}{dx} = \frac{q}{\epsilon_s} (p - n + N_d^+ - N_a^-) \quad \text{Eq.1}$$

où $E(x)$ est le champ électrique, ϵ_s la constante diélectrique du semiconducteur, p et n les concentrations en porteurs et N_d^+ et N_a^- les concentrations dues aux impuretés ionisées de type donneur et accepteur, respectivement. Ces paramètres dépendent de la position x . Il est clair que le



dopage, dans chaque région du dispositif doit être spécifié dès le départ afin de décrire le champ électrique partout dans le dispositif. Une autre forme de l'équation de Poisson est obtenue lorsque le champ électrique $E(x)$ (Eq.1) est remplacé par $-dV/dx$ comme indiqué en Eq.2. En général, les deux équations sont désignées par l'équation de Poisson.

$$E(x) = -\frac{dV}{dx} \quad \text{Eq.2}$$

2.2.2 Equations de continuité des porteurs

Les équations de continuité pour les électrons et les trous sont données par ^[1]:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \nabla \cdot J_n + G_n - R_n \quad \text{Eq.3}$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{1}{q} \nabla \cdot J_p + G_p - R_p \quad \text{Eq.4}$$

où n et p sont les concentrations d'électrons et de trous, J_n et J_p les densités totales de courant d'électrons et de trous, G_n et G_p les taux de génération d'électrons et de trous dus à l'absorption optique, R_n et R_p les taux de recombinaison nets d'électrons et trous, respectivement, et q la charge de l'électron. Les taux de recombinaison, R_n et R_p sont proportionnels à la concentration de porteurs en excès et sont donnés par $R_n = (n - n_0)/\tau_n$ et $R_p = (p - p_0)/\tau_p$ où τ_n et τ_p sont des durées de vie des électrons et des trous, respectivement.

2.2.3 Equations de transport

Les équations 1, 3 et 4 fournissent le cadre général pour la simulation de dispositifs. Cependant, d'autres équations secondaires sont nécessaires pour spécifier des modèles physiques particuliers pour: J_n , J_p , G_n , R_n , G_p et R_p . Les équations de densité de courant, ou modèles de transport de charge, sont généralement obtenues en appliquant des approximations et des simplifications à l'équation de transport de Boltzmann. Ces hypothèses peuvent donner lieu à différents modèles de transport, tels que le modèle de Drift-Diffusion, le modèle Energy balance ou le modèle hydrodynamique. Le choix du modèle de transport de charge aura alors une influence majeure sur le choix des modèles de génération et de recombinaison.

Le modèle de transport de charge le plus simple et utile est le modèle Drift-Diffusion. Ce modèle a pour caractéristique attrayante de ne pas introduire de variables indépendantes en plus du potentiel électrostatique et de la concentration en électrons. Jusqu'à récemment, le modèle Drift-Diffusion convenait à presque tous les dispositifs techniquement réalisables. Cependant, l'approximation drift-diffusion devient moins précise pour les plus petites tailles. Les modèles plus avancés d'équilibre



énergétique et d'hydrodynamique sont devenus le choix privilégié pour la simulation de dispositifs submicroniques profonds. ATLAS propose à la fois les modèles Drift-Diffusion et les modèles de transport avancés, qui seront présentés dans la section suivante, où sont discutés les modèles physiques utilisés dans les simulations. D'autres modèles incorporés dans les simulations incluent ceux du mécanisme de génération-recombinaison des porteurs, des effets de saturation de vitesse à des champs électriques élevés, qui seront également abordés dans les sous-sections ultérieures.

2.3 MODELES PHYSIQUES

2.3.1 Statistiques des porteurs et du transport

Au sein d'un semiconducteur, l'équilibre thermique des électrons à la température T_L obéit aux statistiques de Fermi-Dirac. La probabilité d'occupation des électrons pour une énergie donnée est donnée par ^[1]:

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

Si $E - E_F \gg kT_L$ (non-dégénérescence) alors l'équation peut être approximativement écrite sous la forme:

$$f(E) = \exp\left(\frac{E - E_F}{kT_L}\right) \quad \text{Eq.6}$$

Cette approximation est connue sous le nom de statistique de Boltzmann. L'approximation de Boltzmann simplifie les calculs tout en donnant des résultats satisfaisants. Elle a été utilisée dans le modèle pour minimiser les problèmes de convergence par rapport aux statistiques de Fermi-Dirac. Dans ATLAS, l'utilisation de la statistique de Boltzmann a été fixée à son implémentation par défaut ^[1].

Les modèles de transport, les modèles drift-diffusion et Energy balance d'ATLAS ont été exploités pour la modélisation de la diode SSD. Les équations régissant ces modèles sont des connaissances essentielles et sont détaillées ci-dessous. Dans le modèle de la diode SSD, les porteurs ont été sélectionnés en tant qu'électrons et seules les équations se rapportant aux électrons sont présentées.

2.3.1.1 Modèle de transport drift-diffusion

Des dérivées basées sur la théorie du transport de Boltzmann ont montré que les densités de courant dans les équations de continuité peuvent être approximées par un modèle de drift-diffusion. Dans ce cas, la densité de courant pour les électrons est exprimée en fonction du quasi potentiel de Fermi ϕ_n selon l'équation:



$$J_n = q\mu_n n \nabla \phi_n \quad \text{Eq.7}$$

où J_n est la densité de courant des électrons, q la charge de l'électron, n la concentration des électrons et μ_n la mobilité des électrons. Le quasi potentiel de Fermi est alors lié à la concentration des porteurs (n) et au potentiel (V) par l'approximation de Boltzmann:

$$n = n_{ie} \exp\left[\frac{q(V - \phi_n)}{kT_L}\right] \quad \text{Eq.8}$$

où n_{ie} est la concentration intrinsèque effective et T_L la température du réseau. Ceci permet de définir le quasi potentiel de Fermi:

$$\phi_n = V - \frac{kT_L}{q} \ln \frac{n}{n_{ie}} \quad \text{Eq.9}$$

En substituant cette équation (Eq.9) à l'expression de la densité de courant, la relation de courant devient:

$$J_n = qD_n \nabla n - qn\mu_n \nabla V - \mu_n n (kT_L \nabla (\ln n_{ie})) \quad \text{Eq.10}$$

Le terme final rend compte du gradient de la concentration effective en porteurs intrinsèques, qui prend en compte les effets de resserrement des bandes interdites. Le champ électrique effectif est normalement défini comme:

$$E_n = -\nabla \left(V + \frac{kT_L}{q} \ln n_{ie} \right) \quad \text{Eq.11}$$

qui permet d'écrire la formulation plus conventionnelle de l'équation drift-diffusion comme suit:

$$J_n = qn\mu_n E_n + qD_n \nabla n \quad \text{Eq.12}$$

Il convient de noter que cette dérivation du modèle de drift-diffusion a implicitement supposé que la relation d'Einstein était valide. Dans le cas de la statistique de Boltzmann, cela correspond au coefficient de diffusion (D_n) exprimé par:

$$D_n = \frac{kT_L}{q} \mu_n \quad \text{Eq.13}$$

Si les statistiques de Fermi-Dirac sont supposées, cela devient:

$$D_n = \frac{\left(\frac{kT_L}{q} \mu_n\right) F_{1/2} \left\{ \frac{1}{kT_L} (E_{Fn} - E) \right\}}{F_{-1/2} \left\{ \frac{1}{kT_L} (E_{Fn} - E_c) \right\}} \quad \text{Eq.14}$$

Où F_α est l'intégrale de Fermi-Dirac d'ordre α et E_{Fn} est donné par $-q\phi_n$.



2.3.1.2 Modèle de transport Energy balance

La limitation fondamentale du modèle Drift–Diffusion est son hypothèse selon laquelle la température de l'électron (T_n) est égale à la température du réseau (T_L). Avec cette contrainte, des paramètres tels que les taux d'ionisation par impact, la mobilité des porteurs et la vitesse de dérive (v_d) sont liés à un champ électrique local plutôt qu'à la variation spatiale de T_n . En conséquence, il est possible de sous-estimer sérieusement les performances d'un dispositif à des dimensions nanométriques car le dépassement de vitesse est négligé et l'ionisation par impact est surestimée [3,4].

Pour rendre le modèle de drift-diffusion plus précis, il faut que T_n dévie de T_L . Ceci peut être accompli en reliant T_n à l'énergie cinétique moyenne d'un électron, ce qui peut être écrit sous la forme de la somme de la dérive d'un électron et de l'énergie thermique [5] :

$$W_n = \frac{1}{2}nm_e^*v_d^2 + \frac{3}{2}nkT_n \quad \text{Eq.15}$$

où m_e^* est la masse effective de l'électron et v_d la vitesse de dérive.

Ensuite, les gradients de température des électrons sont incorporés dans le modèle Drift–Diffusion en créant une équation de bilan supplémentaire représentant le taux d'énergie perdue par un électron dans le réseau [5]. Cette équation d'équilibre supplémentaire est illustrée ci-dessous [5]:

$$\frac{\partial W_n}{\partial t} = -\nabla \cdot F_n + J_n \cdot \nabla V - \frac{3}{2}nk \left(\frac{T_n - T_L}{\tau_e} \right) + G_n - R_n \quad \text{Eq.16}$$

$$F_n = W_n v_d + nkT_n v_d - K_n \nabla T_n \quad \text{Eq.17}$$

Où K_n représente la conductivité thermique d'un électron et F_n désigne le flux d'énergie entre un électron et le réseau, τ_e le temps de relaxation énergétique; c'est-à-dire le temps nécessaire à la distribution d'énergie (température) pour atteindre l'état d'équilibre avec le champ électrique [6]. Pour compléter la modification du modèle drift-diffusion, l'équation 12 est modifiée pour inclure une dépendance à T_n [5]:

$$J_n = qn\mu_n E_n + qD_n \nabla n + n\mu_n k \nabla T_n \quad \text{Eq.18}$$

Le système d'équations défini par l'équation 3 et 16 à 18 représente ce que l'on appelle le modèle de transport Energy balance. Le modèle peut être activé dans ATLAS en sélectionnant *HCTE.EL* dans la déclaration du modèle. Le modèle hydrodynamique englobe les équations de transport définies par le modèle de Energy balance, mais diffère en ce que les mobilités des porteurs ne sont pas affectées par les températures des porteurs. Le modèle hydrodynamique est appliqué en définissant la constante de proportionnalité de -1 (pour Energy balance) à 0 dans l'instruction du modèle.



2.3.2 Mobilité

La mobilité des porteurs est un paramètre qui caractérise le mouvement de dérive des porteurs en présence d'un champ électrique. Les électrons et les trous sont accélérés par les champs électriques, mais perdent de leur quantité de mouvement en raison de divers processus de diffusion impliquant des vibrations de réseau, des ions d'impureté, des défauts d'interfaces et d'autres imperfections^[7,8]. Les effets de ces phénomènes microscopiques sont moyennés et regroupés dans le paramètre macroscopique appelé mobilité, qui est fonction du champ électrique local, de la concentration de dopage et de la température.

Dans la diode SSD, comme dans d'autres dispositifs à porteurs d'électrons, les électrons sont accélérés par le champ électrique. Les porteurs sont presque en équilibre avec le réseau à des valeurs de champ faibles. La mobilité des électrons est donc fonction d'une faible valeur du champ électrique dûe à la diffusion des phonons et aux impuretés. Cependant, les porteurs ne sont plus en équilibre à des champs électriques élevés et sont donc soumis à une gamme plus étendue de processus de diffusion. Par conséquent, la vitesse de dérive n'augmente plus linéairement et devient saturée ou diminue, ce qui est appelé vitesse de saturation. Ces effets doivent être pris en compte à l'aide des modèles appropriés^[1]. ATLAS et son sous-moteur Blaze fournissent divers modèles de champs faibles et élevés qui peuvent être utilisés en fonction du dispositif et de son fonctionnement. Les modèles utilisés pour les simulations vont maintenant être discutés.

2.3.2.1 Mobilité à faible champ

ATLAS propose cinq modèles et conditions distinctifs pour définir la mobilité électrique en champ faible en GaN^[1]:

- Le paramètre de mobilité de champ faible, MUN ($cm^2/V.s$), peut être défini à partir de la table de référence ATLAS pour différents matériaux. La valeur est définie dans la déclaration de mobilité.
- Le modèle de mobilité basé sur la concentration $CONMOB$ peut être utilisé. Les valeurs pour une mobilité de champ faible à 300 K sont extraites du tableau de référence ATLAS pour la concentration de dopage dans chaque région.
- Afin de relier la mobilité des électrons à faible champ à la concentration des impuretés et à la température, les modèles $ANALYTIC$ et $ARORA$ peuvent être utilisés.
- Un modèle de diffusion porteur-porteur, $CCSMOB$, qui associe la mobilité de champ faible à la concentration de porteur et à la température, peut être utilisé.
- Le modèle unifié de mobilité à faible champ, $KLAASSEN$, établit une relation entre la mobilité de champ faible et le réseau, porteur- porteur, la diffusion des donneurs et la température.



Lors de la formulation d'une structure inconnue pouvant être constituée de matériaux semiconducteurs multicouches, dont les propriétés électriques sont inconnues, il sera utile d'examiner soigneusement chaque modèle de faible mobilité pouvant s'appliquer à chaque couche ou matériau, afin que la mobilité de l'ensemble du dispositif puisse être prédite avec précision. Dans le cas du dispositif SSD utilisé dans ce travail, les propriétés 2DEG de l'hétérostructure basées sur AlGaIn/GaN sont largement connues [9-11]. Le modèle le plus simple de définition du paramètre de mobilité de champ faible à l'aide de MUN est appliqué avec une valeur de $1200 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ [12, 13]. Le modèle de haut champ électrique est discuté ci-dessous.

2.3.2.2 Mobilité parallèle en fonction du champ électrique

ATLAS propose deux types de modèles de mobilité dépendante du champ électrique (*FLDMOB*) pour modéliser le transport d'électrons à champs élevés. Les modèles sont nommés modèle de mobilité standard et modèle de mobilité différentielle négative, qui contiennent tous les deux des valeurs de paramètre par défaut appropriées pour différents matériaux. Les modèles sont définis en spécifiant *EVSATMOD* avec le *FLDMOB* dans l'instruction de modèle.

L'*EVSATMOD* spécifie quel modèle de mobilité dépendant du champ parallèle doit être utilisé pour les électrons, définis comme [1]:

- *EVSATMOD* = 0 permet l'application du modèle de mobilité standard
- *EVSATMOD* = 1 implémente le modèle de saturation de mobilité différentielle négative.

Le modèle de mobilité différentielle négative de Barnes [14] a été utilisé pour le transport de champ électrique élevé. La mobilité des électrons, en fonction du champ électrique, est donnée par:

$$\mu(E) = \frac{\mu_0 + \frac{v_{sat}}{E} \left(\frac{E}{E_{CRIT}} \right)^\Gamma}{1 + \left(\frac{E}{E_{CRIT}} \right)^\Gamma} \quad \text{Eq.19}$$

où v_{sat} est la vitesse de saturation des électrons, μ_0 la mobilité électronique dans les champs faibles, E_{CRIT} le champ électrique critique en V/cm, Γ une constante d'ajustement égale à 2 et E le champ électrique. Le champ électrique critique pour le GaN a été défini comme $E_{CRIT} = 17 \times 10^4 \text{ V/cm}$ [9]. Pour le dispositif modélisé à 300 K, une valeur de vitesse de saturation de $3 \times 10^7 \text{ cm/s}$ a été utilisée [15].



2.3.3 Modèles de génération–recombinaison des porteurs

Les processus responsables de la génération et de la recombinaison de porteurs se répartissent en six catégories principales:

- Transitions de phonon
- Transitions de photons
- Transitions Auger
- Recombinaison de surface
- Ionisation par impact
- Tunneling

Les six mécanismes de générations-recombinaison sont représentés à l'aide de différents modèles dans ATLAS. Pour la modélisation des diodes SSDs, la recombinaison de Shockley-Read-Hall (SRH) (transition de phonon) a été utilisée.

2.3.3.1 Recombinaison de Shockley-Read-Hall (SRH)

La transition phonon dans un semiconducteur est due à un piège ou à un défaut situé dans sa bande interdite. La théorie de la transition de phonon a été découverte en premier par Shockley et Read ^[16], puis par Hall ^[17]. Le modèle de recombinaison SRH est implémenté comme suit:

$$R_{SRH} = \frac{pn - n_{ie}^2}{\tau_{p0} \left[n + n_{ie} \exp\left(\frac{E_{TRAP}}{kT_L}\right) \right] + \tau_{n0} \left[p + n_{ie} \exp\left(\frac{-E_{TRAP}}{kT_L}\right) \right]} \quad \text{Eq.20}$$

où τ_{p0} et τ_{n0} sont les durées de vie des électrons et des trous, dont la valeur a été prise égale à 1.0×10^{-8} s pour GaN ^[9]. E_{TRAP} désigne l'énergie du piège par rapport au niveau de Fermi intrinsèque en eV. Sa valeur par défaut ($E_{TRAP} = 0$) a été utilisée traduisant une recombinaison efficace dûe au piège présent dans le matériau. T_L est la température du réseau en degrés Kelvin. Le modèle a été activé en définissant SRH dans la déclaration de modèle.



L'ensemble complet des modèles physiques utilisés dans les simulations de diodes SSDs est résumé dans le tableau 1.

Paramètres	Model	Syntaxe
Transport	Equilibre énergétique	<i>HCTE.EL</i>
Mobilité	Mobilité dépendante du champ électrique parallèle (Parallel Electric Field Dependent)	<i>FLDMOB</i>
	Mobilité différentielle négative	<i>EVSATMOD=1</i>
Génération-recombinaison des porteurs	Shockly-Read-Hall	<i>SRH</i>

Tableau 1: Résumé des modèles physiques utilisés dans les simulations de dispositifs SSD.

3. SIMULATION DES SSDS

Dans le chapitre précédant, le SSD planaire a été introduit en citant ses nombreuses fonctions telles que l'émission et la détection THz. La capacité d'émettre un rayonnement THz a également été mise en évidence car elle a été étudiée à l'aide de simulations de Monte Carlo. Dans ce chapitre, les caractéristiques électriques des différentes structures SSDs à base de GaN sont étudiées à l'aide d'une modélisation physique. Le package de simulation ATLAS est utilisé et les modèles développés ont été rapportés à la section précédente.

Le GaN présente plusieurs caractéristiques qui font de ce semiconducteur un candidat prometteur dans les nanodiodes planaires SSDs destiné pour les applications dans le domaine terahertz tel que sa résistance électrique élevée, directement liée à son grand gap énergétique, sa vitesse de saturation maximale et son faible temps de relaxation par rapport aux autres matériaux III-V généralement utilisés dans les diodes SSDs^[9]. L'utilisation de GaN pour le canal SSD a révélé des capacités intéressantes pour la détection de forte puissance, avec des capacités de réponse sur plaquette jusqu'à 100 V/W à 0.3 THz avec 280 pW Hz^{-1/2} de puissance équivalente de bruit (NEP)^[18]. Dans une configuration en espace libre, des valeurs de 2.0 et 0.3 V/W ont été obtenues à 0.30 et 0.69 THz^[19]. Des travaux de simulation Monte Carlo ont analysé la potentialité des nanodiodes asymétriques planaires à base de GaN pour la génération de signaux THz exploitant l'effet Gunn, mais ceci n'a pas encore été prouvé expérimentalement^[20-24]. C'est pourquoi nous avons choisi d'étudier la potentialité des SSDs à base de GaN et d'y analyser en particulier la présence des oscillations de Gunn dans les diodes SSDs à base de GaN.

Les structures des dispositifs SSDs simulées ont été fabriquées par l'Institut d'Electronique de Microélectronique et de Nanotechnologie (IEMN) de Lille et caractérisées au niveau de plusieurs



laboratoires en France (Lille, Montpellier et Paris), en Suède (Gothenburg), en Angleterre (Manchester) et en Espagne (Salamanque).

Ces dispositifs sont fabriqués sur une couche épitaxiale constituée de 1.8 μm de GaN hexagonal non dopé (orientation [0 0 0 1]) sur un substrat Si (111) à haute résistivité (10 k Ω /mm), avec une barrière de 23 nm d' $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}$ et recouvert de 5 nm de SiN pour la passivation. Les valeurs mesurées de la densité n_s se situent dans la plage de $6\text{--}8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, avec une mobilité Hall d'environ 1200 cm^2/Vs . Le GaN non intentionnellement dopé présente une densité d'électrons N_D de l'ordre de 10^{17} cm^{-3} . Le processus de fabrication commence par le dépôt de contacts ohmiques (Ti/Al/Ni/Au, avec une résistance de 0.3 Ω /mm) et l'isolement par implantation ionique (He+). Ensuite, la gravure des tranchées a lieu (avec une résine PMMA et une technologie à base de chlore plasma à couplage inductif). Plusieurs tailles et matrices de diodes SSD ont été traitées. Un effort technologique important a été nécessaire pour obtenir une gravure profonde (45 nm) avec une petite largeur de cavité (50-100 nm) ^[12].

L'équipe de laboratoire de l'université de Salamanque nous a fourni des mesures I-V de deux structures SSDs, une avec une largeur de canal $W=150 \text{ nm}$ et l'autre avec une largeur de canal de 80 nm.

Avant la fabrication des SSDs sur GaN, l'équipe du laboratoire de l'Université de Salamanque (Espagne) ont fait des simulations de différents SSDs en utilisant un code Monte-Carlo à deux dimensions (code développé au sein de leur laboratoire). Ce code est constitué d'un simulateur semi-classique auto-cohérent (self-consistent) couplé avec un solveur d'équation de Poisson à deux dimensions. Ce code a été en perpétuelle évolution durant ces vingt-deux dernières années en prenant en compte les effets physiques présents dans les composants hyperfréquences à base de semiconducteurs III-V. De par son évolution, ce code a permis de prédire et d'optimiser les performances de différentes structures comme les MESFETs, les HEMTs et les composants balistiques et cela pour différents matériaux (GaAs, AlGaAs/GaAs, InAlAs, AlSb/InAs, AlGaIn/GaN) ^[25-28]. En particulier, ce code a été développé pour prédire la présence des oscillations type Gunn dans les dispositifs étudiés dans leurs travaux ^[29-30].

Pour analyser les SSDs dont la géométrie typique est présentée sur la figure 2, les simulations sont réalisées dans le plan XY, par conséquent la structure réelle de la couche n'est pas incluse et seul le canal est simulé.

La figure 2 représente la géométrie typique des SSDs avec L et W qui sont respectivement la longueur et la largeur du canal, W_H la largeur de gravure horizontale, W_V la largeur de la gravure verticale et C la longueur de la zone d'accès au canal.



3.1 SIMULATION ATLAS DES SSDs à 2D

La première partie de simulation est une simulation à deux dimensions 2D où on a pris le même principe de la simulation Monte-Carlo de sorte que les simulations sont réalisées dans le plan XY. Par conséquent la structure réelle de la couche n'est pas incluse et seul le canal est simulé et les modèles physiques invoqués dans les simulations sont choisis pour le transport des porteurs dans la couche active GaN. Cette dernière correspond à la couche où circule le gaz d'électrons 2DEG qui détermine en grande partie les propriétés électroniques du dispositif. Une densité surfacique de charges σ est attribuée aux interfaces semiconducteur/Air pour tenir compte de l'influence des charges de surfaces qui résultent entre autre de l'étape de gravure lors de la fabrication du composant. Sur la figure 3 ci-dessous est représentée, la vue des SSDs à deux dimensions tels que simulé avec la méthode Monte-Carlo et la simulation ATLAS à 2D.

Le dispositif SSD simulé est basé sur l'hétérostructure $Al_{0.3}Ga_{0.7}N/GaN$. Le canal de conduction est conçu pour être de longueur $L = 1 \mu m$ et de largeurs $W = 80 nm$ et $150 nm$. Les autres paramètres géométriques sont définis dans la figure 3. Pour tenir compte de la charge positive fixe de la couche de dopage, un dopage de fond de réseau virtuel $N_v = 1.0 \times 10^{17} cm^{-3}$ est affecté à la couche GaN. Les simulations sont effectuées à température ambiante.

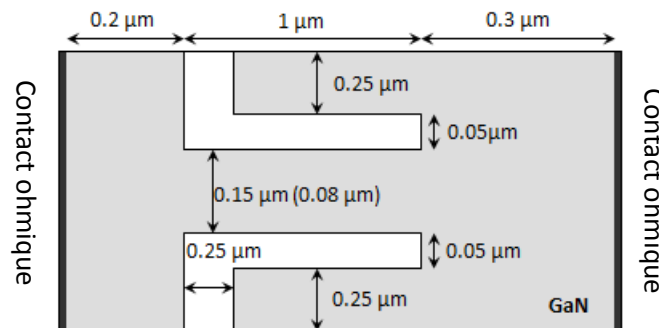


Figure 3: Géométrie du SSD simulé en microns.

3.1.1 Influence de la densité de charge d'interface sur les caractéristiques I-V

Il est bien documenté que la densité de charge d'interface sur les limites semiconducteur/isolant joue un rôle principal dans le contrôle du courant de conduction dans le canal ^[31]. Les caractéristiques courant-tension I-V du SSD sont d'abord simulées avec de différentes valeurs de densité de charge et sont comparées à celles obtenues expérimentalement pour identifier une valeur raisonnable pour des études qui vont suivre.



La figure 4 montre les caractéristiques I-V du SSD avec une longueur $L=1 \mu\text{m}$ et une largeur $W = 150 \text{ nm}$ du canal pour différentes densités de charge d'interface $\sigma = 0, 4 \times 10^{11}, 6 \times 10^{11}$ et $8 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.

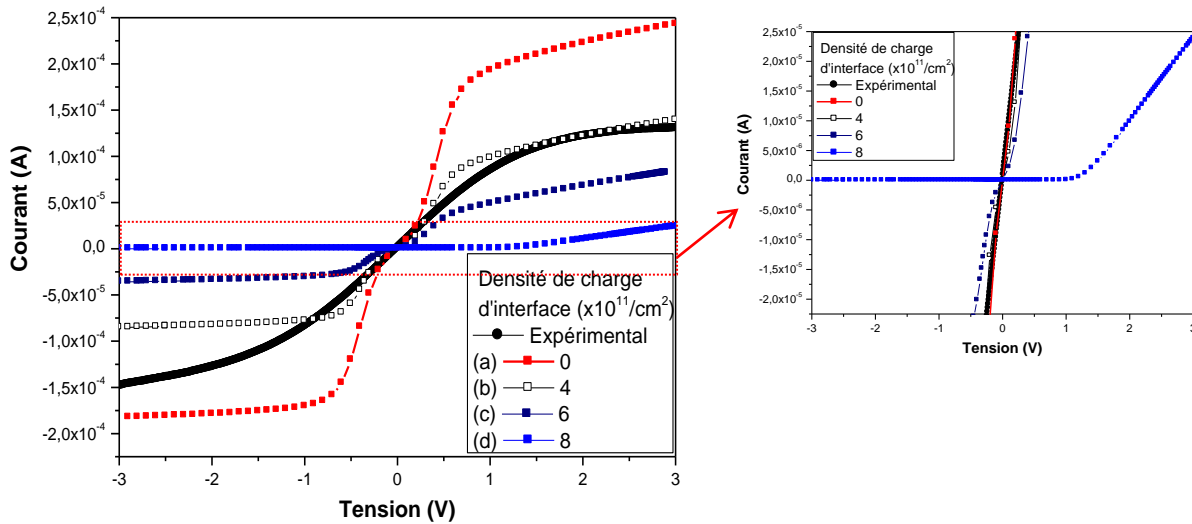


Figure 4: Caractéristiques I-V d'un SSD avec $L = 1 \mu\text{m}$, $W = 150 \text{ nm}$ pour différentes densités de charges d'interface.

D'après nos résultats de simulation représentés au niveau de la figure 4, les caractéristiques courant-tension pour une valeur de $\sigma = 4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ sont plus proches des résultats expérimentaux pour une polarisation positive. Lorsque la densité de charge d'interface augmente, le courant diminue et le canal est rétréci jusqu'au pincement de ce dernier pour une valeur de $\sigma = 8 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. Ce qui fait, l'introduction de charges supplémentaires aux interfaces $\sigma = 8 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ provoque une répulsion électron-électron dans le canal, épuise le canal des électrons et nécessite une tension de seuil $V_{th} = 1.20 \text{ V}$ pour rendre le dispositif SSD passant comme le montre la courbe en bleue de la figure 4 (d).

Expérimentalement, la densité de charge d'interface présente aux limites semiconducteur/Isolant peut varier considérablement en fonction des techniques de fabrication telles que les méthodes de gravure.

Cette section montre l'avantage de pouvoir étudier les dispositifs à l'aide de la modélisation physique car les processus se produisant à l'intérieur du dispositif ne peuvent pas être identifiés expérimentalement.

Dans la figure 5, est représentée la densité d'électrons, à la polarisation nulle, pour différentes densité de charges interface σ réparties à travers tout le canal.



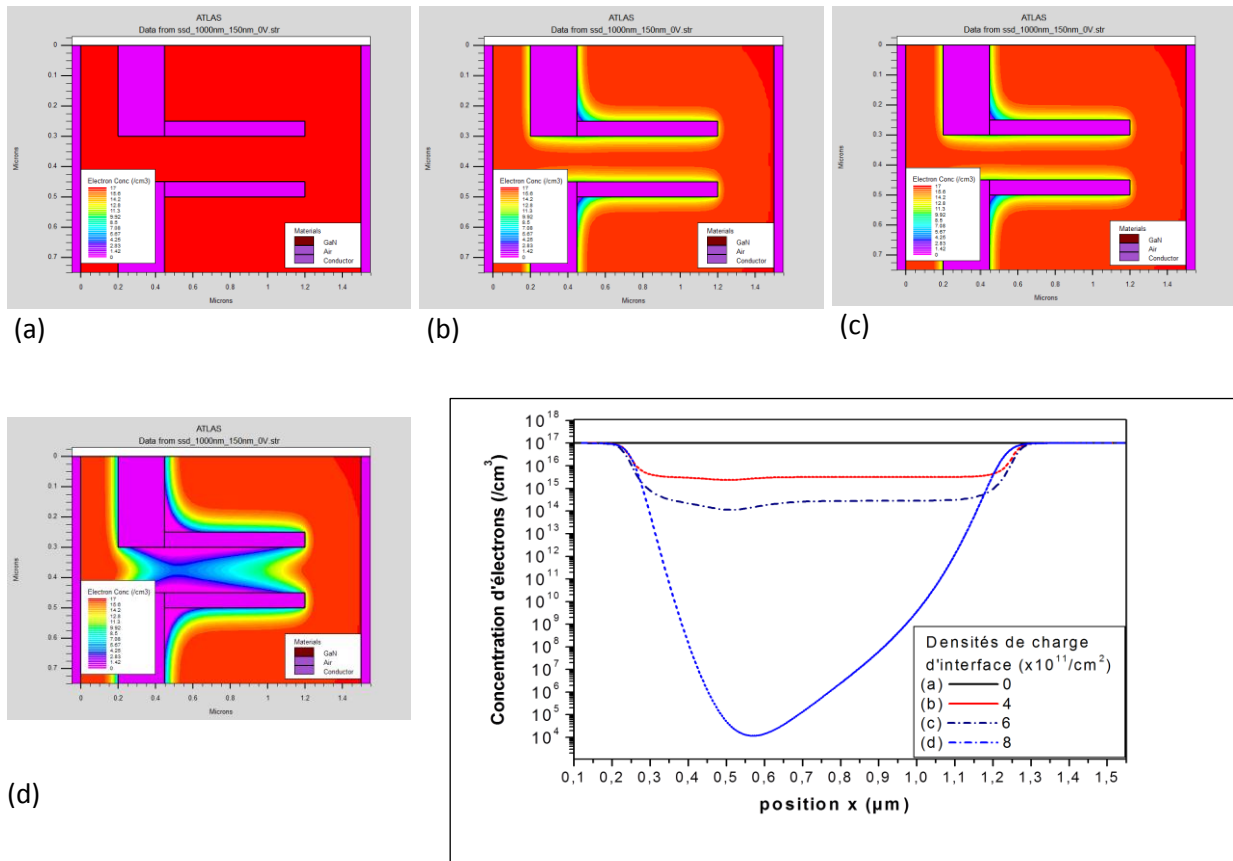


Figure 5 : Concentration d'électrons dans le canal (cm^{-3}) à $V=0$ V pour différentes densités de charge d'interface σ (cm^{-2}).

D'après ces résultats de simulation, la figure 5(a) montre que l'absence de la densité de charge d'interface laisse le canal ouvert pour le transport d'électrons à la fois pour les polarisations positives et négatives, ainsi la conduction (I-V) est élevée (voir la figure 4(a)). Sur la figure 5(b) et 5(c), la densité de charge d'interface introduite repousse les électrons loin du canal, la largeur du canal se rétrécit sans pincement du canal, cela permet au canal de rester passant dans la polarisation directe et la polarisation inverse. Mais cela provoque une baisse de la densité des électrons conducteurs, ainsi la conduction (I-V) diminue en polarisation positive (voir la figure 4(a), 4(b) et 4(c)). Cependant, pour une plus grande densité de charge d'interface (Figure 5(c)), la répulsion est si grande que le canal devient considérablement dépourvu d'électrons. Un champ électrique très élevé serait nécessaire pour laisser se propager les électrons à travers le canal, d'où la présence d'une tension de seuil comme le montre la figure 4(d).

Les figures 6(a) et 6(b) montrent les caractéristiques I-V des résultats de simulation d'ATLAS à 2D et des résultats expérimentaux fournis pour des SSDs avec une largeur de canal de 80 nm et 150 nm.



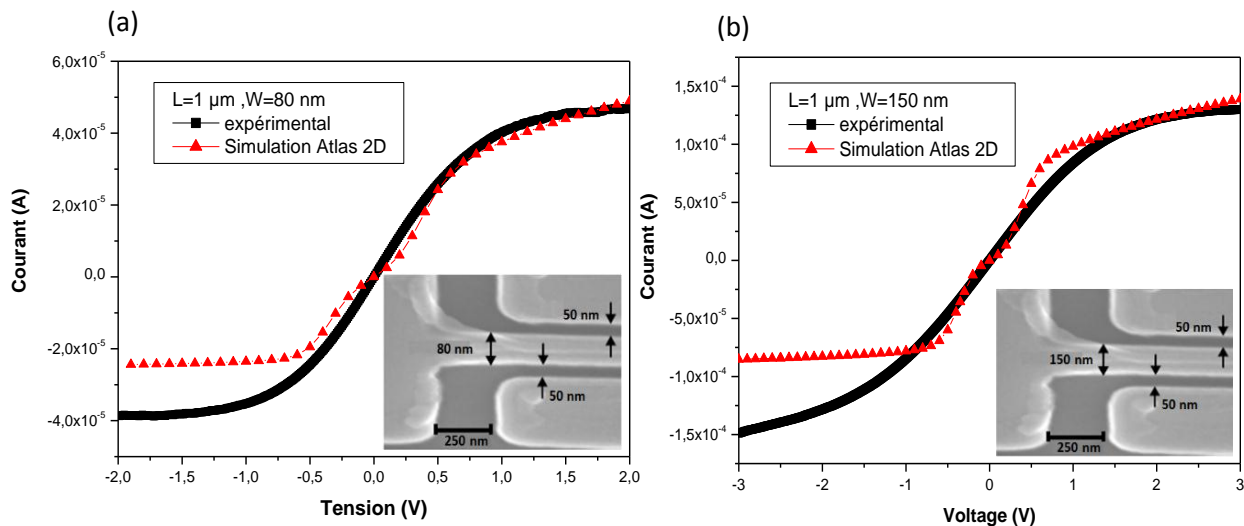


Figure 6: Comparaison des caractéristiques I-V simulées avec ATLAS à 2D et expérimentales pour des SSDs avec une largeur de canal de 80 nm (a) et 150 nm (b) et une longueur de 1 μm .

La figure 6(a) illustre la caractéristique I-V avec les dimensions du SSD $L = 1 \mu\text{m}$ et $W = 80 \text{ nm}$. La simulation de la même structure en utilisant ATLAS a produit une correspondance étroite en utilisant une valeur de $\sigma = 2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ en polarisation positive (canal passant). La figure 6(b) illustre la caractéristique I-V avec les dimensions du SSD $L = 1 \mu\text{m}$ et $W = 150 \text{ nm}$. La simulation de la même structure, en utilisant ATLAS, a produit une correspondance étroite en utilisant une valeur de $\sigma = 4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ en polarisation positive (canal passant). Ainsi, ces valeurs de densités de charges évaluées pour les deux structures étudiées ($W = 80 \text{ nm}$ et 150 nm) seront utilisées dans les simulations qui vont suivre.

L'accord des résultats de simulation et les résultats expérimentaux des caractéristiques I-V surtout en polarisation positive valide le modèle d'atlas à 2D configuré.

En polarisation négative, la simulation montre une saturation du courant due au pincement du canal à $V = 0.7 \text{ V}$ pour $W = 80 \text{ nm}$ et à $V = 0.88 \text{ V}$ pour $W = 150 \text{ nm}$. La courbe expérimentale montre une caractéristique I-V en forme de "S" (S-Shaped) [11] avec un comportement ohmique au voisinage de 0 V. La simulation en 2D montre une légère déformation du "S" au voisinage de 0 V. En effet, au voisinage de la tension nulle ($V=0$), la simulation indique la présence d'un très faible seuil de tension.

3.1.2 Influence de la polarisation sur la densité des électrons, du champ électrique et du potentiel électrostatique dans le canal

On a choisi d'étudier la structure avec la longueur et la largeur du canal de $1 \mu\text{m}$ et 150 nm , respectivement. En fixant la densité de charges d'interface σ à une valeur $4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, la variation de la densité électronique est observée pour une polarisation positive et négative afin de comprendre le comportement physique du dispositif. La figure 7 montre l'effet de l'application d'une polarisation positive et négative sur la densité électronique dans le canal.



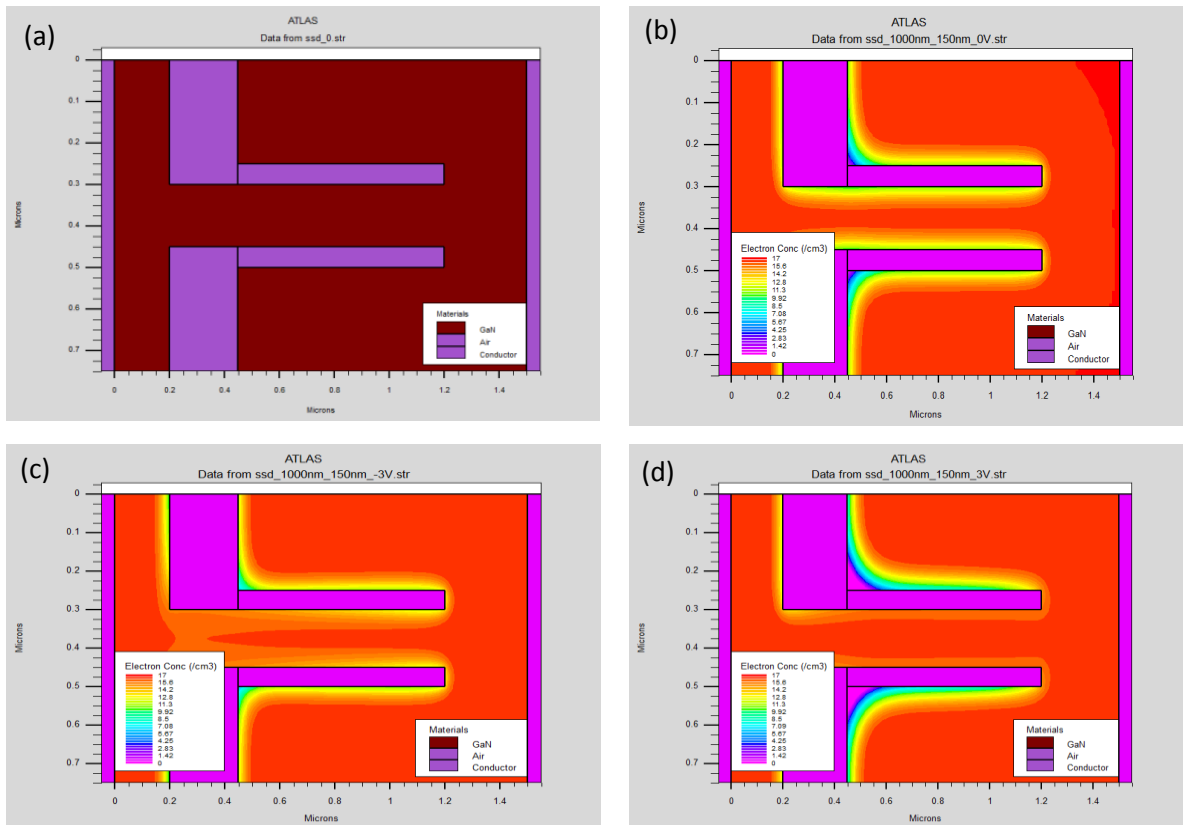


Figure 7: Tracés de contour de la densité électronique pour des tensions positives et négatives.

La figure 7 (a) montre la structure du SSD simulée, il est un dispositif unipolaire à deux terminaux. Deux tranchées isolantes en forme de L sont gravées à travers le semiconducteur GaN, formant une couche non symétrique avec un canal conducteur défini entre les bornes. Ainsi, comme le montre la figure 7(b), la largeur du canal effective du dispositif SSD est en réalité plus étroite que sa taille physique, en raison des régions d'appauvrissement situées aux limites gravées à l'équilibre. Ces régions d'appauvrissement sont causées par les charges aux états de surface des tranchées isolantes. En figure 7(c) une polarisation négative appliquée à l'anode induit des charges négatives autour des tranchées, épuisant ainsi le canal. En revanche, en figure 7(d) une polarisation positive neutralise l'épuisement latéral, élargissant la largeur effective du canal et permettant au courant de s'écouler facilement. Ce mécanisme de commutation automatique produit une caractéristique courant-tension (I-V) comme montre la figure 6.

Comme, mentionné dans le paragraphe précédent, la densité de charges d'interface peut avoir une influence sur la densité spatiale d'électrons dans le dispositif SSD.

La figure 8 (a) illustre l'évolution de cette densité d'électrons pour $V = 0, +3 \text{ V}$ et 3 V . On constate que l'épuisement des électrons est plus grand autour de l'emplacement des tranchées verticales W_V (Figure 2) ($0.2 < x(\mu\text{m}) < 0.45$) en particulier en polarisation inverse. Cet épuisement est moins accentué aux alentours des tranchées horizontales W_H (Figure 2).



En polarisation positive (+3V), on observe que sur toute la longueur du canal, la densité d'électrons est nettement supérieure comparée à celles obtenues à 0V et à -3V, mais elle reste inférieure à 10^{17} cm^{-3} (dopage du matériau GaN). Cette diminution est due à la présence de la densité de charges d'interface.

La figure 8 (b) illustre l'évolution du champ électrique pour $V = 0, +3 \text{ V}$ et -3 V . La variation du champ électrique est non linéaire ceci est dû à la présence des densités de charges d'interface. Le champ est nul en dehors du canal.

En polarisation positive (+3V), par rapport à l'équilibre ($V=0V$), le champ électrique est moins accentué autour de l'emplacement des tranchées verticales W_v et il est important aux alentours des tranchées horizontales W_H . Ceci s'explique par le fait que si une tension positive est appliquée côté drain, une force électrostatique, donc un champ électrique va apparaître entre le drain et la source et va injecter des électrons dans le canal. Les zones de déplétion reculent et la largeur effective du canal augmente. Ainsi le courant pourra circuler. La saturation du courant de drain est due à la saturation de la vitesse en régime de transport stationnaire (Figure 6 (a)).

En polarisation négative (-3V), par rapport à l'équilibre ($V=0V$), le champ électrique est très accentué autour de l'emplacement des tranchées verticales W_v et il est réduit aux alentours des tranchées horizontales W_H . Ceci s'explique par le fait que si une tension négative est appliquée (-3V), un potentiel négatif sur les bords du canal apparaîtra. La force électrostatique, donc le champ électrique, change de sens et repoussera les électrons en dehors de celui-ci. La largeur effective du canal sera réduite et dans ce cas le canal sera peut être complètement pincé, rendant impossible le passage du courant (Figure 6(a)).

La figure 8 (c) illustre l'évolution du potentiel électrostatique pour $V = 0, +3 \text{ V}$ et -3 V . La variation du potentiel électrostatique est non linéaire ceci est dû à la présence des densités de charges d'interface. On peut observer que le potentiel au niveau du drain, ou de l'anode, évolue avec la tension appliquée, tandis qu'au niveau de la source, ou de la cathode, le potentiel reste essentiellement nul.

À équilibre (0V), le canal est légèrement fermé en raison de l'épuisement induit par la densité de charges d'interface situées aux parois latérales, ce qui conduit à l'apparition d'une légère barrière de potentiel longitudinale (Figure 6(a)).

En polarisation négative (-3V) la barrière de potentiel bloquant le flux d'électrons est présente traduisant le pincement du canal (Figure 6(a)).

Tandis qu'en polarisation positive (+3V) la barrière a complètement disparu pour les porteurs allant de la cathode à l'anode, permettant ainsi l'augmentation du courant et sa saturation n'est due qu'à la saturation de la vitesse des électrons (Figure 6(a)).



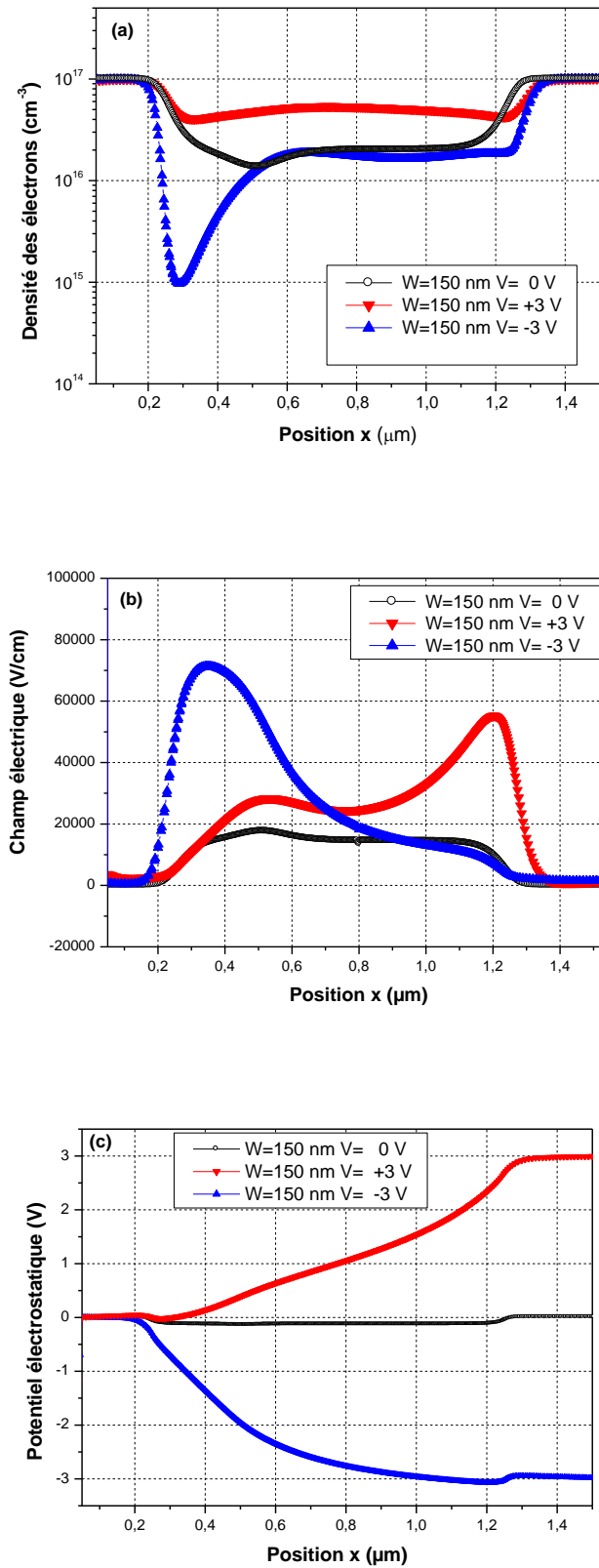


Figure 8: Evolution de la densité d'électrons, du champ électrique et du potentiel électrostatique à travers le canal à $V=0\text{ V}$, $+3\text{ V}$ et -3 V .



3.1.3 Recherche de l'émission Gunn

Le principe de l'effet Gunn, présenté au chapitre précédent, est attribué à un transfert d'intervallées d'électrons à un champ électrique critique. La différence de masses et mobilités effectives des électrons dans ces vallées peut entraîner un ralentissement significatif de leur vitesse, aboutissant à la formation de domaines. Pour déterminer la présence des oscillations Gunn, on a simulé les séquences temporelles (courant-temps) pour les deux structures pour les largeurs de canal $W = 80 \text{ nm}$ et $W = 150 \text{ nm}$ pour des tensions allant de 5 V à 30 V.

Les figures 9 (a) et (b) montrent les réponses en courant obtenues lorsque la tension appliquée est incrémentée par petites étapes.

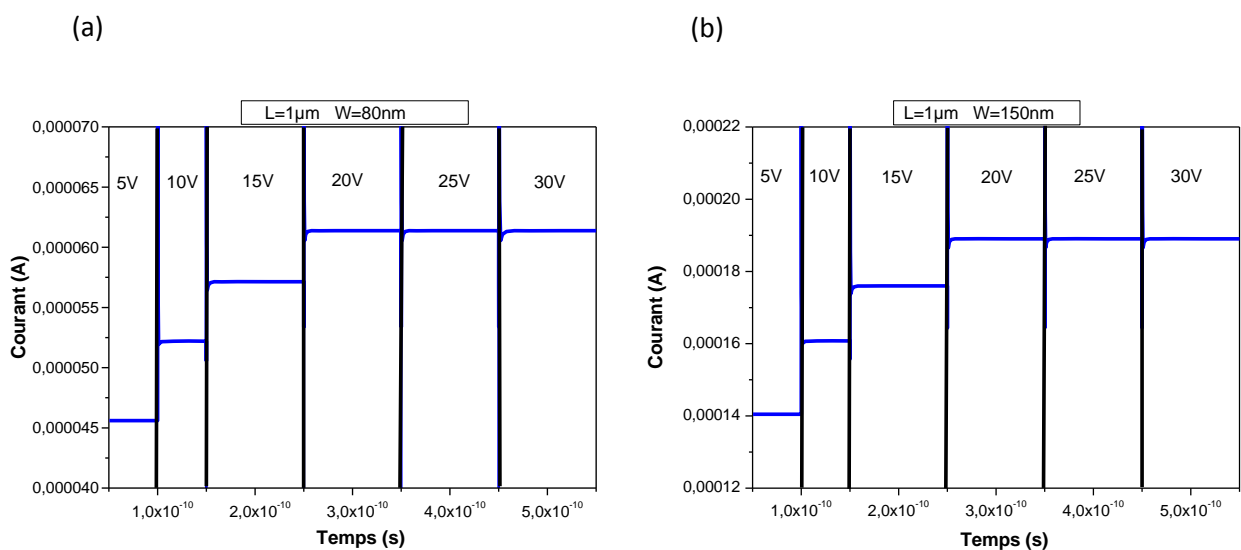


Figure 9: Séquences temporelles de courant simulées par ATLAS à 2D des SSDs à base de GaN avec (a) $W = 80 \text{ nm}$ et (b) $W = 150 \text{ nm}$ pour des tensions appliquées allant de 5 à 30 V.

Les résultats obtenus (Figures 9(a) et 9(b)) indiquent bien qu'il n'y a pas d'apparition d'oscillations de Gunn même avec l'application des tensions élevées allant jusqu'à 30 V. Nos résultats sont en bon accord avec les résultats obtenus par simulation Monte-Carlo ^[22] (Figure 10). La simulation Monte-Carlo montre que les oscillations Gunn commencent à apparaître pour une largeur de canal $W = 500 \text{ nm}$ et une tension appliquée de 50 V.



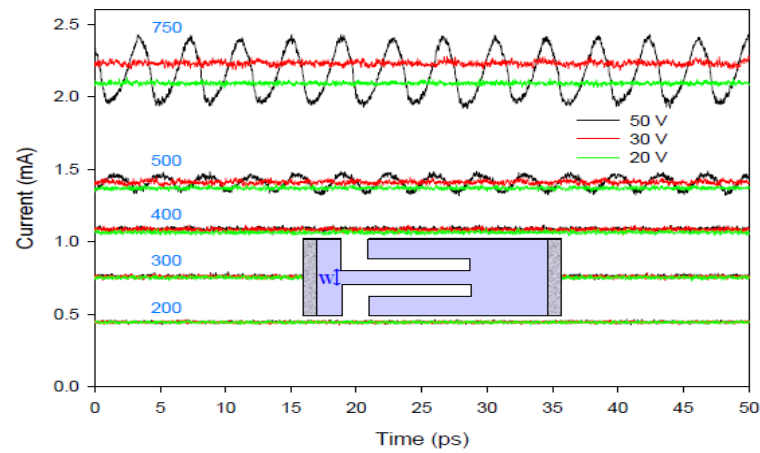


Figure 10: Séquences temporelles de courant (Résultats Monte-Carlo) pour des SSDs de différentes largeurs et de tensions appliquées de 20, 30 et 50 V. La longueur du canal est de 1 μm . Les nombres sur le graphique correspondent à W en nm ^[22].

3.2 SIMULATION ATLAS DES SSDs à 3D

Pour se rapprocher de la structure SSD réelle, on est passé à la simulation à 3D où la structure est simulée avec ces différentes couches et leurs épaisseurs, en tenant compte de la présence du gaz 2D.

Le dispositif SSD simulé comme le représente la figure 11 est basé sur l'hétérostructure $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}/\text{GaN}$. Le canal de conduction est conçu pour être de longueur $L = 1 \mu\text{m}$ et de largeur $W = 80/150 \text{ nm}$, une épaisseur de la couche $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}$ de 23 nm, une épaisseur de la couche GaN de 1.8 μm et une gravure profonde de 45 nm.

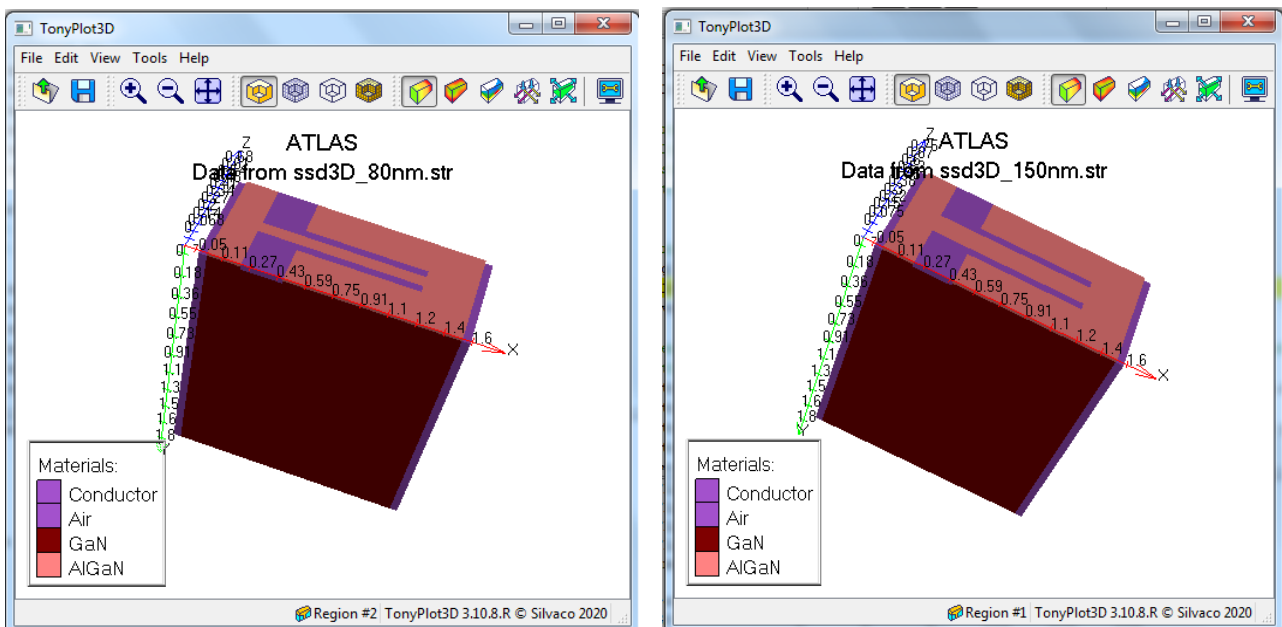


Figure 11: Structure du SSD simulée sous ATLAS à 3D avec (a) $L = 1 \mu\text{m}$ et $W = 80 \text{ nm}$ et (b) $L = 1 \mu\text{m}$ et $W = 150 \text{ nm}$.



3.2.1 Caractéristique courant-tension (I-V)

Les figures 12(a) et 12(b) montrent les caractéristiques I-V des résultats de simulation d’ATLAS à 3D et des résultats expérimentaux fournis pour des SSDs avec une largeur de canal de 80 nm et 150 nm.

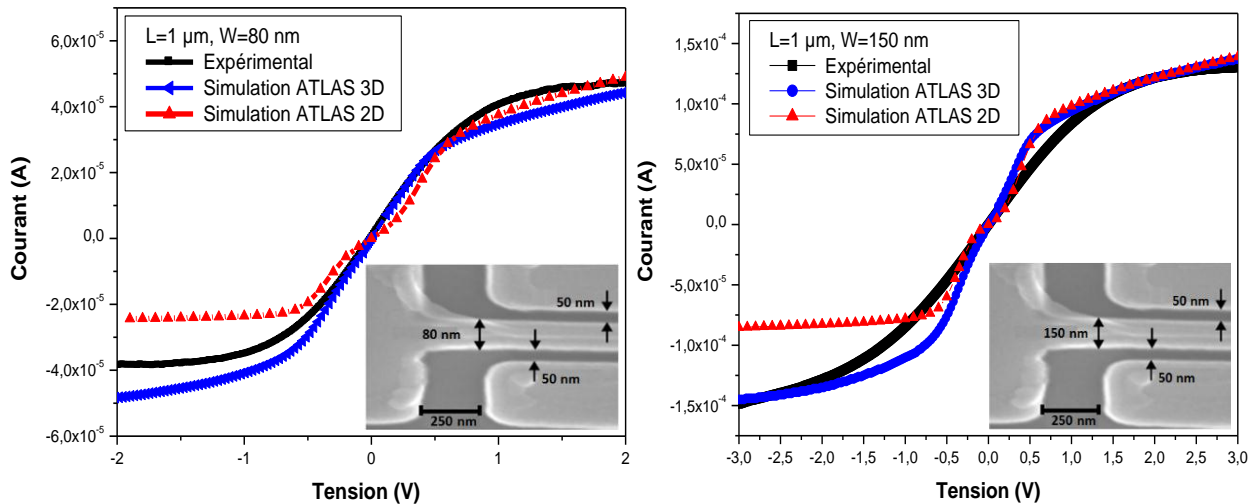


Figure 12: Comparaison des caractéristiques I-V simulées avec ATLAS à 2D, 3D et expérimentales pour des SSDs avec une largeur de canal de 80 nm (a) et 150 nm (b).

Les résultats obtenus montrent clairement que les résultats de simulations ATLAS 3D sont plus proches des résultats expérimentaux que les résultats de simulations à 2D.

La simulation 3D, montre bien une caractéristique I-V en forme de “S” (S-Shaped^[11]) qui se rapproche de la courbe I-V expérimentale. Le décalage qui apparaît au niveau de la saturation du courant, entre l’I-V expérimentale et simulée à 3D pour la largeur de canal $W = 80 \text{ nm}$, est peut être dû au choix de la densité de charges d’interface σ qui doit être légèrement inférieure à $2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ou de la largeur de la tranchée verticale réelle (W_v) qui est peut-être plus élevée^[9].

Pour la structure avec une largeur de canal $W = 150 \text{ nm}$, aucun décalage n’apparaît au niveau de la saturation du courant entre l’I-V expérimentale et simulée à 3D, ce qui valide le choix de la densité de charges d’interface appropriée. Par contre, au voisinage de 0 V, une différence de pente est nettement visible. Ceci peut se traduire par la présence d’une résistance, du SSD expérimental, supérieure à celle du SSD simulé au voisinage de 0 V. La résistance élevée, se traduit soit par la géométrie réelle de la structure, en particulier une largeur de canal plus petite ou une longueur plus élevée^{[11] [32]}, soit physiquement par l’effet du gaz 2D (sa profondeur, sa densité et sa mobilité).



3.2.2 Recherche de l'émission Gunn

La simulation à 3D nous a permis de se rapprocher de la structure réelle du dispositif SSD et nous a fourni des caractéristique I-V plus proches des I-V expérimentales que les simulations à 2D comme il a été mentionné précédemment. De ce fait, dans cette sous-section on va utiliser la simulation ATLAS 3D pour chercher la présence des oscillations de Gunn. Pour cela on a simulé les séquences temporelles pour les deux structures $W = 80 \text{ nm}$ et $W = 150 \text{ nm}$ pour des tensions allant de 5 V à 30 V.

Les figures 13 (a) et (b) montrent les réponses en courant obtenues lorsque la tension appliquée est incrémentée par petites étapes.

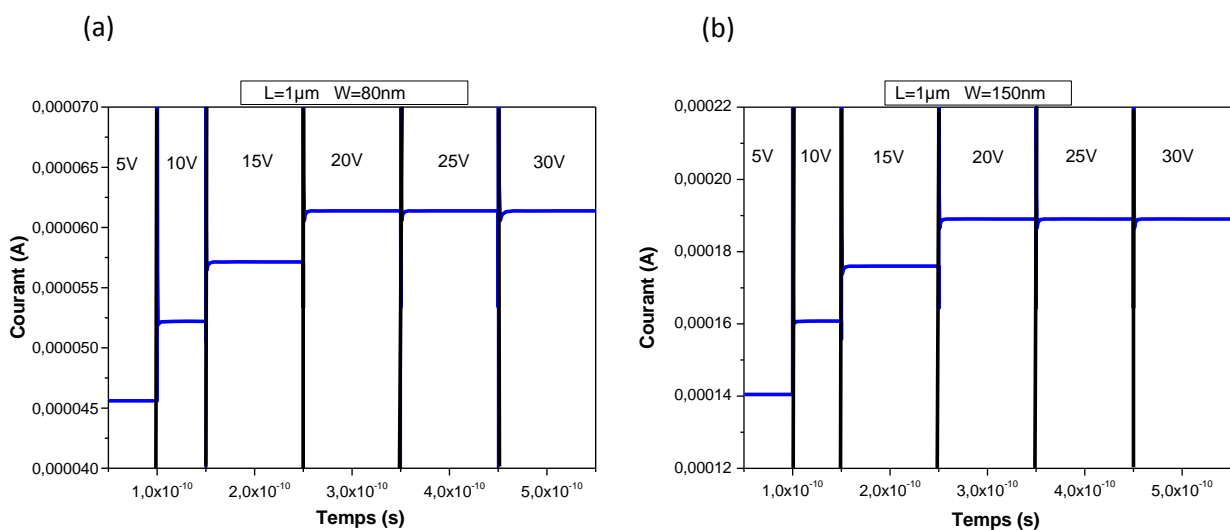


Figure 13: Séquences temporelles de courant simulées par ATLAS à 3D des SSDs à base de GaN avec (a) $W = 80 \text{ nm}$ et (b) $W = 150\text{nm}$ pour des tensions appliquées de 5 à 30 V.

D'après les résultats obtenus comme indiqués dans les figures 13(a) et 13(b), il n'y a pas d'apparition d'oscillations de Gunn même avec l'application des tensions élevées allant jusqu'à 30 V.

Nos résultats sont en bon accord avec les résultats Monte-Carlo publiés dans la littérature (Figure 14) [22]. Cette figure indique que les oscillations Gunn commencent à apparaître pour une largeur de canal $W = 500 \text{ nm}$ et une tension appliquée de 50 V.



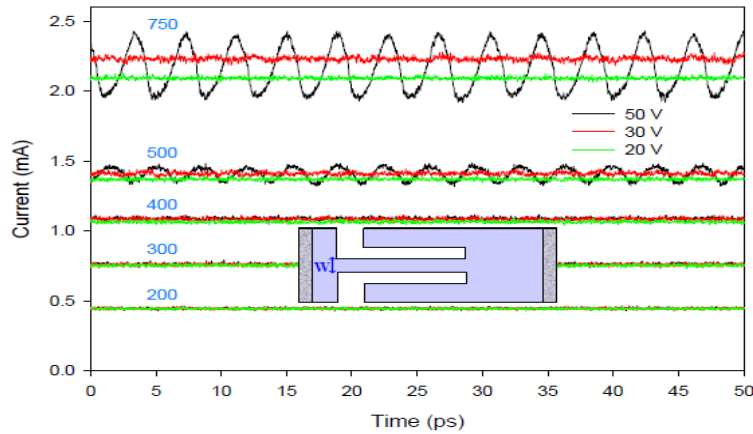


Figure 14: Séquences temporelles de courant (Résultats Monte-Carlo) pour des SSDs de différentes largeurs et de tensions appliquées de 20, 30 et 50 V. La longueur du canal est de 1 μm . Les nombres sur le graphique correspondent à W en nm ^[22].

On conclut, que pour les résultats des séquences temporelles de la simulation à 3D, sont similaires à ceux de la simulation à 2D, c'est-à-dire qu'il n'y pas d'apparition d'oscillations de Gunn.

3.2.3 Comparaison des résultats de la simulation 3D avec des résultats Monte Carlo

Pour valider nos simulations avec le modèle ATLAS à 3D configuré, on a simulé une structure 3D avec une largeur et une longueur du canal de 500 nm et on a comparé nos résultats avec des résultats de simulation Monte-Carlo et expérimentaux publiés dans la littérature ^[23]. On a pris en considération les mêmes paramètres technologiques. La figure 15 présente la structure de SSD simulée sous ATLAS à 3D avec une longueur et une largeur de 500 nm.



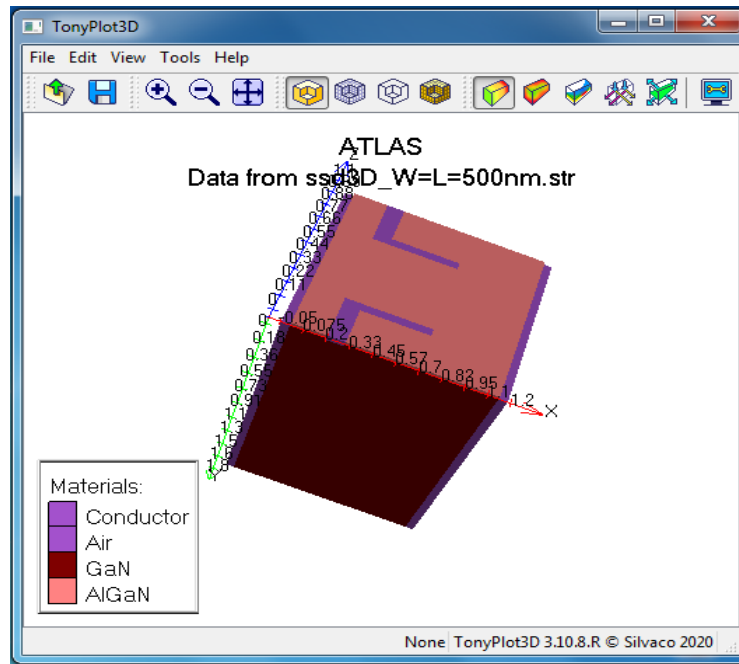


Figure 15: Structure du SSD simulé sous ATLAS à 3D avec $L = W = 500$ nm.

3.2.3.1 Caractéristiques courant-tension (I-V)

La caractéristique I-V d'un SSD à base de GaN réalisé technologiquement est illustrée à la figure 16(a) (courbe en noir)^[23]. Les dimensions du SSD sont $L = 500$ nm et $W = 500$ nm. La simulation de la même structure en utilisant ATLAS à 3D est illustrée à la figure 16(b) (courbe en bleu) et La simulation de la même structure en utilisant Monte-Carlo est illustrée à la figure 16(c) (courbe en rouge)^[23].

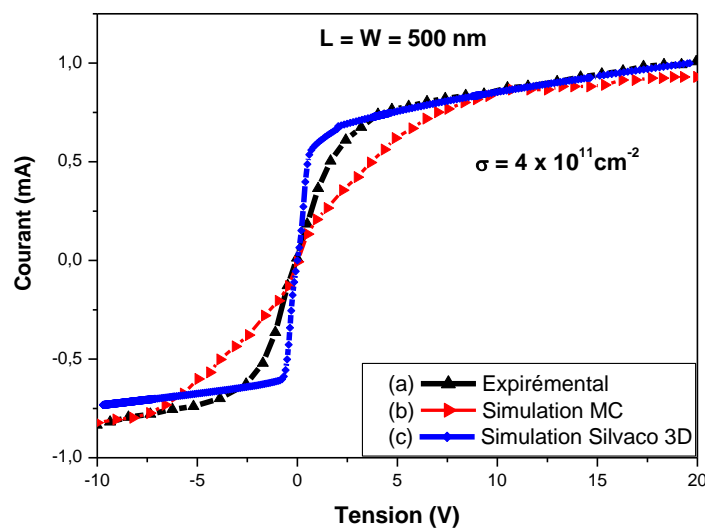


Figure 16: Comparaison des caractéristiques I-V simulées avec ATLAS à 3D, simulées avec Monte-Carlo et expérimentales pour un SSD avec une longueur et une largeur de canal de 500 nm.



D'après la figure 16, la forme "S" (S-Shaped) de la caractéristique I-V est bien reproduite dans ce cas aussi (large canal). Aucun décalage n'apparaît au niveau de la saturation du courant entre l'I-V expérimentale et simulée à 3D, ce qui valide le choix de la densité de charges d'interface appropriée. Par contre, au voisinage de 0 V, une différence de pente est nettement visible. Ceci peut se traduire par la présence d'une résistance, du SSD expérimental, supérieure à celle du SSD simulé au voisinage de 0 V. La résistance élevée, se traduit soit par la géométrie réelle de la structure, en particulier une largeur de canal plus petite ou une longueur plus élevée^{[11][32]}, soit physiquement par l'effet du gaz 2D (sa profondeur, sa densité et sa mobilité).

Il est clair que nos résultats avec simulation Atlas 3D sont plus proches des résultats expérimentaux que ceux obtenus par simulation Monte-Carlo. Ceci valide le modèle de simulation ATLAS à 3D configuré.

3.2.3.2 Recherche de l'émission Gunn

Les figures 17 et 18 montrent les résultats de simulation des séquences temporelles de courant dans un dispositif SSD à base de GaN avec une longueur et une largeur de canal de 500 nm pour des tensions appliquées de 5 à 30 V en utilisant la simulation ATLAS à 3D (Figure 17) et la simulation Monte-Carlo (Figure 18)^[23].

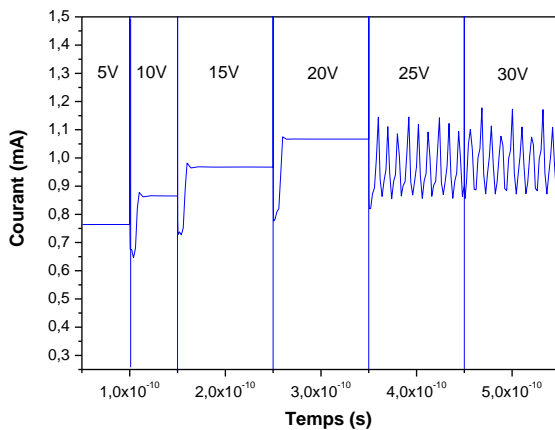


Figure 17: Séquences temporelles de courant simulées par ATLAS à 3D du SSD à base de GaN avec $W=L=500$ nm pour des tensions appliquées de 5 à 30 V.

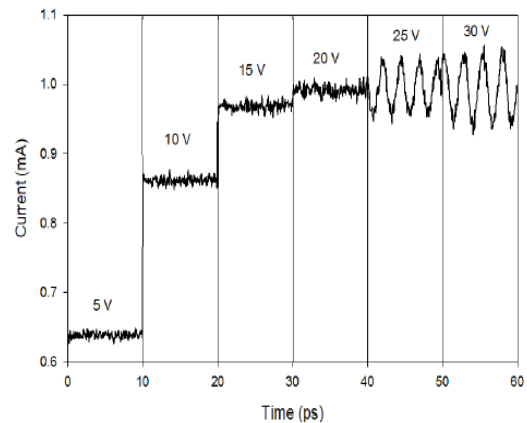


Figure 18: Séquences temporelles de courant (Résultats Monte-Carlo) du SSD à base de GaN pour $W=L=500$ nm pour des tensions appliquées de 5 à 30 V^[23].

Les résultats des séquences temporelles de la simulation ATLAS 3D montre une apparition des oscillations de Gunn à partir d'une tension appliquée de l'ordre de 25 V ce qui est en bon accord avec les résultats Monte-Carlo. La fréquence d'oscillation évaluée est de l'ordre de 0.5 THz, elle déterminée à partir de la FFT (FFT: Fast Fourier Transform).





4. CONCLUSION

Le nouveau concept de diode étudiée est peut-être non seulement la diode la plus simple à ce jour, mais aussi le plus rapide des nanodispositifs électroniques jamais rapportés. Le SSD n'est basé sur aucune jonction de dopage (P-N) ou de barrière tunnel.

Les résultats de simulation d'ATLAS à 2D des caractéristiques courant-tension (I-V), pour les deux structures étudiées avec des longueurs de canal de 1 μm et des largeurs de 150 nm et 80 nm, montrent un bon accord avec les résultats expérimentaux surtout en polarisation positive. Ainsi, l'étude de l'influence de la densité de charge de surface semiconducteur/Air nous a permis de comprendre le comportement des caractéristiques I-V obtenues.

La simulation ATLAS à 3D nous a permis de se rapprocher de la structure réelle, en tenant compte de la présence du gaz 2D résultant de l'hétérostructure AlGaIn/GaN. Les caractéristiques I-V simulées sont plus proches des caractéristiques I-V expérimentales que celles obtenues par simulation ATLAS à 2D ($W = 80 \text{ nm}$ et $W = 150 \text{ nm}$).

La comparaison du modèle ATLAS à 3D configuré avec le modèle Monte-Carlo et la caractéristique I-V expérimentale, de la structure SSD avec une largeur et une longueur de canal $W = L = 500 \text{ nm}$, montre que les caractéristiques I-V simulées avec ATLAS à 3D sont plus proches des caractéristiques I-V expérimentales que celles simulées avec Monte-Carlo.

Les résultats de notre simulation montrent que l'effet Gunn ne se produit que pour des tensions supérieures à 25 V pour une largeur de canal de 500 nm, ce qui rejoint les résultats de simulations de Monte-Carlo publiés dans la littérature. Du fait que pratiquement on ne peut pas appliquer ces tensions élevées, jusqu'à présent la fabrication d'un émetteur SSD à base de GaN est encore un défi.

L'excellent accord des résultats courant tension (I-V) expérimentaux avec la simulation Atlas valide pleinement la fiabilité physique de la technique de modélisation configurée.

La simulation ATLAS à 2D et 3D configurée nous a donné un aperçu sur l'origine de comportement observé et les facteurs limitant les performances du dispositif étudié.

Ainsi, les conceptions géométriques et technologiques des dispositifs SSDs peuvent être modifiées et étudiées avec moins de difficulté avec ATLAS-SILVACO qu'avec les simulations Monte-Carlo (point de vue temps de calcul).

Sur cette base, des simulations seront effectuées sur des structures SSDs modifiées géométriquement et technologiquement afin d'aboutir à l'apparition de l'effet Gunn se produisant à de faibles tensions.

REFERENCES

- [1] **Atlas User's Manual**, "Device Simulation Software": SILVACO International, Santa Clara, CA (2010).
- [2] **W. Liu**, "Handbook of III-V heterojunction bipolar transistors": Wiley New York (1998).
- [3] **J. Huang, et al.**, "A physical model for MOSFET output resistance", International Electron Devices Meeting, 569 (1992).
- [4] **D. Sinitsky, et al.**, "Velocity overshoot of electrons and holes in Si inversion layers", Solid-State Electronics, **41**, 1119 (1997).
- [5] **M. Lundstrom**, "Fundamentals of Carrier Transport", Volume X, Modular Series on Solid-State Devices vol. 250 (1990).
- [6] **P. Walker and H. Mizuta**, "Energy-Balance Modeling of Short Channel Single-GB Thin Film Transistors", Proceedings of the Workshop on Modeling and Simulation of Electron Devices, **44**, 19 (2005).
- [7] **D. Roulston, N. Arora, and S. Chamberlain**, "Modeling and measurement of minority-carrier lifetime versus doping in diffused layers of n+-p silicon diodes", IEEE Transactions on Electron Devices, **29**, 284 (1982).
- [8] **D. Caughey and R. Thomas**, "Carrier mobilities in silicon empirically related to doping and field", Proceedings of the IEEE, **55**, 2192 (1967).
- [9] **A.D.P. SANGARE**, thèse de doctorat, "Analyses des potentialités des diodes de types SSD à base de GaN pour les applications d'émission et détection en gamme de fréquence millimétriques et submillimétriques", Université des sciences et technologies de Lille, France (2013).
- [10] **N. Bensedik**, thèse de doctorat, "Etude et caractérisation de nano-composants à base de semiconducteur III-N pour des applications en puissance et hyperfréquence", Université Djilali Liabes Sidi bel abbes, Algeria (2013).
- [11] **C. DAHER**, thèse de doctorat, "Etude et réalisation de capteurs TéraHertz à base de nanocanaux asymétriques de gaz bidimensionnel", Université de Montpellier, France (2015).
- [12] **J.Torres, P. Nouvel, A.Penot, L. Varani, P.Sangaré, B.Grimbert, M.Faucher, G. Ducournau, C. Gaquière, I. Iniguez-de-la-Torre, J. Mateos and T.Gonzalez**, "Nonlinear nanochannels for room temperature terahertz heterodyne detection", Semicond. Sci. Technol. **28** 125024, (2013), doi:10.1088/0268-1242/28/12/125024.
- [13] **J. Lehmann**, Thèse de doctorat, "Caractérisation électrique d'hétérostructures AlGaIn/GaN pour des applications de puissance", Université Grenoble Alpes, France (2015).
- [14] **J. J. Barnes, R. J. Lomax, and G. I. Haddad**, "Finite-element simulation of GaAs MESFET's with lateral doping profiles and submicron gates", IEEE Transactions on Electron Devices, **23**, 1042 (1976).
- [15] **X. Tang**, thèse de doctorat, "Optimisation théorique et expérimental de composants hyperfréquence de la filière nitrure de Gallium à partir d'études physico-thermiques et électriques", Université des sciences et technologies de Lille, France (2013).
- [16] **W. Shockley**, "Electrons, holes, and traps", Proceedings of the IRE, **46**, 834 (1952).
- [17] **R. N. Hall**, "Electron-hole recombination in germanium", Physical Review, **87**, 387 (1952)
- [18] **P.Sangaré, G.Ducournau, B. Grimberty, V.Brandli, M.Faucher, C.Gaquière, A. Íñiguez-de-la-Torre, I.Íñiguez-de-la-Torre, J. F. Millithaler, J.Mateos, and T.González**, "Experimental demonstration of direct terahertz detection at room-temperature in AlGaIn/GaN asymmetric nanochannels", Journal of Applied Physics **113**, 034305 (2013); <https://doi.org/10.1063/1.4775406>
- [19] **Daher C, Torres J, Íñiguez-de-la-Torre I, Nouvel P, Varani L, Sangaré P, Ducournau G, Gaquière C, Mateos J and González T**, "Room Temperature Direct and Heterodyne Detection of 0.28–0.69-THz Waves Based on GaN 2-DEG Unipolar Nanochannels", IEEE Trans. Electron Devices **63**, 353–359 (2016). <https://doi.org/10.1109/TED.2015.2503987>.



- [20] **K. Y. Xu , A. M. Song , Z. M. Chen , Z. Y. Zheng , G. Wang and A. M. Song**, "Study of THz Oscillations in GaN-Based Planar Nanodevices", Published in: 2010 Symposium on Photonics and Optoelectronics, (2010), DOI: 10.1109/SOPO.2010.5504333.
- [21] **A. Íñiguez-de-la-Torre, J. Mateos, I. Íñiguez-de-la-Torre and T. González**, "Toward THz Gunn Oscillations in Planar GaN Nanodiodes", Proceedings of the 8th Spanish Conference on Electron Devices, CDE (2011).
- [22] **A. Íñiguez-de-la-Torre, I. Íñiguez-de-la-Torre, J. Mateos, T. González, P. Sangaré, M. Faucher, B. Grimbert, V. Brandli, G. Ducournau, and C. Gaquière**, "Searching for THz Gunn oscillations in GaN planar nanodiodes", Journal of Applied Physics 111, 113705 (2012); doi: 10.1063/1.4724350.
- [23] **J. F. Millithaler , I. Íñiguez-de-la-Torre , T. González , J. Mateos , P. Sangaré, G. Ducournau and C. Gaquiere**, "Monte Carlo analysis of thermal effects in self-switching diodes", published in :2013 Spanish Conference on Electron Devices, (2013), DOI: 10.1109/CDE.2013.6481338
- [24] **J.-F. Millithaler, I. Iniguez-de-la-Torre, A. Iniguez-de-la-Torre, T. Gonzalez, P. Sangare, G. Ducournau, C. Gaquiere and J. Mateos**, "Optimized V-shape design of GaN nanodiodes for the generation of Gunn oscillations", APPLIED PHYSICS LETTERS 104, 073509 (2014).
- [25] **J. Mateos, T. González, D. Pardo, V. Hoël and A. Cappy**, "MC simulator for the design optimization of low-noise HEMTs", IEEE Transaction on Electron Devices, 47 (10), 1950-1956, (2000).
- [26] **J. Mateos, BG. Vasallo, D. Pardo, T. González, JS. Galloo, S. Bollaert, Y. Roelens and A. Cappy**, "Microscopic modelling of nonlinear transport in ballistic nanodevices", IEEE Transaction on Electron Devices, 50 (9), 1897-1905, (2003).
- [27] **J. Mateos, BG. Vasallo, D. Pardo, T. González, JS. Galloo, Y. Roelens, S. Bosllaert and A. Cappy**, "Ballistic nanodevices for terahertz data processing: Monte Carlo simulations", Nanotechnology vol. 14, no. 117, (2003).
- [28] **H. Rodilla, T. González, D. Pardo, and J. Mateos**, "High-mobility heterostructures based on InAs and InSb: A Monte Carlo study", Journal Applied Physics vol. 105,113705, (2009).
- [29] **S. Perez, T. González, D. Pardo and J. Mateos**, " Terahertz Gunn-like oscillations in InGaAs/InAlAs planar diodes", Journal of Applied Physics, **103**, 094516 (2008).
- [30] **T. González, I. Íñiguez-de-la Torre, D. Pardo, J. Mateos and A.M. Song**, "Monte Carlo analysis of Gunn oscillations in narrow and wide band-gap asymmetric nanodiodes", Journal of Physics: Conference Serie, 193, 012018, (2009).
- [31] **A. Song, M. Missous, P. Omling, A. R. Peaker, L. Samuelson and W. Seifert**, "Unidirectional electron flow in a nanometer-scale semiconductor channel: A self-switching device," Applied Physics Letters, 83, 1881 (2003).
- [32] **Ignacio Íñiguez-de-la-Torre, Carlos Daher, Jean-François Millithaler, Jérémie Torres, Philippe Nouvel, Luca Varani, Paul Sangaré, Guillaume Ducournau, Christophe Gaquière, Tomás González and Javier Mateos**, "Operation of GaN Planar Nanodiodes as THz Detectors and Mixers", IEEE transactions on terahertz science and technology, vol. 4, no. 6, november (2014).



CONCLUSION GENERALE ET PERSPECTIVES



CONCLUSION GENERALE ET PERSPECTIVES

Les matériaux nitrurés d'éléments III: GaN, AlN, InN, BN et leurs alliages sont présentés comme des semiconducteurs intéressants pour le développement de dispositifs électroniques et optoélectroniques. La recherche sur ces matériaux a été déclenchée en observant particulièrement certaines de leurs caractéristiques: leur large bande interdite directe, leur haute conductivité thermique, le champ de claquage élevé, leur grande stabilité mécanique et leur résistance aux radiations.

Dans notre travail de recherche, on s'est intéressé aux matériaux AlGaN et GaN du côté des semiconducteurs de l'élément III-nitruré classiques et au matériau GaAsN du côté des semiconducteurs de l'élément III-nitruré dilués.

Au cours de la préparation de cette thèse, le travail de recherches a été divisé en deux axes.

- Le premier axe de recherche a concerné l'étude et simulation des dispositifs types SchottkySC et IBSC à base du matériau GaAsN pour le photovoltaïque. Du fait que le matériau GaAsN n'en est qu'à ses débuts pour les applications photovoltaïques, nous avons abordé un état de connaissance bien détaillé sur le GaAsN en montrant sa particularité par rapport aux autres matériaux III-V nitrurés classiques. Deux types de structures à base de GaAsN ont été simulés.

Les performances de la cellule solaire SchottkySC à base de GaAsN de concentration en azote $x=0.004$ et $x=0.012$ ont été étudiées en calculant les rendements avec des variations des paramètres technologiques de la structure tels que le travail de sortie du métal, la concentration du dopage et l'épaisseur de la couche active.

Les résultats obtenus montrent que pour avoir un rendement élevé il faut:

- Choisir un métal qui permet d'avoir une hauteur de barrière élevée.
- Diminuer la concentration du dopage de la couche active de GaAsN.
- Augmenter l'épaisseur de la couche active de GaAsN

Nous avons obtenu des rendements photovoltaïques optimaux de 27.70 % et 27.13 % pour $x = 0.004$ et $x = 0.012$ respectivement. Nous pouvons conclure que le dispositif SchottkySC basé sur GaAs_{0.996}N_{0.004} a donné un rendement de conversion plus élevé. En résumé, le développement de SchottkySC à base de GaAsN avec une hauteur de barrière élevée permet d'avoir une cellule solaire à haute efficacité tout en contrôlant le dopage et l'épaisseur de la couche active.



Pour mettre en valeur notre étude nous avons confronté nos résultats avec les rares résultats obtenus dans la littérature. Nos résultats de simulation basés sur des données expérimentales, donnent une indication sur le haut rendement prévu par des cellules solaires type Schottky Au/GaAsN. Ces résultats peuvent servir de base pour la réalisation des cellules solaires à concentration (CPV) de type Schottky.

Le travail s'est poursuivi par l'étude des cellules solaires à bande intermédiaire IBSC à base de GaAsN. L'objectif principal étant d'optimiser les paramètres technologiques de la cellule photovoltaïque proposée et, par la suite, ses paramètres de sortie.

Les résultats de simulations de cette approche montrent que la structure à bande intermédiaire fournit une amélioration considérable de courant de court-circuit et du rendement de conversion par rapport à la structure sans bande intermédiaire, et aucun changement de la tension de circuit-ouvert n'est observé. La conception de la cellule étudiée semble prometteuse, les paramètres clés du succès de cette approche sont:

- le choix de la position énergétique et la concentration de la bande intermédiaire implique le choix de la fraction d'azote (x , N%) du GaAsN. Cette dernière joue un rôle très important pour avoir les résultats souhaitables.
- La couche absorbante (GaAsN), qui contient la bande intermédiaire (IB), doit être suffisamment épaisse pour assurer la pleine absorption des photons.
- Il est nécessaire de minimiser l'épaisseur de la couche émetteur (P-GaAs) pour que les porteurs minoritaires photogénérés atteignent facilement la région d'appauvrissement et peuvent donc contribuer au photocourant total.
- Il est nécessaire d'augmenter l'épaisseur de la couche base (n-GaAs) et de minimiser son dopage.

Enfin, cette étude préliminaire sur la cellule solaire IBSC à base GaAsN a montré un rendement de conversion maximale de 21.92%.

- Le deuxième axe de recherche a concerné la simulation et la caractérisation du dispositif type SSD à base du matériau GaN pour l'électronique TéraHertz. Le nouveau concept de diode étudiée est peut-être non seulement la diode la plus simple à ce jour, mais aussi le plus rapide des nanodispositifs électroniques jamais rapportés. Le SSD n'est basé sur aucune jonction de dopage (PN) ou de barrière tunnel.

Les résultats de simulation d'ATLAS à 2D des caractéristiques courant-tension (I-V), pour les deux structures étudiées avec des longueurs de canal de 1 μm et des largeurs de 150 nm et 80 nm, ont montré un bon accord avec les résultats expérimentaux surtout en polarisation positive. Ainsi, l'étude de l'influence de la densité de charges de surface semiconducteur/Air sur les caractéristiques I-V nous a permis de comprendre l'allure "S-Shaped" de ses dernières.



La simulation ATLAS à 3D nous a permis de se rapprocher de la structure réelle, en tenant compte de la présence du gaz 2D résultant de l'hétérostructure AlGaIn/GaN. Les caractéristiques I-V simulées sont plus proches des caractéristiques I-V expérimentales que celles obtenues par simulation ATLAS à 2D ($W = 80$ nm et $W = 150$ nm). On retrouve bien des caractéristiques I-V en forme de "S" ou "S-Shaped".

La comparaison du modèle ATLAS à 3D configuré avec le modèle Monte-Carlo et la caractéristique I-V expérimentale, de la structure SSD avec une largeur et une longueur de canal $W = L = 500$ nm, montre que les caractéristiques I-V simulées avec ATLAS à 3D sont plus proches des caractéristiques I-V expérimentales que celles simulées avec Monte-Carlo.

Les résultats de notre simulation montrent que l'effet Gunn ne se produit que pour des tensions supérieures à 25 V pour une largeur de canal de 500 nm, ce qui rejoint les résultats de simulations de Monte-Carlo publiés dans la littérature. Du fait que pratiquement on ne peut pas appliquer ces tensions élevées, jusqu'à présent la fabrication d'un émetteur SSD à base de GaN est encore un défi.

L'excellent accord des résultats courant tension (I-V) expérimentaux avec la simulation Atlas valide pleinement la fiabilité physique de la technique de la modélisation configurée.

La simulation ATLAS à 2D et 3D configurée nous a donné un aperçu sur l'origine du comportement observé sur les caractéristiques I-V et les facteurs limitant les performances du dispositif étudié.

Ainsi, les conceptions géométriques et technologiques des dispositifs SSDs peuvent être modifiées et étudiées avec moins de difficulté avec ATLAS-SILVACO qu'avec les simulations Monte-Carlo (point de vue temps de calcul).

Sur cette base, des simulations seront effectuées sur des structures SSDs modifiées géométriquement et technologiquement afin d'aboutir à l'apparition de l'effet Gunn se produisant à de faibles tensions.

En perspectives :

- Pour le domaine photovoltaïque, pour les cellules solaire à bande intermédiaire (IBSC), afin d'atteindre le rendement élevé, prévu par la théorie, nous suggérons de travailler avec le GaN comme matériau hôte à la place de GaAs avec des fractions d'Arsenic comme niveaux défauts.
- Pour le domaine TeraHertz, quelques possibilités sont présentées afin d'améliorer les SSDs à base de GaN en tant qu'émetteur THz. Essentiellement, on peut jouer sur les paramètres technologiques, géométriques et physiques qui permettent d'augmenter la mobilité du gaz 2D dans le canal du SSD en particulier :

1. Maîtrise de la technologie de fabrication des SSD de sorte d'avoir une haute mobilité dans le canal (matériaux avec moins de défaut, les épaisseurs des différentes couches, etc...).



2. Changement de la géométrie du canal, de la forme L-SSD, passer à la forme V-SSD.
3. Prendre en considération tous les paramètres physiques qui ont un effet sur la mobilité des électrons dans le canal : la fraction molaire d'Aluminium (Al%), dopage, etc...
4. Ajouter une grille, du SSD passer au G-SSD.
5. Changement dans l'hétérostructure AlGaIn/GaN.
 - On peut ajouter une couche d'AlN à l'hétérostructure AlGaIn/GaN pour augmenter la mobilité dans le canal.
 - On peut changer complètement l'hétérostructure, en utilisant d'autres matériaux comme l'AlInN, l'AlInGaIn, etc...
6. Le choix primordial dans l'émission d'oscillations de Gunn au niveau du SSD réside dans le choix d'un matériau présentant une très grande mobilité.



LISTE DES TRAVAUX

1. Publications

- **A. Boumesjed**, H. Mazari, K. Ameer, N. Benseddik, S. Kadid, N. Benyahya & Z. Benamara, "Simulation of the GaAsN-based Schottky solar cell prototype" International Journal of Ambient Energy, pages 1-9, **2019**. <https://doi.org/10.1080/01430750.2019.1670255>
- **A. Boumesjed**, H. Mazari, K. Ameer, N. Benseddik, Z. Benamara and N. Benyahya, "Predicted theoretical efficiency for new intermediate band solar cells (IBSC) based on GaAs_{1-x}N_x"; Journal of New Technology and Materials (JNTM), Vol. 08, N°01, 102-109 (**2018**). <https://www.asjp.cerist.dz/en/article/54776>
- H. Mazari, K. Ameer, R. Khelif, S. Mansouri, N. Benseddik, Z. Benamara, **A. Boumesjed**, N. Benyahya, P. Marie, P. Ruterana, I. Monnet, J. M. Bluet and R. Becharef, "Capacitance–frequency (C–V–f) and conductance–frequency (G–V–f) characteristics of Au/n-GaN freestanding Schottky structure", Journal of New Technology and Materials (JNTM) J. New Technol. Mater. Vol. 08, N°01, 97-101 (**2018**). <https://www.asjp.cerist.dz/en/article/54775>
- K. Ameer, H. Mazari, N. Benseddik, Z. Benamara, N. Benyahya and **A. Boumesjed**, "Optimization of a GaAsN ternary alloy based solar cell for high efficiency", Journal of New Technology and Materials (JNTM), Vol. 08, N°01, 114-119 (**2018**). <https://www.asjp.cerist.dz/en/article/54778>

2. Communications

- A. Boumesjed**, H. Mazari, K. Ameer, N. Benseddik, Z. Benamara, N. Benyahya, «Aperçu et simulation 3D sous environnement ATLAS-SILVACO des SSDs à base de GaN», Troisième journées doctorales de Génie Electrique, 17-18 décembre, Sidi Bel Abbes, Algérie, **2019**.
- **A. Boumesjed**, H. Mazari, K. Ameer, N. Benseddik, Z. Benamara, N. Benyahya, « Étude des oscillations Gunn THz dans les nanodispositifs planaires (SSD) à base de GaN sous simulateur Silvaco-Atlas » La Conférence Internationale sur les Sciences et Génie des Matériaux et leur impact sur l'Environnement (ICMSE@2019), Sidi Bel Abbes, Algérie du 26-28 Novembre **2019**.
- Halima Mazari, Kheira Ameer, **Aicha Boumesjed**, Nadia Benseddik, Zineb Benamara, Nawal Benyahya, « Optimisation des paramètres de sortie d'une cellule solaire a base du matériau III-V nitruré GaAs_{0,6}N_{0,4} » La Conférence Internationale sur les Sciences et Génie des Matériaux et leur impact sur l'Environnement (ICMSE@2019), Sidi Bel Abbes, Algérie du 26-28 Novembre **2019**.
- K. Ameer, H. Mazari, N. Benseddik, Z. Benamara, **A. Boumesjed**, N. Benyahya, « Simulation et optimisation d'une cellule solaire tandem Si/Ge », La Conférence Internationale sur les Sciences et Génie des Matériaux et leur impact sur l'Environnement (ICMSE@2019), Sidi Bel Abbes, Algérie du 26-28 Novembre **2019**.

-**A. Boumesjed**, H. Mazari, K. Ameer, N. Benseddik, Z. Benamara, N. Benyahya « Effet des paramètres de la bande intermédiaire (IB) sur les performances de la cellule solaire IBSC à base de GaAsN. », International Conference on Renewable Energy and Energy Conversion, ICREEC'2019 USTO-MB Oran, Algérie 11 - 13 November **2019**.

-**A. Boumesjed**, H. Mazari, K. Ameer, N. Benseddik, A. Kadid, Z. Benamara, N. Benyahya, «Etude des performances d'une cellule solaire à base de l'hétérojonction $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{SnS}$ », Premières Journées Nationales sur les Énergies Renouvelables et le Développement Durable, 14-15 juin, Ain-Témouchent ,Algérie, **2019**.

-**A. Boumesjed**, H. Mazari, K. Ameer, N. Benseddik, Z. Benamara, N. Benyahya, «The electrical proprieties of Ni/InGaN/GaN Schottky diode using Silvaco software», 10^{èmes} journée MAGHREB – EUROPE, Les Matériaux et leurs Applications aux Dispositifs Capteurs MADICA16, 9-10 Novembre, Mahdia-Tunisie, **2016**.

-H. Mazari , **A. Boumesjed** , R. Khelifi, K. Ameer, S. Mansouri, N. Benseddik, Z. Benamara, N. Benyahya, P. Marie, P. Ruterana, I. Monnet, J M. Bluet, «Electrical characterization and simulation of I-V and C-V characteristics of schottky diode based on free-standing GaN substrate», 10^{èmes} journée MAGHREB – EUROPE, Les Matériaux et leurs Applications aux Dispositifs Capteurs MADICA16, 9-10 Novembre, Mahdia-Tunisie, **2016**.

-K. Ameer, H. Mazari, **A. Boumesjed**, N. Benyahya, N. Benseddik, Z. Benamara, «Optimization of ternary allows GaAsN solar cell for hight efficiency», 10^{èmes} journée MAGHREB – EUROPE, Les Matériaux et leurs Applications aux Dispositifs Capteurs MADICA16, 9-10 Novembre, Mahdia-Tunisie, **2016**.

- H. Mazari , **A. Boumesjed**, K. Ameer, N. Benseddik , Z. Benamara, N. Benyahya «Numerical simulation of the electrical characteristics of a Schottky diode based $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ » ; The 2nd international conference on power electronics and their application (ICPEA) Djelfa, Algeria from 29 to 30 March **2015**.

-N. Benyahya, H. Mazari , N. Benseddik , K. Ameer, Z. Benamara , M. Mostefaoui , **A. Boumesjed** , J. M. Bluet, «Caractérisation and simulation of the current-voltage characteristic in AlInN/GaN HEMTs » The 2nd international conference on power electronics and their application (ICPEA2015), Djelfa, Algeria from 29 to 30 March **2015**.

- H. Mazari , **A. Boumesjed**, K. Ameer, N. Benseddik , Z. Benamara, N. Benyahya, «Simulation diode Schottky à base d'InGaN sous environnement SILVACO» la 9^{ème} conférence sur le génie électrique ; école militaire polytechnique, Borj El Bahri , Alger (**2015**).

- N. Benyahya, H. Mazari , N. Benseddik , K. Ameer, Z. Benamara , M. Mostefaoui , **A. Boumesjed** , J. M. Bluet. «Caractérisation et simulation électrique des transistors HEMT à base d'InAlN » ; La 9^{ème} conférence sur le génie électrique ; école militaire polytechnique, Borj El Bahri, Alger (**2015**)

3. Participations

-Participation à l'Ecole de Sidi Bel Abbes de Nanomatériaux: Techniques de Caractérisation et de Simulation – Modélisation Numérique, 8-12 Octobre, Sidi Bel Abbes-Algérie, **2016**.

-Participation à la 23ème Ecole sur GNU/Linux & les logiciels libres, Sidi Bel Abbes-Algérie, **2015**.

Projet

Membre du projet de recherche **PRFU** : A10N01UN220120180002 Intitulé : « Simulation et caractérisation de dispositifs réalisés à base de nouveaux matériaux pour l'électronique, l'optoélectronique et le photovoltaïque » agréé pour une durée de 04 ans à compter du 01/01/**2018**.

ملخص

يتضمن هذا العمل دراسة ومحاكاة مركبات من نوع Schottky و IBSC من مادة GaAsN من أجل استخدامهم في مجال الطاقة الشمسية الفولطا ضوئية، كما قمنا بمحاكاة و توصيف جهاز من نوع SSD مصنوع من مادة GaN من أجل مجال الإلكترونيك و التيراهرتز.

بالنسبة لمجال الطاقة الشمسية الفولطا ضوئية، جذبت أشباه الموصلات النريدية المميهة، مثل مركب $GaAs_{1-x}N_x$ ، اهتمامًا كبيرًا نظرًا لخصائصها الفيزيائية الفريدة والمجموعة الواسعة من تطبيقاتها الممكنة في الإلكترونيات الضوئية. في هذا السياق، قمنا باستخدام محاكاة رقمية كاملة في ظل ظروف AM1.5G للإضاءة الشمسية مع برنامج SCAPS، لتحديد المعلمات الهندسية والفيزيائية المثلى التي توفر أفضل كفاءة لخلية شمسية من نوع Schottky تعتمد على n-GaAsN.

وفقًا لنتائجنا، فإن حسن اختيار المعدن يجعل من الممكن الحصول على حاجز الجهد عالٍ أثناء التحكم في تركيز وسمك الطبقة النشطة ل GaAsN ، و يتيح كذلك تطوير SchottkySC المصنوعة من مادة $GaAs_{1-x}N_x$ بجودة عالية. من المتوقع أن تكون الكفاءة أكبر من 27% مع تركيز النيتروجين $x = 0.004$ لهذا التصميم الجديد للخلية الشمسية Schottky n-GaAsN. يوفر مفهوم نوع الخلايا الشمسية ذات الحزمة الوسطية (IBSC) وسيلة للحصول على مردود تحويل الطاقة الضوئية أعلى من حد كفاءة Shockley-Queissar (SQ) لخلية شمسية أحادية الوصلات من خلال توفير تيار ضوئي أعلى مع الحفاظ على ارتفاع التوتر الناتج.

تعتبر IBSCs جذابة بسبب بساطتها في الصنع مقارنة بالمركبات متعددة الوصلات. من بين المواد التي تحتوي بشكل طبيعي على حزمة وسطية، هناك أيضًا ، ثلاثي النتريد المخفف "GaAsN". لقد درسنا تأثير معلمات الحزمة الوسطية (IB) للمادة الممتصة GaAsN ($E_i(eV)$, $N_i(cm^{-3})$) وسمك الطبقة الماصة على معلمات الإخراج للخلية الشمسية ذات الحزمة الوسطية IBSC. يعتبر تصميم الخلية التي تم دراستها واعدًا، اختيار الموضع الطاقوي، والتركيز للحزمة الوسطية يعني اختيار نسبة تركيز النيتروجين (x ، N) ل GaAsN . حصلنا على مردود تحويل أقصى قدره 21.90% في هذه الدراسة الأولية ل IBSC مصنوعة من مادة GaAsN.

بالنسبة لإلكترونيات التيراهرتز، تم إجراء محاكاة وتوصيف جهاز نوع SSD من مادة GaN. ال SSDs على أساس GaN/AIGaN مستوحاة من مركب HEMTs ولكن ليس لديها بوابة (Gate) ، فقط منبع و مصرف. هذه القنوات النانوية غير المتماثلة تشكلت عن طريق الحفر (etching) أو العزل (isolation) في DEG2 حيث يتم توفير النقل الإلكتروني بواسطة الإلكترونات. لديهم بنية مستوية بالكامل، مما يجعلهم متكاملين وكلفة تصنيعهم منخفضة.

تعتبر هذه الأجهزة واعدة لتصنيع مذبذبات Gunn THz في درجة حرارة الغرفة. باستخدام محاكي ATLAS-SILVACO في D2 و D3 ، تم إجراء تحليل لمنحنيات I-V في الحالة الاستاتيكية وتطور التيار في المجال الزمني لمركبات SSDs مع استخدام عرض قناة 80nm و 150nm. وقد تم ذلك عن طريق إيلاء اهتمام خاص لمعلماتها الهندسية وكثافة الشحن على السطح والتي تعتبر ضرورية لنقل الإلكترونات. يتطلب ظهور تذبذبات Gunn توتر استقطاب كبير. تكون نتائج المحاكاة ثلاثية الأبعاد لخصائص I-V أقرب إلى النتائج التجريبية مقارنة بنتائج المحاكاة التي حصلنا عليها باستخدام ATLAS في محاكاة ثنائية الأبعاد (2D) ومونت كارلو. يمكننا هذا من التحقق من صحة نموذج ATLAS ثلاثي الأبعاد (3D) الذي يتم تهيئته ويفتح الطريق أمام البحث المكثف لإيجاد حلول للحصول على تذبذبات Gunn من أجل توترات استقطابية منخفضة.

RESUME

Notre travail a porté sur l'étude et simulation des dispositifs types SchottkySC et IBSC à base du matériau GaAsN pour le photovoltaïque et simulation et caractérisation du dispositif type SSD à base du matériau GaN pour l'électronique Térahertz.

Pour le photovoltaïque, les semiconducteurs au nitrure dilué, tels que les alliages $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$, ont attiré une attention considérable en raison de leurs propriétés physiques uniques et de la large gamme de leurs applications possibles en optoélectronique. Dans ce contexte, une simulation numérique complète sous le spectre AM1.5G avec le logiciel SCAPS, est utilisée pour déterminer les paramètres géométriques et physiques optimaux qui donnent la meilleure efficacité d'une cellule solaire type Schottky basée sur n-GaAsN. Selon nos résultats, le choix du métal qui permet d'avoir une hauteur de barrière élevée tout en contrôlant le dopage et l'épaisseur de la couche active de GaAsN, permet le développement de SchottkySC à base de $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ de haute qualité. Une efficacité supérieure à 27% est attendue avec une concentration en azote de $x = 0.004$ pour cette nouvelle conception de la cellule solaire n-GaAsN Schottky. Le concept de type cellule solaire à bande intermédiaire (IBSC) fournit un moyen d'obtenir de rendements de conversion photovoltaïque supérieurs à la limite d'efficacité de Shockley-Queisser (SQ) pour une cellule solaire à jonction unique en fournissant un photocourant supérieur tout en maintenant une tension de sortie élevée. Les IBSC sont attrayantes en raison de leurs simplicités de réalisation comparées aux dispositifs multi-jonctions. Parmi les matériaux qui présentent naturellement une bande intermédiaire, là aussi, le ternaire de nitrure dilué « GaAsN ». Nous avons étudié l'effet des paramètres de la bande intermédiaire IB du matériau absorbeur GaAsN ($E_i(eV)$, $N_i(cm^{-3})$) et l'épaisseur de la couche absorbante sur les paramètres de sortie de la cellule solaire à bande intermédiaire IBSC. La conception de la cellule étudiée semble prometteuse, le choix de la position énergétique et la concentration de la bande intermédiaire implique le choix de la fraction d'azote (x , N%) du GaAsN. Nous avons obtenu un rendement de conversion maximale de 21.90% dans cette étude préliminaire pour IBSC à base GaAsN.

Pour l'électronique Térahertz, la simulation et la caractérisation de dispositif de type SSD à base du matériau GaN a été faite. Les SSDs à base d'hétérojonction GaN/AlGaN sont inspirés de la structure des HEMTs mais n'ont pas de grille, uniquement un drain et une source. Il s'agit de nanocanaux asymétriques formé par gravure ou par isolation dans un 2DEG où le transport électronique est assuré par les électrons. Ils ont une architecture complètement planaire, ce qui rends complètement intégrables et peu chers à fabriquer. Ce sont des dispositifs prometteurs pour la fabrication d'oscillations Gunn THz à température ambiante. En utilisant le simulateur ATLAS-SILVACO à 2D et 3D, une analyse des courbes I-V en régime statique et une évolution du courant dans le domaine temporel ont été réalisées avec des SSDs de largeurs de canal de 80 nm et 150 nm. Ceci a été fait en accordant une attention particulière à leurs paramètres géométriques et à la densité de charge en surface qui sont cruciales pour le transport d'électrons. L'apparition des oscillations Gunn nécessite une grande tension de polarisation. Les résultats de simulation à 3D des caractéristique I-V sont plus proches des résultats expérimentaux comparés aux résultats de simulation obtenus par ATLAS à 2D et la simulation Monté-Carlo. Ceci valide le modèle ATLAS à 3D configuré et ouvre la voie d'une recherche intense pour chercher des solutions à avoir des oscillations de Gunn pour des faibles tensions de polarisation.