

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA
RECHERCHE SCIENTIFIQUE



Université de DJILALI LIABES – Sidi Bel Abbès

Faculté de Génie Electrique

Département D'électronique



Thèse présenté en vue de l'obtention du diplôme de

Docteur en Science

Ecole Doctorale : Matériaux et Composants

Option: Matériaux Et Composants Optoélectroniques

Présenter par

M^r. Lourassi MADI

Thème

**Modélisation et simulation de l'effet de la polarisation
spontanée et piézoélectrique dans les cellules solaires à
base des semi-conducteurs nitrurés**

Soutenue publiquement le **11/05/2017** devant le jury

ABID Hamza	Prof. Université UDL de Sidi Bel-Abbès	Président
SAHNOUN Mohamed	Prof. Université de Mascara	Examineur
ARBOUCHE Omar	MC (A) Université de Saida	Examineur
SOUDINI Belabbès	Prof. Université UDL de Sidi Bel-Abbès	Directeur de Thèse
BENSAAD Zouaoui	Prof. Université UDL de Sidi Bel-Abbès	Membre invité

Année universitaire: 2016-2017

Remerciement

*A l'issue de cette fin de travail j'adresse mon remerciements
premièrement à dieu tout-puissant pour la volonté, la santé et la patience
qu'il a nous donnés durant toutes ces longues années d'études.*

*Je remercie mes parents, ma belle femme et mes deux anges Anas
abed errazak et abed elouadoud, mes frères et mes sœurs qui mon aidé
pour terminer mes études de doctorat et aussi pour leur soutien et leur
encouragement.*

*Ce présent travail a été effectué au département d'électronique sous
la direction du Professeur **Soudini Belabbass**, de ce fait je lui adresse tous
mes sincères remerciements.*

*Je remercie sincèrement monsieur le Professeur Abid Hamza
responsable de l'école doctorale 'matériaux et composants' et directeur du
laboratoire de recherche 'AML'.*

*Mes vifs remerciements vont également à Messieurs les membres du jury
SAHNOUN Mohamed Professeur de l'université de Mascara et
ARBOUCHE Omar de l'université de Saida*

*J'exprime ma sincère gratitude à tous mes enseignants et
particulièrement à: Pr Benamara, Pr Bensaad, Pr Drizs, Pr Akkal, Pr
Sakkal. Pr Sehil et Pr Naoum.*

*Je tiens aussi à remercier Mr. Rachid Ghali, la famille de "Ben
Zina" et la famille de "Ben Ismain" surtout Amina, Asmaa et Wafa pour
leur assistance et leurss encouragements.*

*Enfin, je remercie toute personne ayant contribué de près ou de loin
pour la réalisation de cette thèse.*

Madi Lourassi

Dédicaces

Je dédie ce modeste travail à :

- Mes très chers parents*
- Mon petite famille (ma belle femme
et mes anges Anas et Abed Elouadoud)*
- Mes chers frères*
- Mes professeurs*
- Mes amis Samir, Saci, Ammar, Sakai
Elkhier et Allawa.*

Madi lourassi

<i>Remerciements</i>	<i>I</i>
<i>Dédicaces</i>	<i>II</i>
<i>Sommaire</i>	<i>IV</i>
<i>Annexe</i>	<i>VI</i>
<i>Liste des figures</i>	<i>VII</i>
<i>Liste des tableaux</i>	<i>X</i>
<i>Nomenclature</i>	<i>XI</i>
<i>Introduction générale</i>	<i>XIII</i>

Sommaire

Chapitre 1: Les principales caractéristiques des cellules solaires

1.1 Introduction	2
1.2 Pourquoi les cellules solaires.....	2
1.3 L'énergie solaire.....	2
1.4 L'énergie photovoltaïque	4
1.5 Principe de fonctionnement.....	4
1.6 L'interaction photon/semiconducteur.....	5
1.7 Absorption optique.....	7
1.8 Caractéristiques électriques d'une cellule photovoltaïque.....	8
1.8-1 Superposition.....	10
1.8-2 La tension de circuit ouvert V_{co}	11
1.8-3 La puissance maximale.....	12
1.8-4 Facteur de Forme	12
1.8-5 Rendement de la cellule solaire.....	13
1.8-6 L'efficacité quantique	13
1.9 Modélisation électrique de la cellule photovoltaïque.....	14
1.10 Intérêt de l'InGaN pour les cellules.....	15
Conclusion.....	17

Chapitre 2: Propriétés générales des matériaux nitrurés

2-1 Introduction.....	22
2-2 Les nitrures d'élément III.....	22
2-3 La structure cristallographique.....	23
2-4 Les différents substrats utilisés pour la croissance de N-III hexagonal.....	25
2-4-1 Le silicium (111).....	26
2-4-2 Saphir (Al_2O_3).....	27
2-4-3 Le carbure de silicium (SiC).....	27
2-5 Les alliages N-III.....	28
2-6 Propriétés de l'alliage ternaire $In_xGa_{1-x}N$	29

2-6-1 Energie de gap d' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$	29
2-6-2 Variation du gap avec la température.....	30
2-6-3 Paramètres du réseau de l'alliage ternaire $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$	31
2-6-4 Dopage du ternaire $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$	32
2-6-4-1 Le dopage de type N.....	32
2-6-4-2 Le dopage de type P.....	32
2-7 La masse effective.....	33
2-8 Les densités effectives des états.....	34
2-9 La mobilité.....	34
2-10 Coefficient d'absorption de l' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$	35
2-11 L'hétérojonction InGaN/GaN.....	37
2-12 L'influence de la polarisation sur la structure de bande gap.....	38
Conclusion.....	39

Chapitre 3: La polarisation spontanée et piézoélectrique

3-1 Introduction.....	44
3-2 Les directions.....	44
3-3 Les planes.....	46
3-4 La polarité.....	47
3-5 Structure à une face polaire.....	49
3-6 Structure à une face non polaire	49
3-7 Structure à une face semi polaire.....	50
3-8 Polarisation Spontanée.....	51
3-8-1 L'origine de la polarisation spontanée.....	51
3-8-2 L'effet de la polarisation spontanée.....	51
3-8-3 La non-linéarité de la polarisation Spontanée.....	52
3-9 Polarisation piézoélectrique.....	53
3-9-1 La non-linéarité de la polarisation piézoélectrique.....	54
Conclusion.....	55

Chapitre 4: simulation et discussion des résultats

4-1 Introduction.....	60
4-2 Pour quoi la simulation.....	60
4-3 Introduction à 1D-DDCC.....	62

4-4 Simulation et discussion des résultats.....	67
4-5 Discussion des résultats.....	71
4-5-1 Influence de la polarisation sur la structure de bande.....	71
4-5-2 Influence de la polarisation sur les porteurs.....	72
4-5-3 Influence de la polarisation sur la fonction d'onde.....	74
4-5-4 Influence de la polarisation sur les caractéristiques J-V.....	74
Conclusion.....	76
 Conclusion Générale.....	 81

Annexes

Annexe I: Démonstration des équations du chapitre1.....	84
Annexe II: Propriétés de silicium.....	92
Annexe III: Propriétés des matériaux binaires III-N.....	93

Liste des figures

Chapitre 1

Figure. I-1 : Description du nombre d'air masse.....	3
Figure I-2 : Représentation graphique des spectres AM0 et AM1.5.....	4
Figure I-3 : transition inter-bande des électrons dans un semi-conducteur (a) corresponde à un semiconducteur à gap direct, (b) un semi-conducteur à gap indirect.....	5
Figure I-4 : Illustration des différents mécanismes au niveau des bandes énergétiques.....	6
Figure I-5 : Illustration des différents mécanismes extérieurs.....	6
Figure I-6 : Caractéristiques $I=f(V)$ sous obscurité et sous éclairage d'une cellule photovoltaïque.....	11
Figure I-7: Caractéristiques J-V avec les paramètres importants.....	13
Figure I-8 : Modélisation électrique d'une cellule photovoltaïque.....	14

Chapitre 2

Figure II-1 : Longueurs d'onde pour différents matériaux III-V.....	23
Figure II-2 : Énergie de gap à $T = 300K$ en fonction de la constante de réseau pour les composés III N.....	23
Figure II-3 : Structures blende de zinc (a) et wurtzite (b) de semi-conducteurs III-N...	24
Figure II-4: Différentes directions cristallographiques pour le silicium (a) [001], (b) [011] et (c) [111].....	26
Figure II-5: Projection des plans de base des cations du saphir et du GaN dans l'orientation prise lors de l'épitaxie.	27
Figure II-6: Structure cristallographique de SiC (6H-SiC).....	28

Figure II-7: Variation du gap d' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, en fonction de la fraction x de mole In....	30
Figure II-8: Mobilité des électrons pour quelques alliages ternaires dans la phase hexagonale.....	35
Figure II-9: Courbe d'absorption, α , en fonction de l'énergie du photon $h\nu$	36
Figure II-10: Structure de bandes de l'hétérojonction InGaN/GaN	37
Figure II-11: structure de bandes du GaN ($k = 0$) dégénérée, A (trous lourds (hh)), B (trous légers (lh)), et C (split-off hole).....	38

Chapitre 3

Figure III-1: position d'un atome dans la maille primitive, atomes dans les positions $(0,0,0), (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}), (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ et $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	44
Figure III-2: conventions internationales des directions dans les cristaux.....	45
Figure III-3: Différentes orientations cristallographiques en symétrie hexagonale représentées par leurs indices [UVTW].....	46
Figure III-4: représentations des différents plans pour les matériaux III-N en phase hexagonale.....	46
Figure III-5: la création d'un dipôle dans les matériaux III-N.....	47
Figure III-6: représentation les différents type de polarité dans les matériaux III-N.....	47
Figure III-7: représentation de la polarité d'une face N (a) et celle d'une face Ga (b).....	48
Figure III-8: représentation des plans polaires pour les matériaux III-nitrures hexagonal.....	49
Figure III-9: représentation des plans non polaires pour les matériaux III-nitrures hexagonal.....	50
Figure III-10: représentation des plans semi-polaires pour les matériaux III-nitrures hexagonal.....	51
Figure III-11: Polarisation spontanée en fonction de la composition x , les lignes discrètes représente l'interpolation linéaire (loi de Vegard) et les lignes continues c'est l'évolution non-linéaire (paramètre de courbure), les nombres vus dans la figure sont les paramètres de courbure exprimée en l'unité de C/m^2	52

<i>Figure III-12: Polarisation piézoélectrique en fonction de x, le paramètre de courbure $b = 0.042$ pour l'hétérojonction InGaN/GaN.</i>	<i>54</i>
---	-----------

Chapitre 4

<i>Figure IV-1: icone pour lancer le 1D-DDCC.....</i>	<i>62</i>
<i>Figure IV-2: fenêtre fonctionnelle de 1D-DDCC.....</i>	<i>62</i>
<i>Figure IV-3: paramètres de base.....</i>	<i>63</i>
<i>Figure IV-4: introduire des paramètres de la structure choisie.....</i>	<i>63</i>
<i>Figure IV-5: polarisation, theta et phi.....</i>	<i>64</i>
<i>Figure IV-6: choisir le type de dopage et les impuretés.....</i>	<i>64</i>
<i>Figure IV-7 : enregistrer et exécuter le programme.....</i>	<i>65</i>
<i>Figure IV-8: les deux fenêtres apparaître après exécuter le programme.....</i>	<i>66</i>
<i>Figure IV-9: structure de la cellule solaire GaN/InGaN/GaN/Si.....</i>	<i>68</i>
<i>Figure IV- 10: diagramme de bande d'énergie avec polarisation (ligne discrète) et sans polarisation (ligne continue).....</i>	<i>71</i>
<i>Figure IV-11: Profil de la bande de conduction avec une polarisation (ligne discrète) et sans polarisation (ligne continue).....</i>	<i>72</i>
<i>Figure IV-12: profile de la bande de conduction (ligne discrète) et densité des électrons (ligne continue).....</i>	<i>73</i>
<i>Figure IV-13: Fonction d'onde de l'électron en termes de la profondeur avec polarisation (ligne continue) et sans polarisation (ligne discrète).....</i>	<i>74</i>
<i>Figure IV-14: Caractéristique (J-V) de la cellule sans polarisation (cercle) et avec polarisation (triangle).....</i>	<i>75</i>

Liste des tableaux

Chapitre 1

Tableau I-1: Paramètres physiques des cellules solaires.....	9
Tableau I-2: Tableau I-1: Valeurs théoriques des rendements et celle de Voc et Jsc pour des cellules solaires multijonctions, homojonctions et multi-puits quantiques (MQWs) à base d'InGaN sous une différent spectres.....	16

Chapitre 2

Tableau II-1 : Paramètres de maille des principaux nitrides d'éléments III dans la phase wurtzite.....	25
Tableau II-2 : Les substrats conventionnels pour les nitrides de groupe III.....	26
Tableau II-3: Coefficients de Varshni des III-nitrides en phase hexagonale.....	31
Tableau II-4: Paramètres de réseau des binaires III-N.....	32
Tableau II-5: Masses effectives d'AlN, GaN et InN dans la phase wurtzite. Les symboles // et \circ indiquent respectivement la direction parallèle et perpendiculaire à k_z	33

Chapitre 3

Tableau III-1: valeurs de la polarisation spontanée des binaire GaN et InN.....	51
---	----

Chapitre 4

Tableau IV-1: paramètres physiques utilisés dans ce travail pour InN et GaN.....	70
--	----

Nomenclature

α : Le coefficient de l'absorption	[cm ⁻¹]
E_C, E_V : Les discontinuités de bande de conduction et de bande valence	[eV]
E : champ électrique	[V/cm]
ϵ : permittivité électrique ; ϵ_0 = constante diélectrique	[F/m]
E_C, E_V : minimum de bande conduction et maximum de bande de valence	[eV]
E_f : le niveau de Fermi	[eV]
E_{fn}, E_{fp} : les quasi niveaux de Fermi	[eV]
E_g : Energie de bande gap	[eV]
FF: Facteur de Forme	[%]
Φ : densité de flux des photons	[#/cm ² s]
G : Taux de génération	[cm ⁻¹]
η : rendement solaire cellulaire sous illumination d'un soleil	[%]
J_0 : densité du courant de saturation de diode	[mA/cm ²]
J_{sc} : densité du courant du court-circuit	[mA/cm ²]
k : constante Boltzmann	[J/K]
m_e^*, m_t^* : masse effective d'électron et de trou	[kg]
μ_e, μ_h : mobilité des électrons et des trous	[cm ² /Vs]
n: densité des électrons	[cm ⁻³]
N_C, N_V : densité d'état effective dans la bande de conduction et de valence	[cm ⁻³]
n_i : densité intrinsèque des porteur de charge	[cm ⁻³]
N_A : densité de dopage	[cm ⁻³]

p : densité des trous libre	$[\text{cm}^{-3}]$
q : charge élémentaire	$[\text{C}]$
T : température	$[\text{K}]$
τ_e, τ_t : durée de vie d'électron et de trou	$[\text{s}]$
V_{oc} : tension en circuit ouvert	$[\text{V}]$
W_{ZCE} : l'épaisseur de la zone de charge d'espace	$[\text{cm}]$
P_{SP} : Polarisation spontanée	$[\text{C}/\text{m}^2]$
P_{pz} : Polarisation piézoélectrique	$[\text{C}/\text{m}^2]$

Introduction générale

Lors de la Conférence des changements climatiques des Nations Unies en 2015 qui s'est tenue à Paris, la plupart des chefs d'Etats ont convenu de réduire la production de CO₂ dans les années prochaines afin d'éviter les principales menaces des changements climatiques dus à la pollution et l'épuisement des combustibles fossiles. Il y a de nombreux pays ont élaboré des plans pour augmenter la production d'énergie renouvelable afin de couvrir ses besoins en énergie de 20 % de la consommation en 2020.

La production d'électricité utilisant des sources d'énergie renouvelables est devenue communes ces dernières années, L'énergie renouvelable est l'énergie dérivée de ressources naturelles. Différer évidemment de combustibles fossiles de pétrole, de charbon et de gaz naturel, ou de combustible nucléaire, qui est utilisé dans les réacteurs nucléaires.

L'énergie renouvelable en général ne produit pas des restes d'un dioxyde de carbone (CO₂) ou des gaz nocifs ou de travailler à augmenter le réchauffement climatique comme se produit lorsque la combustion des combustibles fossiles ou de déchets nucléaires nuisibles résultant de réacteurs nucléaires. L'énergie renouvelable peut être produite à partir du vent, de l'eau et de soleil, et peut être produite à partir du mouvement des vagues et des marées ou à partir de l'énergie géothermique. Actuellement, la production d'énergie renouvelable produite dans les centrales hydroélectriques par les grands barrages construit sur les rivières et cascades, et utilisent des méthodes qui reposent sur le vent.

L'objectif de cette thèse est d'étudier l'une de ces sources renouvelables, l'énergie photovoltaïque qui est basée sur les cellules solaires, qui sont la base de ce travail. Les cellules étudiées au sein de cette thèse sont basée sur les matériaux III-N. Ces matériaux ont fait l'objet de recherches intensives ces dernières années en raison de leurs caractéristiques qui les rendent extrêmement attrayante pour l'optoélectronique, de

haute puissance, et les applications à haute fréquence. En raison de leur gap direct allant de 0,65 eV (InN) jusqu'à 6,2 eV (AlN), en plus, ils possèdent une polarisation électrique spontanée et ont les plus grandes constantes piézoélectriques que d'autres semi-conducteurs.

Nous avons structuré notre thèse selon quatre chapitres comme suite:

Dans le premier chapitre, nous avons présenté quelques propriétés fondamentales des cellules solaires d'une manière générale, en particulier. Nous avons décrit le principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque, ses caractéristiques et les différentes équations qui contrôlent l'effet photovoltaïque.

Dans le deuxième chapitre nous avons discuté de la morphologie des matériaux semi-conducteurs III-N, en particulier les propriétés cristallographiques de ces derniers, les substrats usuels et on a discuté sur quelques propriétés mécaniques, électriques et optoélectroniques de l'alliage ternaire InGaN.

Le chapitre trois fait l'objet de ce travail, car il prend en compte l'effet de la polarisation. En premier lieu nous avons commencé par les notions fondamentales de la cristallographie concernant la phase hexagonale (les directions, les planes...), et en deuxième étape nous avons étudié la polarité des matériaux III-nitride et les différents plans fondamentaux qui déterminent la nature polaire de ces matériaux.

Dans le dernier chapitre, nous avons présenté le principe de la simulation numérique d'une manière générale, nous avons aussi parlé de l'outil 1D-DDCC d'une manière spéciale. Après nous avons passé à la discussion des résultats trouvés au sein de ce travail en donnant les arguments nécessaires pour expliquer les différents résultats obtenus durant la simulation.

1 *Les principales caractéristiques des cellules solaires*

Sommaire

1.1 Introduction	2
1.2 Pourquoi les cellules solaires.....	2
1.3 L'énergie solaire.....	2
1.4 L'énergie photovoltaïque	4
1.5 Principe de fonctionnement.....	4
1.6 L'interaction photon/semiconducteur.....	5
1.7 Absorption optique.....	7
1.8 Caractéristiques électriques d'une cellule photovoltaïque.....	8
1.8-1 Superposition.....	10
1.8-2 La tension de circuit ouvert V_{co}	11
1.8-3 La puissance maximale.....	12
1.8-4 Facteur de Forme	12
1.8-5 Rendement de la cellule solaire.....	13
1.8-6 L'efficacité quantique	13
1.9 Modélisation électrique de la cellule photovoltaïque.....	14
1.10 Intérêt de l'InGaN pour les cellules.....	15
Conclusion.....	17

I.1 Introduction

Ce premier chapitre présente les propriétés fondamentales des cellules solaires, en particulier. Nous aborderons le principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque, ses caractéristiques et les différentes équations qui contrôlent l'effet photovoltaïque. En plus nous abordons des notions préliminaires sur le rayonnement solaire.

I.2 Pourquoi les cellules solaires

Les cellules solaires, qui sont généralement basées sur les matériaux semi-conducteurs pour convertir directement la lumière du soleil en un signal électrique sans un bruit ou pollution. Les cellules solaires n'ont pas des pièces mobiles – la puissance est générée lorsque la lumière atteint la surface du semi-conducteur. Les cellules solaires sont traditionnellement utilisées pour les satellites, les pompes d'eau, les stations de communications, l'éclairage public et les calculatrices.

I.3 L'énergie solaire

Selon la couche de l'atmosphère, on peut diviser la radiation solaire en trois niveaux : hors de l'atmosphère, au-dessous de l'atmosphère et au niveau de la terre. En 1975, la NASA (the National Aeronautics and Space Administration) et L' ERDA (Energy Research and Development Administration) utilisant des calculs théoriques pour mesurer le spectre solaire terrestre [1]. Il a été trouvé que La température à la surface du soleil avoisine les 5800 K. Le spectre du rayonnement solaire s'avère donc similaire à celui d'un corps noir de 5800 K, la quantité de l'énergie solaire reçue par l'unité de temps et par l'unité de surface juste au-dessous de l'atmosphère est appelée la constante solaire et notée par AM (air-masse) [2]. Le terme air-masse (AM) est souvent utilisé pour décrire la proportion de la trajectoire de la lumière, la quantité de puissance absorbée par l'atmosphère en fonction de l'angle θ du soleil par rapport au zénith est donnée par l'équation (I.1) [3].

$$AM = \frac{1}{\cos(\theta)} \quad (\text{I.1})$$

Où $\theta = 0$ correspond à une incidence perpendiculaire du rayonnement et $AM=1$,

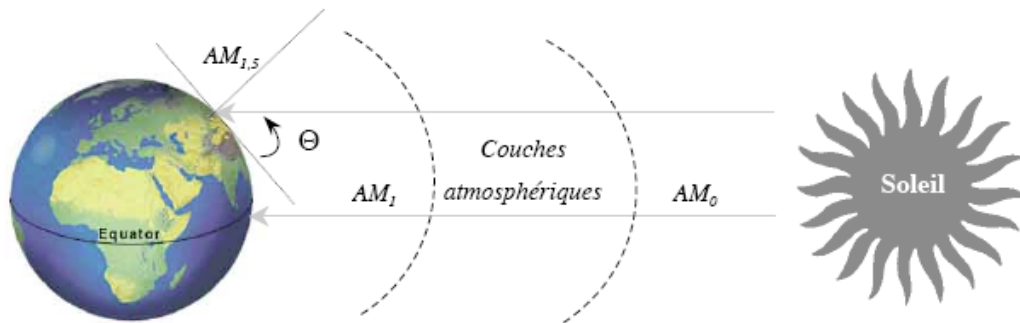


Figure. I-1 : Description du nombre d'air masse [3].

Les symboles AM_1 et AM_0 vu à l'image correspondent à l'irradiance hors atmosphère, et sont utilisées pour prédire le comportement des cellules pour des applications spatiales. Le spectre standard le plus utilisé est $AM1.5G$, G désignant global car il tient compte à la fois des radiations directes et diffuses [4], par contre à $AM1.5D$ qui ne tient compte que des directes. $AM1.5G$ donne une irradiance de 970 W/m^2 , mais a été arrondi à 1 kW/m^2 . L'intensité I_D reçue à la surface de la terre peut être calculée grâce à la formule empirique suivante [3] :

$$I_D = 1.353(0.7^{AM})^{0.678} \quad (\text{I.2})$$

Avec I_D en kW/m^2 , pour une surface perpendiculaire aux rayons incidents. Les spectres AM_0 et $AM1.5$ sont représentés sur la figure I-2 [4].

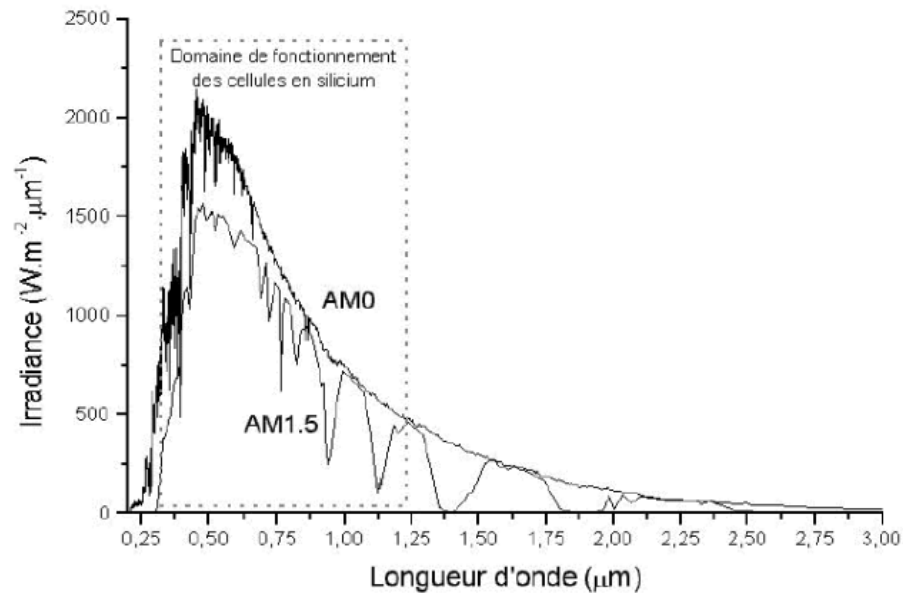


Figure I-2 : Représentation graphique des spectres AM0 et AM1.5 [4].

I.4 L'énergie photovoltaïque

C'est en 1839 que le physicien français Edmond Becquerel découvre que certains matériaux délivraient une petite quantité d'électricité quand ils étaient exposés à la lumière. Albert Einstein expliqua le phénomène photoélectrique en 1912 mais ce n'est qu'en 1954 que la première cellule photovoltaïque (PV) a été mise au point par des chercheurs du laboratoire Bell aux USA. Cette première cellule PV était en silicium et avait un rendement de 4,5% [6].

I.5 Principe de fonctionnement

L'effet photovoltaïque est la transformation directe d'une énergie électromagnétique (rayonnement) en énergie électrique utilisable de type continu. A chaque photon, on associe une énergie $E_{ph} = h\nu$ où ν est la fréquence associée à la longueur d'onde du photon ($\lambda = c / \nu$, avec c la célérité de la lumière dans le vide). Pour passer de l'énergie du photon E_{ph} à la longueur d'onde, on utilise la relation suivante où λ est en μm [1].

$$E_{ph}(eV) = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = \frac{1,24}{\lambda(\mu m)} \quad (I.3)$$

I.6 L'interaction photon/semiconducteur

L'espace entre les bandes de valence et de conduction (gap), est une caractéristique fondamentale des semiconducteurs. La figure I-3 montre les deux principaux types du gap. Quand le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence coïncident dans l'espace des k , on parle d'un gap direct (figure I.3 (a)). Les transitions inter bandes s'exécutent verticalement. Ceci illustre le fonctionnement des semiconducteurs binaires III-V, tels que le GaN, matériau très utilisé en optoélectronique. Les électrons du sommet de la bande de valence peuvent être excités directement vers le minimum relatif central de la bande de conduction grâce à un photon de plus grande énergie. Pour que la transition s'effectue dans le gap indirect, il faut qu'un phonon soit au préalable absorbé (ou émis) par l'électron, afin que le vecteur d'onde de ce dernier corresponde au maximum de la bande de valence, pour absorber un photon (figure I-3 (b)). Comme le cas du silicium, le gap est indirect, les transitions électroniques entre les extrema des bandes sont obliques. Notons que la valeur du gap du silicium est de 1,12 eV à 300 K (ce qui concorde à une longueur d'onde de 1107 nm), mais celle du premier gap direct vaut 3,42 eV (soit 365,5 nm) [4].

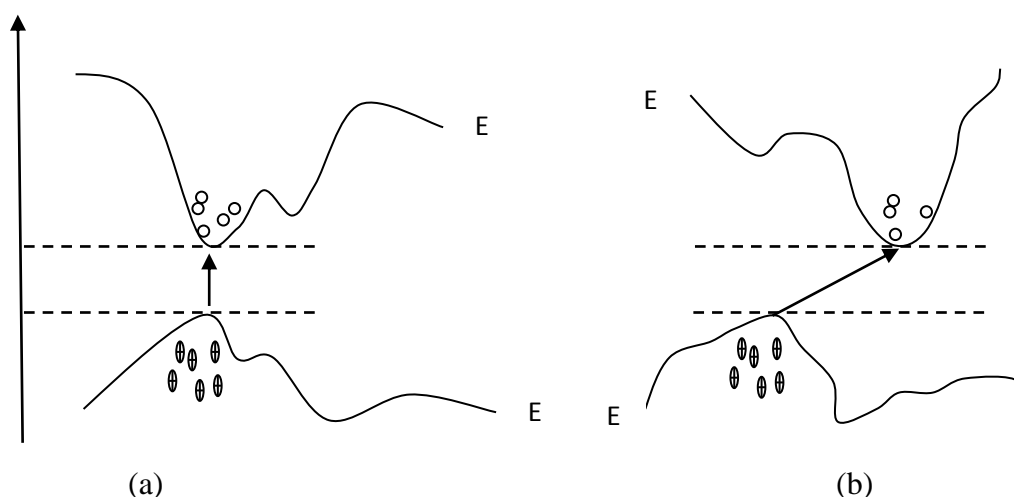


Figure I-3 : Transition inter-bande des électrons dans un semi-conducteur (a) correspond à un semi-conducteur à gap direct, (b) un semi-conducteur à gap indirect [3].

L'interaction des photons avec un semiconducteur peut être interprétée par une caractéristique essentielle du matériau dans le domaine photovoltaïque, qui est le coefficient d'absorption. Ce dernier traduit le nombre de photons absorbés par unité d'épaisseur du matériau en fonction de leur longueur d'onde [7]. Une cellule photovoltaïque est un dispositif qui permet de transformer l'énergie solaire en énergie électrique. Cette transformation est basée sur les trois mécanismes suivants :

- absorption des photons (dont l'énergie est supérieure au gap) par le matériau constituant le dispositif ;
- conversion de l'énergie du photon en énergie électrique, ce qui correspond à la création de paires électron/trou dans le matériau semiconducteur ;
- collecte des particules générées dans le dispositif.

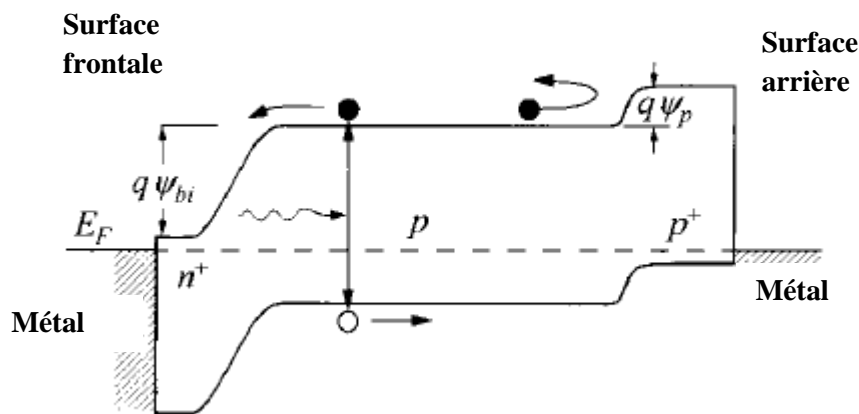


Figure I-4 : Illustration des différents mécanismes au niveau des bandes énergétiques [10].

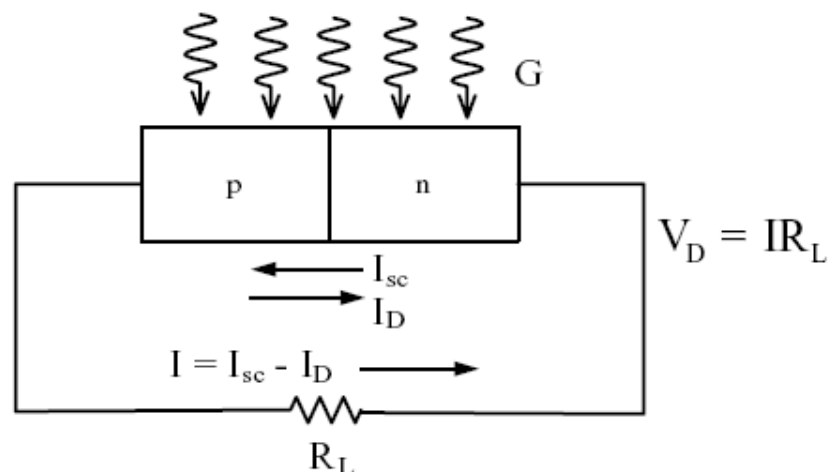


Figure I-5 : Illustration des différents mécanismes extérieurs [10].

I.7 Absorption optique

Les théories fondamentales de la lumière nous permettent de connaître les échanges entre la matière et le rayonnement lumineux ; la quantité associée au rayonnement lumineux s'appelle photons, dans le cadre de la mécanique quantique, l'énergie de photon correspondant à une radiation donnée est reliée à sa longueur d'onde par la relation (I.3).

Envisageons maintenant la nature de l'absorption lumineuse par un matériau.

Considérons une source lumineuse monochromatique telle que $h\nu > E_g$ et de flux $F(E)$ incident qui représente le nombre des photons d'énergie E qui arrivent sur l'unité de surface du semi-conducteur pendant l'unité de temps

On a $R(E)$ est le coefficient de réflexion du semi-conducteur pour le rayonnement d'énergie E , donc le flux de photons entrant dans l'échantillon s'écrit :

$$F(E) = F_i(E)[1 - R(E)] \quad (\text{I-4})$$

On définit aussi le coefficient d'absorption α du matériau semi-conducteur par la variation relative du flux par unité de longueur (cm^{-1}) :

$$\alpha = -\frac{1}{dx} \frac{dF}{F} \quad (\text{I-5})$$

α : est positif quand dF est négatif, il y a absorption du rayonnement, en intégrant la relation précédente avec :

$$F(E,0) = F_i(E) \quad (\text{I-6})$$

On trouve

$$F(E,x) = F_i(E)e^{-(\alpha(E)x)} \quad (\text{I-7})$$

Le flux de photon d'énergie E à la profondeur x dans le semi-conducteur est :

$$F(E,x) = F_i(E)(1 - R(E))e^{-(\alpha(E)x)} \quad (\text{Ph /s/cm}^2) \quad (\text{I-8})$$

Le coefficient de réflexion $R(E)$ dépend de la nature du semi-conducteur, il varie peu avec l'énergie des photons incidents et sa valeur dépend essentiellement de l'angle d'incidence de rayonnement incident, la réflexion est minimale quand le rayonnement est perpendiculaire à la surface de l'échantillon (incidence normale) et dans ce cas :

$$R = \left(\frac{n-1}{n+1} \right)^2 = \left(\frac{\sqrt{\varepsilon_r} - 1}{\sqrt{\varepsilon_r} + 1} \right)^2 \quad (\text{I-9})$$

ε_r : L'indice diélectrique relatif du matériau, dans les meilleures conditions le coefficient de réflexion est compris entre 0.25 et 0.35 avec un revêtement antireflet.

I.8 Caractéristiques électriques d'une cellule photovoltaïque

-Sous éclairement

Les photons incidents créent des porteurs dans les zones n et p et dans la zone de charge d'espace. Les photoporteurs auront un comportement différent suivant la région :

- dans la zone n ou p, les porteurs minoritaires qui atteignent la zone de charge d'espace sont "envoyés" par le champ électrique dans la zone p (pour les trous) ou dans la zone n (pour les électrons) où ils seront majoritaires. On aura un photocourant de diffusion.

- dans la zone de charge d'espace, les paires électrons / trou créées par les photons incidents sont dissociées par le champ électrique : les électrons vont aller vers la région n, les trous vers la région p. On aura un photocourant de génération.

Ces deux contributions s'ajoutent pour donner un photocourant résultant I_{ph} . C'est un courant de porteurs minoritaires. Il est proportionnel à l'intensité lumineuse [5].

On peut calculer le courant de court-circuit en utilisant tous les paramètres physiques de la cellule solaire pour trouver l'équation suivante :

$$J_{sc} = \int_0^{+\infty} J_{sc}(\lambda) d\lambda = \int_0^{+\infty} [J_{scE}(\lambda) + J_{scB}(\lambda)] d\lambda \quad (\text{I.10})$$

L'unité de la densité de court circuit est A/cm^2 .

Où J_{scE} et J_{scB} sont les densités de courant dans l'émetteur et la base respectivement et sont données par les deux équations suivantes [10] :

La densité spectrale de courant dans l'émetteur :

$$J_{scE}(\lambda) = \frac{q\alpha\Phi_0(1-R)L_p}{(\alpha L_p)^2 - 1} \left[-\alpha L_p e^{-\alpha w_e} + \frac{S_e \frac{L_p}{D_p} + \alpha L_p - e^{-\alpha w_e} \left(S_e \frac{L_p}{D_p} Ch \frac{w_e}{L_p} + Sh \frac{w_e}{L_p} \right)}{Ch \frac{w_e}{L_p} + S_e \frac{L_p}{D_p} Sh \frac{w_e}{L_p}} \right] \quad (I.11)$$

La densité spectrale de courant dans la base :

$$J_{scB}(\lambda) = \frac{q\alpha\Phi_0'(1-R)L_n}{(\alpha L_n)^2 - 1} \left[-\alpha L_n - \frac{S_B \frac{L_n}{D_n} \left(Ch \frac{w_b}{L_n} - e^{-\alpha w_b} \right) + \alpha L_n e^{-\alpha w_b} + Sh \frac{w_b}{L_n}}{Ch \frac{w_b}{L_n} + S_B \frac{L_n}{D_n} Sh \frac{w_b}{L_n}} \right] \quad (I.12)$$

Les principaux paramètres d'une cellule solaire sont définis dans le tableau suivant :

Symbole	Nom	Unité
α	coefficient d'absorption	cm^{-1}
Φ_0	flux des photons à la surface de l'émetteur	$\text{photon}/\text{cm}^2 \mu\text{m s}$
Φ_0'	flux des photons à l'interface Base-Emetteur	$\text{photon}/\text{cm}^2 \mu\text{m s}$
L_n	la longueur de diffusion des électrons dans la base	cm
L_p	la longueur de diffusion des trous dans l'émetteur	cm
D_n	constante de diffusion des électrons dans la base	cm^2/s
D_p	constante de diffusion des trous dans l'émetteur	cm^2/s
S_e	la vitesse de recombinaison dans l'émetteur	cm/s
S_B	la vitesse de recombinaison dans la base	cm/s
R	coefficient de réflexion	-

Tableau I-1 : Paramètres physiques des cellules solaires

-Sous obscurité

Le courant dans une telle structure de type jonction $p-n$ est appelé courant d'obscurité et a la forme suivante :

$$I_{obs} = I_S \left[e^{\frac{qV}{nK_B T}} - 1 \right] \quad (I.13)$$

Avec : q = charge élémentaire = $1.6 \times 10^{-19} C$

V = tension aux bornes de la jonction (V)

K_B = constante de Boltzmann = $1.38 \times 10^{-23} J.K^{-1}$

T = température (K)

I_s = courant de saturation inverse de la jonction p-n

n = coefficient d'idéalité de la jonction

Ce courant d'obscurité correspond au **courant de diode** (I_d), son expression dépend de tous les paramètres de la cellule solaire. Le courant d'obscurité délivré par l'émetteur est [10]:

$$J_{obsE} = q \frac{n_i^2 D_p}{N_{Deff} L_p} \left[\frac{S_e \frac{L_p}{D_p} Ch \frac{w_e}{L_p} + Sh \frac{w_e}{L_p}}{S_e \frac{L_p}{D_p} Sh \frac{w_e}{L_p} + Ch \frac{w_e}{L_p}} \right] \left[e^{\frac{V}{V_T}} - 1 \right] \quad (I.14)$$

Le courant d'obscurité délivré par la base est :

$$J_{obsB} = q \frac{n_i^2 D_n}{N_{Aeff} L_n} \left[\frac{S_b \frac{L_n}{D_n} Ch \frac{w_b}{L_n} + Sh \frac{w_b}{L_n}}{S_b \frac{L_n}{D_n} Sh \frac{w_b}{L_n} + Ch \frac{w_b}{L_n}} \right] \left[e^{\frac{V}{V_T}} - 1 \right] \quad (I.15)$$

Finalement le courant d'obscurité est donné par l'équation suivante :

$$J_{obs} = J_{obsE} + J_{obsB} = J_0 \left[e^{\frac{V}{V_T}} - 1 \right] \quad (I.16)$$

I.8-1 Superposition

Une fois les caractéristiques sous obscurité et sous illumination sont calculées séparément, on peut calculer la caractéristique courant-tension I(V) obtenue par superposition des deux équations précédentes [10], on trouve :

$$J_{tot} = J_{SC} - J_{obs} \quad (I.17)$$

Donc :

$$J_{tot} = J_{SC} - J_0 \left[e^{\frac{V}{V_T}} - 1 \right] \quad (I.18)$$

Il faut noter que cette équation concerne la densité de courant, et pour l'intensité de courant on peut écrire :

$$I_{tot} = I_{SC} - I_0 \left[e^{\frac{V}{V_T}} - 1 \right] \quad (I.19)$$

On sait que $I = A.J$

Ainsi, dans une cellule photovoltaïque deux courants s'opposent : le courant d'éclairement et le courant d'obscurité [10].

La caractéristique d'une cellule sous obscurité est identique à celle d'une diode, sous éclairement elle a l'allure présentée sur la figure I-6 suivante :

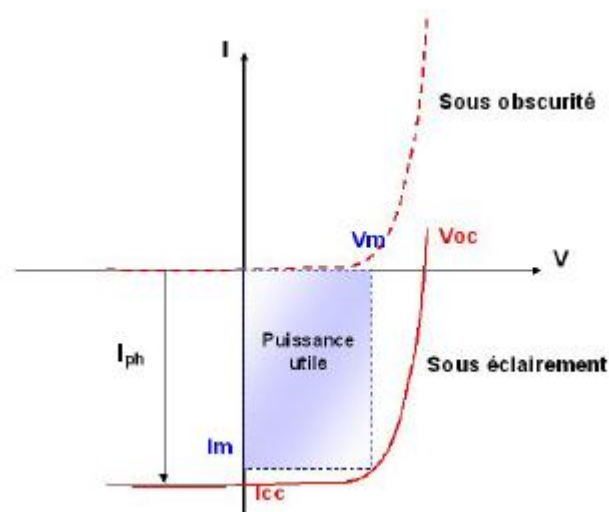


Figure I-6 : Caractéristiques $I=f(V)$ sous obscurité et sous éclairement d'une cellule photovoltaïque

I.8-2 La tension de circuit ouvert V_{co}

C'est une tension qui correspond à un courant nul aux bornes de la cellule, elle est donnée par l'équation suivante :

$$I = 0 = I_{SC} - I_0 \left(e^{\frac{V_{OC}}{V_T}} - 1 \right) \quad (I.20)$$

La tension de circuit ouvert est donnée par :

$$V_{OC} = V_T \text{Ln} \left(1 + \frac{I_{SC}}{I_0} \right) \quad (I.21)$$

A partir de l'équation ci-dessus nous observons que la valeur de V_{oc} dépend du rapport I_{sc}/I_0 selon une relation logarithmique, et on sait que le courant de court-circuit varie presque linéairement avec l'irradiance, donc l'effet de l'irradiance est plus important dans I_{sc} que dans V_{oc} . On peut montrer aussi que la tension de circuit ouvert est indépendante de la surface totale de la cellule solaire, c'est à dire la valeur de V_{oc} reste constante sous une même condition de l'illumination et de la température quelque soit la surface de la cellule solaire. Cette explication est confirmée par l'équation suivante [10] :

$$V_{OC} = V_T \text{Ln} \left(1 + \frac{J_{SC}}{J_0} \right) \quad (I.22)$$

I.8-3 La puissance maximale

La puissance maximale de la cellule solaire est le produit du courant circulant dans la charge et la tension aux bornes de la cellule. La puissance maximale dans n'importe quel point de la caractéristique I-V est donnée par [12] :

$$P = I.V = (I_{SC} - I_D).V = \left[I_{SC} - I_S \exp \left(\frac{qV}{K_B T} \right) \right].V \quad (I.23)$$

I.8-4 Facteur de Forme

L'aspect géométrique du facteur de forme est le rapport du rectangle hachuré à la région large qui est schématisé sur la figure I.7, on peut dire aussi que le facteur de forme est défini comme le rapport de la puissance maximale P_{max} et le produit $I_{sc} \times V_{oc}$ [10].

$$FF = \frac{V_m I_m}{V_{OC} I_{SC}} = \frac{P_{max}}{V_{OC} I_{SC}} \quad (I.24)$$

Le facteur de forme n'a pas d'unité.

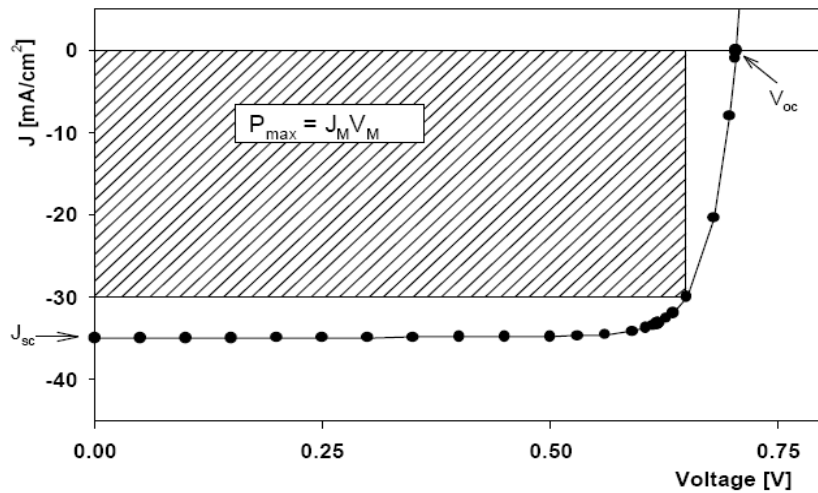


Figure I-7: Caractéristique J-V avec les paramètres importants [9]

I.8-5 Rendement de la cellule solaire

L'efficacité de conversion ou bien le rendement de la cellule solaire, est défini comme le rapport entre la puissance de sortie délivrée par la cellule et la puissance incidente reçue par la surface de la cellule.

$$\eta = \frac{V_m \cdot I_m}{P_{in}} = FF \frac{V_{oc} \cdot I_{sc}}{P_{in}} = FF \frac{V_{oc} \cdot I_{sc}}{G \times S} = FF \frac{V_{oc} \cdot J_{sc}}{G} \quad (\text{I.25})$$

On observe que le rendement de la cellule solaire est proportionnel aux trois paramètres photovoltaïques importants : la tension de circuit ouvert, la densité de courant de court-circuit et le facteur de forme pour une irradiance G donnée. Le rendement est toujours donné en % [11].

I.8-6 L'efficacité quantique

On peut définir l'efficacité quantique (QE) par le rapport des porteurs collectés à la sortie de la cellule et le nombre de porteurs générés par les photons incidents pour une telle longueur d'onde. Chaque photon crée une paire électron-trou qui contribue au photocourant, donc l'efficacité quantique peut atteindre la valeur 100% s'il n'y a pas une réflexion sur la surface frontale de la cellule solaire, et s'il n'y a pas le phénomène de recombinaison. A l'heure actuelle et avec toutes les techniques modernes utilisées pour la fabrication des cellules solaires, la réflexion reste d'environ 30%.

Notons que lors de la pénétration des photons dans la cellule solaire, il est très important de considérer la courbe de l'efficacité quantique qui nous aide à localiser les pertes importantes dans la structure d'un tel dispositif optoélectronique [3].

$$QE(\lambda) = \frac{n(\lambda)}{N(\lambda)} \quad (\text{I.26})$$

Où $n(\lambda)$ est le nombre de paires électron-trou générée contribuant à I_L , et $N(\lambda)$ est le nombre de photons incidents, les deux sont mesurés à une longueur d'onde spécifique [9].

I.9-Modélisation électrique de la cellule photovoltaïque

Le fonctionnement de la cellule photovoltaïque sous éclairage est celui d'un générateur de courant, produisant un courant I_{ph} auquel se soustrait le courant de la diode en polarisation directe. Pour tenir compte des différentes limitations de la cellule photovoltaïque, on introduit le modèle à deux diodes représenté sur la figure suivante (Figure I-8) [8].

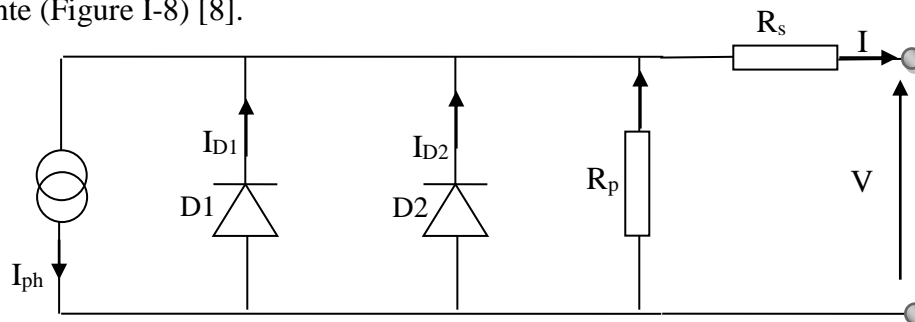


Figure I-8 : Modélisation électrique d'une cellule photovoltaïque.

Les différents paramètres de ce modèle sont :

Le générateur de courant : il délivre le photocourant provoqué par la génération des paires électron-trou.

La résistance série R_s : c'est l'une des raisons qui limite le fonctionnement des cellules solaires, en fait le courant généré dans le volume de la cellule solaire atteint les contacts à travers la résistivité des différentes couches constitutives de la cellule, à savoir l'émetteur, la base et les contacts métalliques. Ce terme doit idéalement être le plus faible possible pour limiter son influence sur le courant de la cellule. Ceci peut être réalisé en optimisant le contact métal/semiconducteur, et en diminuant la résistivité du matériau utilisé.

La résistance parallèle R_p : elle traduit l'existence de shunts à travers l'émetteur, causé par un défaut. Ceci est le cas lorsque la diffusion des contacts métalliques à haute température perce l'émetteur.

La diode $d1$: modélise la diffusion des porteurs dans la base et l'émetteur. Son influence sera d'autant plus grande que le matériau présentera une bonne longueur de diffusion.

La diode $d2$: modélise la génération/recombinaison des porteurs dans la zone de charge d'espace.

Le courant au sein de la cellule photovoltaïque est donc donné par la relation :

$$I = I_L - I_{01} \left(e^{\frac{V + IR_s}{n_1 V_T}} - 1 \right) - I_{02} \left(e^{\frac{V + IR_s}{n_2 V_T}} - 1 \right) - \frac{V + IR_s}{R_{sh}} \quad (I-27)$$

I.10-Interêt de l'InGaN pour les cellules

Le Nitrure de gallium-indium (InGaN, $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$) est un semi-conducteur III-V composé de nitrure de gallium (GaN) et de nitrure d'indium (InN). D'une manière générale les III-nitrides sont comparativement aux III-phosphures et III-arséniures, plus résistants, moins sensibles aux hautes températures et plus durable. Un grand intérêt pour l'alliage ternaire InGaN s'est avéré récemment dans le domaine optoélectronique grâce à ses propriétés optiques : un coefficient d'absorption élevé, un gap direct, dont la bande interdite peut varier théoriquement entre 0,67 et 3,4 eV, ainsi que pour ses propriétés électriques : faibles masses effectives et mobilité des

porteurs relativement élevée [13]. Le tableau I-2 regroupe les valeurs théoriques des rendements et celle de Voc et Jsc obtenus dans le cas de structures multijonctions, homojonctions et multi-puits quantiques (MQWs) à base d'InGaN sous différents spectres.

Structures pin hétérojonctions à base d'InGaN			
Structure	In%	Rendement	Ref
60nm (AM1.5)	12%	1, 57%	Matioli 2011 [14]
90nm	11%	1, 41%	Lang 2011 [15]
200nm (AM0)	12%	4,6%	Neufeld 2008 [16]
150nm (AM1.5)	10%		Zheng 2008 [17]
200nm	4%		Jani 2007 [18]
Structures pin homojonctions à base d'InGaN			
Structure	In%	Rendement	Ref
InGaN homo (AM1.5)	16%	< 1%	Islam 2013 [19]
InGaN homo (AM1.5)	17%	Voc = 1, 47V	
		Jsc = 0, 26mA.cm ⁻²	Jampana 2010 [20]
200nm	4%	5,14%	Cai 2009 [21]
50/150/200 (nm)	2%	Voc = 2,	Cai 2009 [22]
80/300/800 (nm)	< 0,3%	Voc = 2, 5V et FF = 61%	Chen 2008 [23]
InGaN homo	18%	Voc = 0, 43V, FF = 0, 57	
		Jsc = 0, 04mA.cm ⁻²	Yang 2007 [24]
Cellules solaires multi-puits quantiques (MQWs) d'InGaN/GaN/Al ₂ O ₃			
Structure		Rendement	Ref
10 InGaN(2, 5nm)/GaN(14,5nm)		2, 13% pour 1 soleil et 2, 23% pour 150 soleils	Yang 2011 [25]
11 InGaN (3nm)/GaN(16nm) 35%		2, 95% pour 1 soleils et 3, 03% pour 30 soleils	Dahal 2010 [26]

Tableau I-2 : Valeurs théoriques des rendements et celle de Voc et Jsc pour des cellules solaires multijonctions, homojonctions et multi-puits quantiques (MQWs) à base d'InGaN pour différents spectres.

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons abordé les principales notions du système solaire, ainsi que leurs caractéristiques fondamentales : l'interaction rayonnement-matière, le principe de fonctionnement, les différents paramètres électriques I_{sc} , V_{oc} , FF et le rendement. Nous avons aussi introduit le modèle électrique qui représente le fonctionnement d'une cellule solaire. Finalement, nous avons montré l'importance des hétérojonctions qui sont à la base des nouveaux composants électroniques et optoélectroniques.

Bibliographie

- [1] *Elaiissa Trybus*, Molecular Beam Epitaxy Growth of Indium Nitride and Indium Gallium Nitride Materials for Photovoltaic Applications 2009.
- [2] *Johan Wennerberg*, Design and Stability of Cu(In,Ga)Se₂-Based Solar Cell Modules 2002.
- [3] *Ana Kanevce*, anticipated performance of cu(In,Ga)se₂ solar cells in the thin-film limit 2007.
- [4] *Nichiporuk Oleksiy*, simulation, fabrication et analyse de cellules photovoltaïques à contacte arrière inter-digités 2005.
- [5] *Tom Markvart*, University of Southampton, UK and Luis Castañer Universidad Politecnica de Catalunya, Barcelona, Spain ELSEVIER, Solar Cells: Materials, Manufacture and Operation 2004.
- [6] *Gowri Sivaraman*, Characterization Of Cadmium Zinc Telluride Solar Cells 2003.
- [7] *Venkatesh Mohanakrishnaswamy*, Processing And Characterization Of CIGS - Based Solar Cells 2004.
- [8] *Fatima Abdo*, Croissance de couches minces de silicium par épitaxie en phase liquide a basse température pour applications photovoltaïques 2007.
- [9] *Markus Gloeckler*, Numerical Modeling of CIGS Solar Cells: Definition of the Baseline and Explanation of Superposition Failure 2002.
- [10] *Luis Castañer and Santiago Silvestre*, Modelling Photovoltaic Systems using PSpice1 Universidad Politecnica de Catalunya, Barcelona, Spain 2003.
- [11] *Alexei O. Pudov*, impact of secondary barriers on CuIn_{1-x}Ga_xSe₂ solar-cell operation 2005.
- [12] *Umesh K. Mishra and Jasprit Singh* ((Semiconductor Device Physics and Design)) 2007
- [13] *EL Gmili Youssef*, Etude et caractérisations par cathodo-luminescence de couches minces d'InGaN pour le photovoltaïque 2013
- [14] *E. Matioli, C. Neufeld, M. Iza, S. C. Cruz, A. A. Al-Heji, X. Chen, R. M. Farrell, S. Keller, S. DenBaars, U. Mishra, S. Nakamura, J. Speck, and C. Weisbuch*. High internal and external quantum efficiency InGaN/GaN solar cells. Applied Physics Letters 2011.
- [15] *J. R. Lang, C. J. Neufeld, C. A. Hurni, S. C. Cruz, E. Matioli, U. K. Mishra, and J. S. Speck*. High external quantum efficiency and fill-factor InGaN/GaN heterojunction solar cells grown by NH₃ based molecular beam epitaxy. Applied Physics Letters 2011.

- [16] C. J. Neufeld, N. G. Toledo, S. C. Cruz, M. Iza, S. P. DenBaars, and U. K. Mishra. High quantum efficiency InGaN/GaN solar cells with 2.95 eV band gap. *Applied Physics Letters* 2008.
- [17] X. Zheng, R. H. Horng, D. S. Wu, M. T. Chu, W. Y. Liao, M. H. Wu, R. M. Lin, and Y. C. Lu. High-quality InGaN/GaN heterojunctions and their photovoltaic effects. *Applied Physics Letters* 2008.
- [18] O. Jani, I. Ferguson, C. Honsberg, and S. Kurtz. Design and characterization of GaN/InGaN solar cells. *Applied Physics Letters* 2007.
- [19] Md. Rafiqul Islam, Md. Rejvi Kaysir, Md. Jahirul Islam, A. Hashimoto, and A. Yamamoto. MOVPE Growth of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ($x \leq 0.4$) and Fabrication of Homojunction Solar Cells. *Journal of Materials Science & Technology* 2013.
- [20] B.R. Jampana, A.G. Melton, M. Jamil, N.N. Faleev, R.L. Opila, I.T. Ferguson, and C.B. Honsberg. Design and Realization of Wide-Band-Gap (2.67 eV) InGaN p-n Junction Solar Cell. *Electron Device Letters, IEEE* 2010.
- [21] X.-M. Cai, S.-W. Zeng, and B.-P. Zhang. Favourable photovoltaic effects in InGaN pin homojunction solar cell. *Electronics Letters* 2009.
- [22] X. M. Cai, S. W. Zeng, and B. P. Zhang. Fabrication and characterization of InGaN p-i-n homojunction solar cell. *Applied Physics Letters* 2009.
- [23] X. Chen, K.D. Matthews, D. Hao, W.J. Schaff, and L.F. Eastman. Growth, fabrication, and characterization of InGaN solar cells. *Physica Status Solidi A* 2008.
- [24] C. Yang, X. Wang, H. Xiao, J. Ran, C. Wang, G. Hu, X. Wang, X. Zhang, J. Li, and J. Li. Photovoltaic effects in InGaN structures with p-n junctions. *Physica Status Solidi (a)* 2007.
- [25] Chih-Ciao Yang, C. H. Jang, Jinn-Kong Sheu, Ming-Lun Lee, Shang-Ju Tu, Feng-Wen Huang, Yu-Hsiang Yeh, and Wei-Chih Lai. Characteristics of InGaN-based concentrator solar cells operating under 150x solar concentration. *Opt. Express* 2011.
- [26] R. Dahal, J. Li, K. Aryal, J. Y. Lin, and H. X. Jiang. InGaN/GaN multiple quantum well concentrator solar cells. *Applied Physics Letters* 2010.

2

Propriétés générales des matériaux nitrurés

Sommaire

2-1 Introduction.....	22
2-2 Les nitrures d'élément III.....	22
2-3 La structure cristallographique.....	23
2-4 Les différents substrats utilisés pour la croissance de N-III hexagonal.....	25
2-4-1 Le silicium (111).....	26
2-4-2 Saphir (Al_2O_3).....	27
2-4-3 Le carbure de silicium (SiC).....	27
2-5 Les alliages N-III.....	28
2-6 Propriétés de l'alliage ternaire $In_xGa_{1-x}N$	29
2-6-1 Energie de gap d' $In_xGa_{1-x}N$	29
2-6-2 Variation du gap avec la température.....	30
2-6-3 Paramètres du réseau de l'alliage ternaire $In_xGa_{1-x}N$	31
2-6-4 Dopage du ternaire $In_xGa_{1-x}N$	32
2-6-4-1 Le dopage de type N.....	32
2-6-4-2 Le dopage de type P.....	32
2-7 La masse effective.....	33
2-8 Les densités effectives des états.....	34
2-9 La mobilité.....	34
2-10 Coefficient d'absorption de l' $In_xGa_{1-x}N$	35
2-11 L'hétérojonction InGaN/GaN.....	37
2-12 L'influence de la polarisation sur la structure de bande gap.....	38
Conclusion.....	39

2-1 Introduction

Le but de ce chapitre est l'introduction de la morphologie des matériaux semi-conducteurs III-N, car la plupart des propriétés physiques, chimiques et même biochimiques dépendent du positionnement des atomes entre eux, et pour savoir comment les atomes s'arrangent pour former la structure d'un matériau semi-conducteur nitruré. Pour cette raison, un rappel concernant les propriétés cristallographiques de ce dernier s'avère nécessaire.

2-2 Les nitrures d'élément III

Les semi-conducteurs III-V et surtout les nitrures d'élément III sont des candidats pour la fabrication des composants de l'électronique et de l'optoélectronique, parce qu'ils possèdent des propriétés mécaniques excellentes telles que le point de fusion élevé (3000 C° pour AlN) et (>1700 C° pour GaN) et (1100 C° pour InN) [1], une haute dureté, une haute conductivité thermique etc... [2]. En outre, les propriétés optiques sont aussi remarquables telle qu'une faible permittivité diélectrique et une énergie de gap très large qui couvrent tout le spectre du visible jusqu'au proche ultraviolet [3].

Les semi-conducteurs III-V ont été largement utilisés dans les diodes électroluminescentes (LEDs), les diodes lasers (LDs), et les photodiodes MSM, PN, PIN et APD. Pour l'enregistrement optique de haute capacité et pour les imprimantes lasers de haute résolution [3], elles sont utilisées aussi pour la fabrication de composants électroniques comme les MODFETs, HEMETs, et récemment, ils sont utilisés pour la fabrication des panneaux solaires possédant des meilleures performances [1],

Les nitrures de groupe III ont été étudiés premièrement pour les systèmes binaires entre la fin des années 1920 et le début des années 1930 par Tiede *et al*: Al-In-Ga-B-N, Nitrure de Gallium (GaN), Nitrure d'Aluminium (AlN), Nitrure d'Indium (InN) et Nitrure de Bore (BN) [4]. La combinaison entre ces systèmes binaires a permis de donner une nouvelle famille qui est les alliages ternaires tels que: $Al_xGa_{1-x}N$, $In_xGa_{1-x}N$ et $Al_xIn_{1-x}N$. Ainsi, les nitrures de groupe III pour les deux systèmes binaire et ternaire peuvent couvrir tout le spectre de 0,77 eV pour InN ($\lambda = 1610\text{nm}$) à 3,42 eV pour GaN ($\lambda = 362\text{nm}$) et jusqu'au 6,28 eV pour AlN ($\lambda = 197\text{nm}$) [2], toutes ces informations sont schématisées dans la figure II-1.

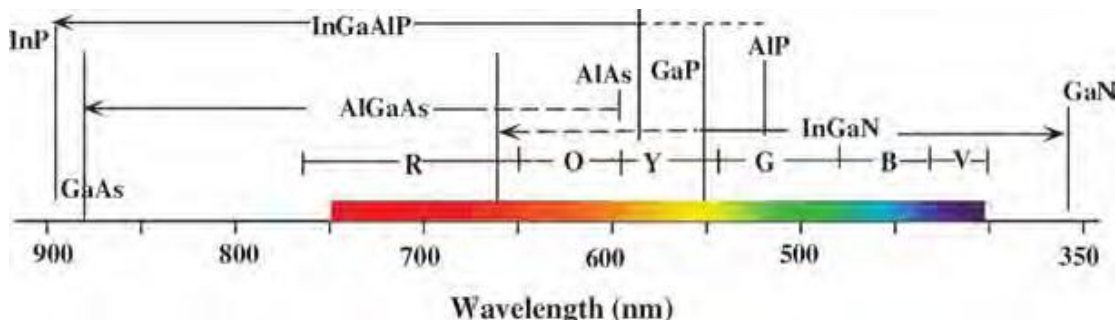


Figure II-1 : Longueurs d'onde pour différents matériaux III-V [5].

La figure II-2 illustre la relation liant la bande interdite et la constante du réseau pour les matériaux binaires des nitrures d'éléments III avec des substrats usuels à la température ambiante [6].

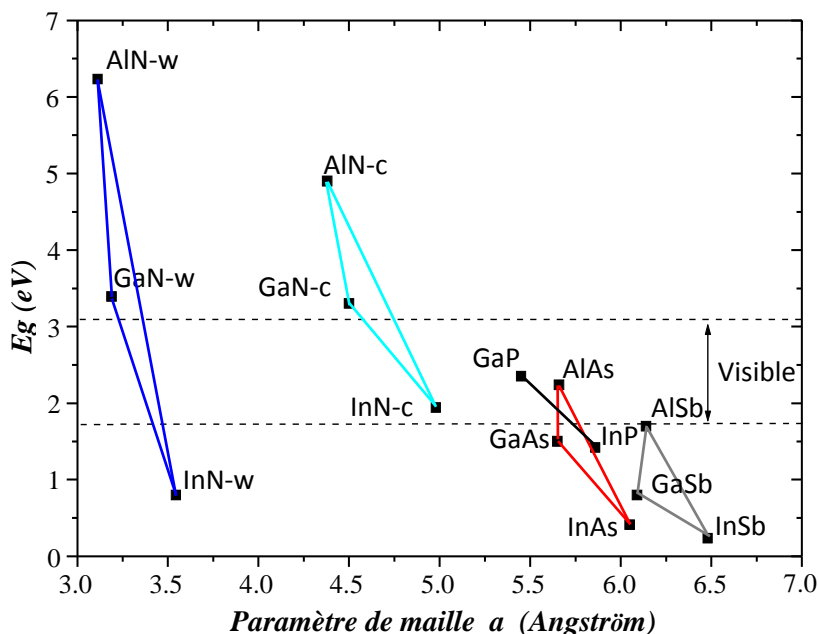


Figure II-2 : Énergie de gap à $T = 300K$ en fonction de la constante de réseau pour les composés III-N.

2-3 La structure cristallographique

Un cristal est un solide qui est constitué d'un arrangement régulier et périodique des atomes dans les trois dimensions spatiales (sauf les défauts localisés qui peuvent survenir durant la croissance du cristal). Ces défauts se manifestent largement dans les alliages (cas

des matériaux nitrurés), à cause de l'occupation des sites par divers types d'atomes. Enfin des défauts ponctuels (lacunes, interstitiels), des dislocations, les joints de grain (interface entre deux régions cristallines d'orientations différentes) perturbent l'ordre du cristal [1,2].

Pour les matériaux III-V et surtout les matériaux nitrurés : ils sont formés par l'association d'un élément de la colonne III (Ga, In, Al, B) et de l'élément N de la colonne V de la classification de Mendeleïev. Leurs alliages ternaires et quaternaires sont également définis comme des nitrures d'éléments III [2]. Ces matériaux peuvent être organisés selon deux structures principales: zinc-blende et wurtzite. L'obtention d'un arrangement plutôt qu'un autre est liée aux conditions de croissance ainsi qu'à la nature du substrat. Ces deux phases sont présentées sur la figure II.3 [5].

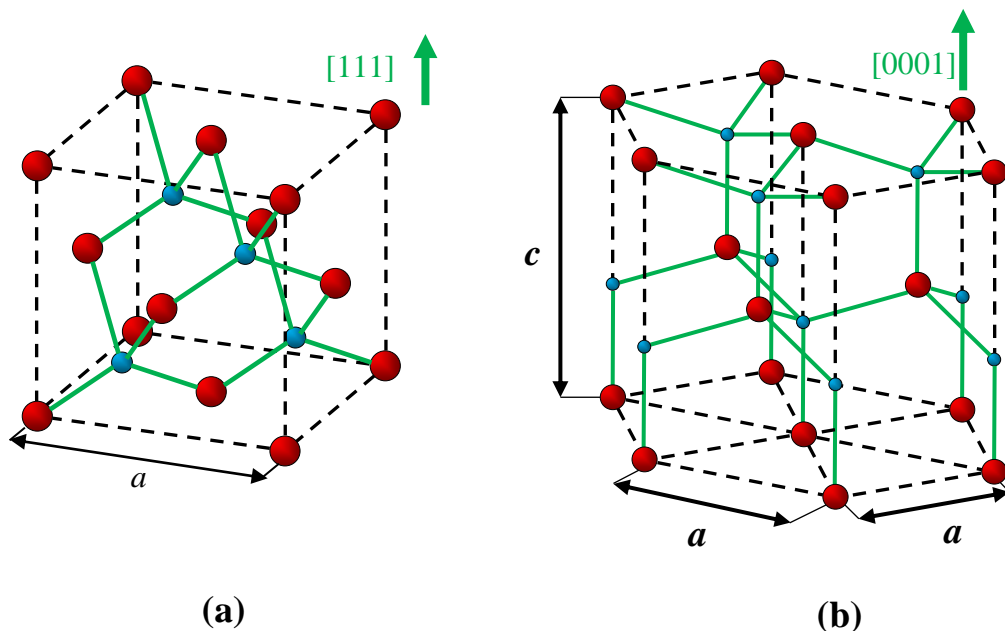


Figure II-3 : Structures blende de zinc (a) et wurtzite (b) de semi-conducteurs III-N

On peut construire la structure zinc-blende à partir de deux réseaux cubiques à faces centrées décalés d'un quart de la diagonale principale de la maille. L'un de ces deux réseaux est occupé par les atomes d'éléments III (Ga, Al, In) et l'autre par les atomes d'azote [6], le paramètre de maille correspondant à la longueur d'une arête du cube est noté a comme il est schématisé à la Figure II-3.

Pour obtenir la structure wurtzite, il faut accompagner deux réseaux hexagonaux, l'un est occupé avec les atomes de gallium (atome d'élément III), et l'autre avec les atomes d'azote, ces deux réseaux sont interpénétrés et décalés de $u = (3/8) \times c$ de la maille élémentaire comme indiqué à la figure (1-b), où c et a représentent les paramètres de maille [7]. Pour une structure idéale $c/a \approx \sqrt{8/3}$. Le paramètre u représente la liaison entre les atomes d'azote (cation) et de l'élément III (anion) selon l'axe $[0001]$, Les paramètres de maille des principaux nitrures d'éléments III sont tabulés dans le tableau II-1.

La phase wurtzite est la phase la plus stable thermodynamiquement à cause des liaisons tétraédriques et à cause de l'attraction ionique forte qui existe entre les atomes d'azote (anion) et de l'élément III (cation).

Matériau	Constante de réseau (Å)	Constante de réseau (Å)	référence
w-GaN	a = 3,189 c = 5,185	a=3,191 c = 5,185	[6], [5]
w-AlN	a = 3,112 c = 4,982	a = 3,111 c = 4,978	[7], [8]
w-InN	a = 3,548 c = 5,760	a = 3,545 c = 5,703	[5], [8]

Tableau II-1 : Paramètres de maille des principaux nitrures d'éléments III dans la phase wurtzite.

2-4 Les différents substrats utilisés pour la croissance de N-III hexagonal

Le principal problème rencontré pour l'épitaxie de nitrure d'élément III 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 (SiC) et le silicium (Si), les caractéristiques de ces substrats sont répertoriées dans le tableau II-2 [8].

Substrats	Structure cristalline	Paramètres de maille (Å)	Conductivité thermique (W.cm ⁻¹ .K ⁻¹)
Al ₂ O ₃	Hexagonal	a = 4.758, c = 12.99	0.5
6H SiC	Hexagonal	a = 3.08, c = 15.12	3.3
Si (111)	Cubique	a = 5.43102	1.5

Tableau II-2 : Les substrats conventionnels pour les nitrures de groupe III.

2-4-1 Le silicium (111)

Les substrats en silicium sont très attractifs non seulement parce qu'ils présentent une bonne morphologie de surface et sont disponibles à bas prix, mais également parce qu'ils permettent une intégration des dispositifs à base de GaN dans la microélectronique silicium, en plus le GaN montre un désaccord de maille avec le silicium (111) d'environ 17% [8]. Contrairement aux substrats saphir et carbure de silicium, le silicium (111) possède une maille plus importante que celle de GaN, par conséquent, le GaN se trouve par définition en extension lorsque il est épitaxié sur le silicium (111) provoquant la formation de craquelure et de nombreux défauts. Les techniques de croissance conventionnelles utilisées pour les autres substrats ne suffisent pas pour limiter la formation de dislocations et de craquelure. Dans la figure II.4 sont illustrées trois différentes directions de silicium [001], [011] et [111], les propriétés chimiques, thermiques, mécaniques et optiques pour le Si à la température ambiante sont répertoriées dans l'annexe II [8].

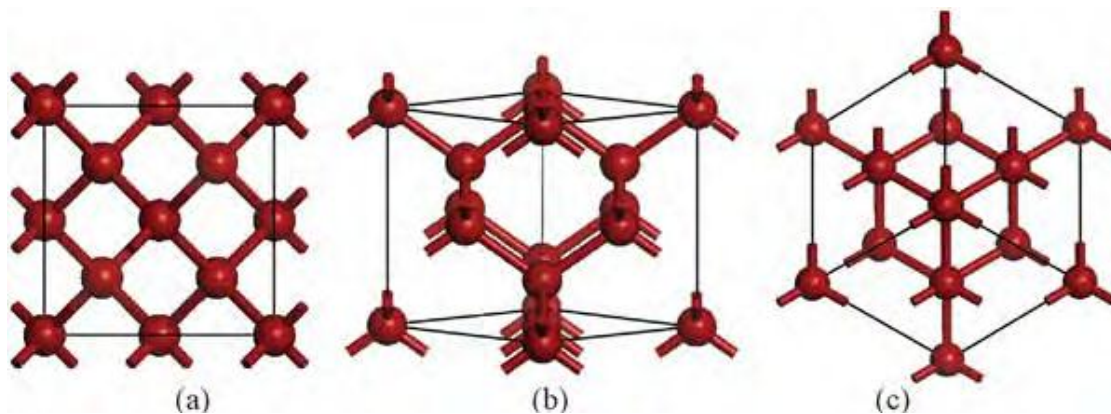


Figure II-4: Différentes directions cristallographiques pour le silicium (a) [001], (b) [011] et (c) [111] [6].

2-4-2 Saphir (Al_2O_3)

A cause de sa grande disponibilité, sa transparence, son faible coût et surtout sa forte stabilité à haute température, le saphir devient le substrat le plus utilisé dans la croissance des matériaux nitrurés d'élément III[9], mais malgré tout ça le saphir a un désaccord de maille avec ces matériaux, à titre d'exemple le saphir a un désaccord de maille avec le GaN de (33%), qui va générer de nombreux défauts cristallins. Les chercheurs sont parvenus à réduire ce désaccord à 16% grâce à une croissance désorientée de 30° dans le plan perpendiculaire à l'axe de croissance (0001) [9]. La figure II-5 montre comment les atomes de gallium se positionnent sur le sous réseau formé par les atomes d'oxygène du saphir et montre aussi le désaccord de maille entre les deux matériaux.

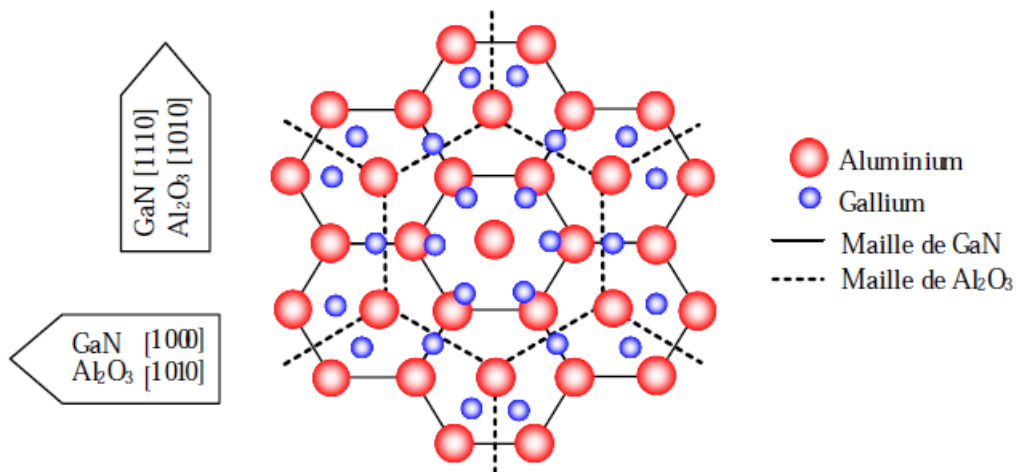


Figure II-5: Projection des plans de base des cations du saphir et du GaN dans l'orientation prise lors de l'épitaxie [10].

2-4-3 Le carbure de silicium (SiC)

Le polytype hexagonal le plus couramment utilisé est le 6H-SiC. Il a une bonne conductivité thermique ce qui est particulièrement important pour les applications aux dispositifs de puissance. Néanmoins, son utilisation pour les dispositifs optoélectroniques de type diode électroluminescente reste moins courante que celle du saphir, de par son absorption d'une partie du spectre visible, et enfin son coefficient de dilatation thermique plus petit que celui du GaN qui peut induire l'apparition de fissures lors du refroidissement et limite l'épaissement des couches et ainsi la diminution des défauts comme sur saphir.

Le désaccord de maille est de 3.5% avec le GaN. La densité de dislocations des couches de GaN épitaxiées est de l'ordre de 10^9 - $10^{10}/\text{cm}^2$, comparable à celle sur substrat saphir. La contrainte résiduelle est généralement une contrainte en tension, due à la différence de coefficient thermique [11]. L'épitaxie effectuée sur la face Si (C) détermine la polarité Ga (N) de la couche déposée. La figure II-6 montre la structure cristallographique de SiC (6H-SiC).

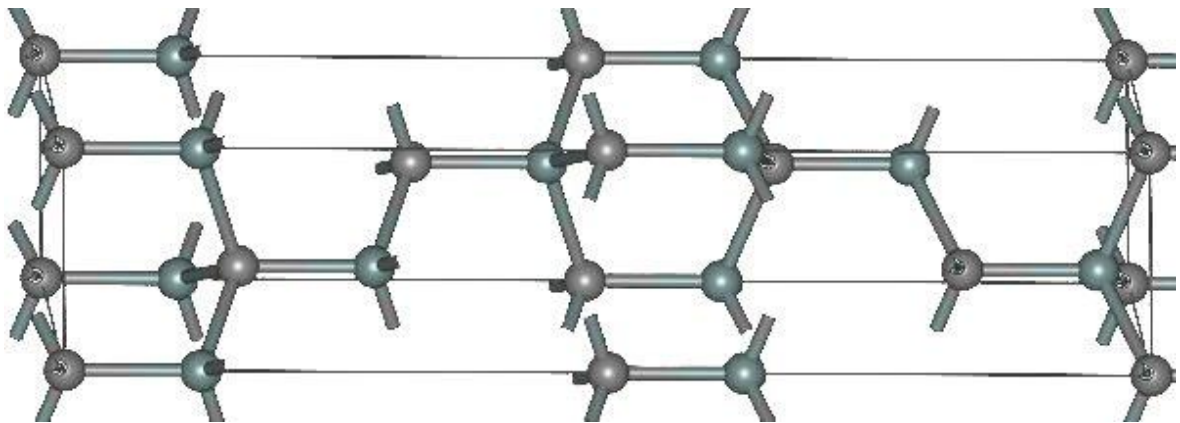


Figure II-6: Structure cristallographique de SiC (6H-SiC)

Dans ce travail, nous nous intéressons seulement au substrat silicium (111).

2-5 Les alliages N-III

Comme indiqué précédemment, les composés binaires GaN, AlN et InN peuvent couvrir tout le spectre visible jusqu'à l'ultraviolet, mais on sait que les valeurs de ses énergies de gap sont limitées ce qui provoque un problème lorsqu'on s'intéresse à une valeur particulière de la longueur d'onde. La résolution de ce problème nécessite l'utilisation des alliages ternaires et même quaternaires où on peut facilement ajuster la valeur de la fraction molaire pour avoir la longueur d'onde désirée. En particulier, les alliages ternaires InGaN font l'objet de notre travail puisqu'ils présentent des caractéristiques très attractives surtout comme candidats pour la fabrication des cellules solaires plus performantes.

2-6 Propriétés de l'alliage ternaire $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$

Le Nitrure de gallium-indium (InGaN , $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$) est un semi-conducteur III-V composé de nitrure de gallium (GaN) et de nitrure d'indium (InN). C'est un composé à gap direct, dont la bande interdite peut varier théoriquement entre 0,67 et 3,4 eV. Pour la détermination des certaines propriétés de l'alliage ternaire InGaN , la loi de Vegard est souvent utilisée pour tenir compte des propriétés des binaires constituant l'alliage.

2-6-1 Energie de gap d' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$

Pour l'énergie de gap, la loi de Vegard n'est plus utilisée, car l'interpolation linéaire entre l'énergie de gap d' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ et les énergies de bande interdite des binaires n'est pas assez précise. Plusieurs études montrent que l'énergie de la bande interdite varie non-linéairement avec la composition x de l'indium [12], et un second terme est ajouté pour tenir compte de la courbure des énergies de bande interdite en fonction de la composition. Cette correction de courbure est caractérisée par le paramètre de courbure comme montre la relation quadratique de J.C. Phillips [13]:

$$E_g(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) = xE_g(\text{InN}) + (1-x)E_g(\text{GaN}) - xb(1-x) \quad (\text{II-1})$$

Où

x La concentration d'Indium dans l' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$

$E_g(\text{InN})$ L'énergie de la bande interdite du binaire InN.

$E_g(\text{GaN})$ L'énergie de la bande interdite de binaire GaN.

b Le paramètre de courbure $b = 1.43 \text{ eV}$ [12].

La figure II-7 montre l'évolution du gap d' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, en fonction de la fraction molaire d'In.

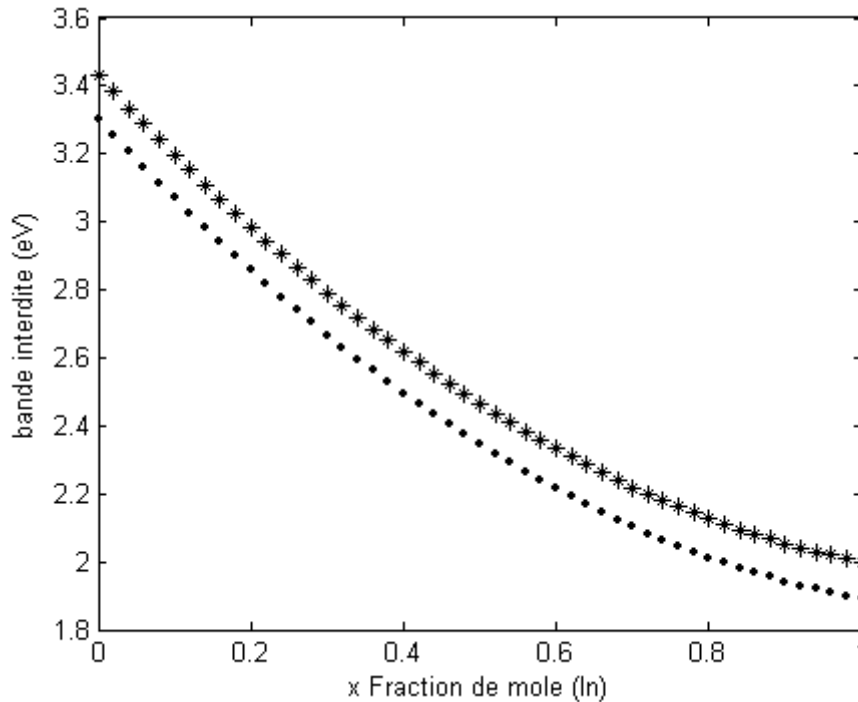


Figure II-7: Variation du gap d' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, en fonction de la fraction x de mole In [14].

2-6-2 Variation du gap avec la température

La variation de l'énergie de bande interdite E_g s'exprime en fonction de la température d'une manière générale par la formule empirique de Varshni [15].

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

Où

$E_g(0)$ représente l'énergie de la bande interdite à $T = 0$ K

α une constante empirique (meV/K)

β une constante associée à la température de Debey (K)

Les valeurs des coefficients de la relation empirique de Varshni pour les binaires de nitrure sont donnés dans le tableau II-3.

	GaN	AlN	InN
α (meV/K)	0.909	1.799	0.245
β (K)	830	1462	624

Tableau II-3: Coefficients de Varshni des III-nitrures en phase hexagonale d'après [15].

Pour un ternaire de type InGa_xN, les coefficients de Varshni peuvent s'exprimer en fonction de ceux du binaire par la loi de Vegard [15].

$$\alpha_{\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}} = x\alpha_{\text{InN}} + (1-x)\alpha_{\text{GaN}} \quad (\text{II-3})$$

Avec :

x : Fraction molaire.

α_{ij} : Paramètre de coefficient binaire.

2-6-3 Paramètres du réseau de l'alliage ternaire $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$

L'évolution des paramètres de maille c et a en fonction de la composition x est donnée par la loi de Vegard selon les équations [16]:

$$a_{\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}}(x) = (3.1986 + 0.3862x) \text{ \AA} \quad (\text{II-4})$$

$$c_{\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}}(x) = (5.2262 + 0.574x) \text{ \AA} \quad (\text{II-5})$$

Pour une structure idéale $c/a \approx \sqrt{8/3}$, le paramètre u représente la liaison entre les atomes d'azote (cation) et de l'élément III (anion) selon l'axe $[0001]$, il s'exprime en fonction de x suivant une relation quadratique [16]:

$$u_{\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}} = 0.3793x + 0.3772(1-x) - 0.0057x(1-x) \quad (\text{II-6})$$

Les paramètres de maille des principaux nitrures d'éléments III sont tabulés dans le tableau II-4.

	InN		GaN		AlN	
	idéal	réel	idéal	réel	idéal	réel
u (Å)	0,375	0,379	0,375	0,377	0,375	0,382
a (Å)	3,585	3,585	3,199	3,199	3,110	3,110
a/c	1,633	1,618	1,633	1,634	1,633	1,606

Tableau II-4: Paramètres de réseau des binaires III-N

2-6-4 Dopage du ternaire $In_xGa_{1-x}N$

Le dopage est une technique qui consiste à ajouter des impuretés en petites quantités à un matériau afin de modifier ses propriétés physiques (structurales, électroniques et optiques). Il existe deux types de dopage :

2-6-4-1 Le dopage de type N

Consiste à produire un excès d'électrons, qui sont négativement chargés. Le dopage des ternaires InGaN est relativement facile, car les nitrures sont intrinsèquement de type N. Le dopant le plus utilisé est le silicium, sa concentration dans les couches de nitrure est typiquement de l'ordre de 10^{18}cm^{-3} [17].

Il y a d'autre type des dopants de type N comme l'oxygène, l'hydrogène [18] ou le germanium [20]. Cependant, ils restent moins efficaces que le Si parce qu'ils créent une plus grande densité de défauts qui compense d'autant plus le dopage.

2-6-4-2 Le dopage de type P

Qui consiste à produire un déficit d'électrons, donc un excès de trous, considérés comme positivement chargés. Pour les ternaires InGaN, le dopage type P est difficile à réaliser, cette difficulté se pose puisque les nitrures sont intrinsèquement de type N, Le problème généralement rencontré est la création de défauts de compensation lors du dopage, c'est-à-dire que pour un dopant de type P introduit dans le réseau, un défaut possédant un caractère N se crée à proximité annulant l'effet du premier [19].

Aujourd'hui, le magnésium (Mg) est le dopant le plus fréquemment utilisé pour les nitrures [20].

2-7 La masse effective

La masse effective est l'un des paramètres propre des matériaux semi-conducteurs et chaque semi-conducteur est caractérisé par sa masse effective soit pour les électrons ou bien pour les trous.

On sait que le mouvement des électrons dans le réseau est différent de celui dans le vide. En plus de la force extérieure appliquée, il y a une force intérieure dans le cristal due aux ions chargés positivement ou les protons, et les électrons qui vont influencer le comportement de l'électron dans le réseau. De ce fait, les électrons sont distingués par leur masse effective d'un matériau à un autre à cause de la différence de leur potentiel.

Les masses effectives des électrons et aussi des trous pour les alliages ternaires InGaN sont souvent calculés en utilisant l'équation suivante [21]

$$\frac{1}{m_{AB}(x)} = \frac{x}{m_A} + \frac{1-x}{m_B} \quad (\text{II-7})$$

L'équation ci-dessus est en relation directe avec l'équation de Schrödinger telle que :

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_0} + \sum_r u(r - \tau) \right] \rightarrow -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_{AB}(x)} \quad (\text{II-8})$$

Les masses effectives ont été mesurées expérimentalement [21] et calculées. Les valeurs de la masse effective électronique de GaN convergent vers la valeur de 0.2 (± 0.01) m_0 . Plusieurs auteurs rapportent une masse anisotrope mais cet effet reste inférieur à l'incertitude de l'ordre 5-10%. La masse effective d'AlN semble montrer une anisotropie plus forte comme le prévoient les prédictions théoriques [22].

	GaN	AlN	InN
$m_{e }^*$; $m_{e\perp}^*$ (m_0)	0.20; 0.20	0.32; 0.30	0.07; 0.07
$m_{hh }^*$; $m_{hh\perp}^*$ (m_0)	2.0; 0.34	3.57; 0.64	1.67; 1.61
$m_{lh }^*$; $m_{lh\perp}^*$ (m_0)	1.19; 0.35	3.51; 0.64	1.67; 0.11

Tableau II-5: Masses effectives d'AlN, GaN et InN dans la phase wurtzite. Les symboles // et \perp indiquent respectivement la direction parallèle et perpendiculaire à k_z [23].

2-8 Les densités effectives des états

Les densités d'états énergétiques, c'est-à-dire densité d'électrons au minimum de la bande de conduction et de trous au maximum de la bande de valence sont données par les équations suivantes :

$$N_c(T) = 2 \left(\frac{2\pi m_e^* kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} = 2,50945 \times 10^{19} \left(\frac{m_e^*}{m_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{T}{300} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (\text{II-9})$$

$$N_v(T) = 2 \left(\frac{2\pi m_t^* kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} = 2,50945 \times 10^{19} \left(\frac{m_t^*}{m_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{T}{300} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (\text{II-10})$$

Ces densités d'états énergétiques correspondent au nombre total de places disponibles dans chacune des bandes par unité de volume et par niveau d'énergie. On peut remarquer que les densités d'états électroniques dans les bandes ne dépendent que de la température et de la masse effective des porteurs électrons ou trous. En pratique, ces densités d'états ont un ordre de grandeur de 10^{19} cm^{-3} à 300K [21].

2-9 La mobilité

C'est l'un des paramètres essentiels qui caractérisent les semi-conducteurs en général, et c'est l'une des raisons du choix des nitrures d'éléments III car ces matériaux ont des mobilités très grandes par rapport à celle de silicium (Si), ou celle de l'arsenic de galium (GaAs).

ZHU Xue-Liang *et al*, démontrent par les mesures de l'effet Hall pour $In_{0.46}Ga_{0.54}N$ que la concentration de porteurs $3,86 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$, et que la mobilité est de $163 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ S}^{-1}$ [25], la même méthode utilisée par B. N. Pantha *et al*, montre que la mobilité des trous pour l'alliage ternaire dopé par Mg $p-In_{0.35}Ga_{0.65}N$ est à une valeur de $3 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ S}^{-1}$, pour une densité de dopage de $5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ [26].

La mobilité des électrons μ_e pour quelques alliages ternaires (III, III) V en fonction de x , (w) AlGaN, (w) InGaN et (w) AlInN est illustrée sur la figure II-8.

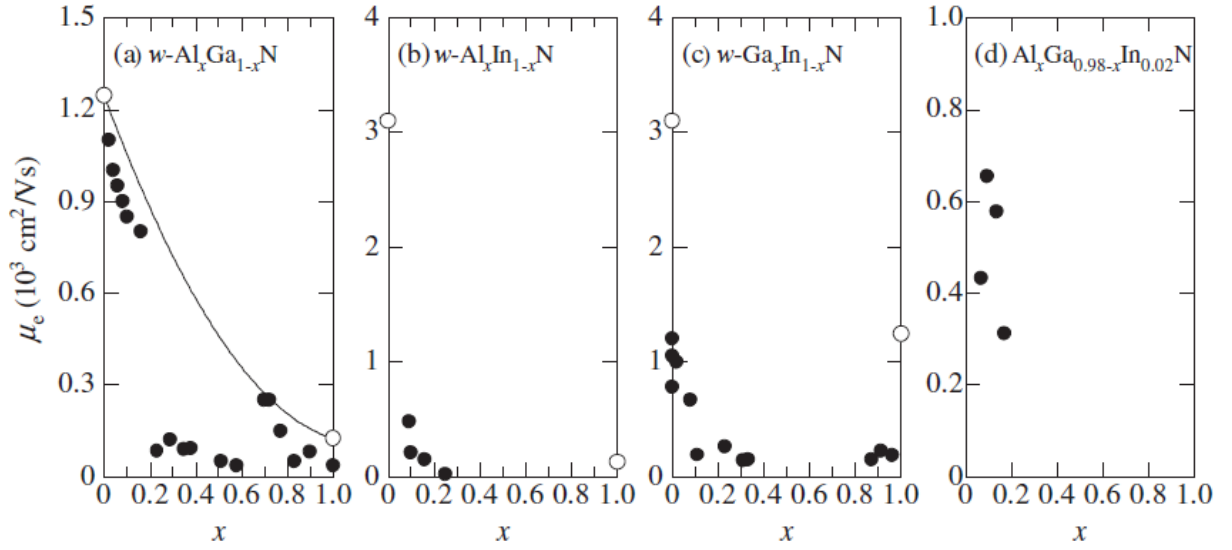


Figure II-8: Mobilité des électrons pour quelques alliages ternaires dans la phase hexagonale [22].

2-10 Coefficient d'absorption de l' $In_xGa_{1-x}N$

Parmi les propriétés les plus importantes des cellules solaires qui gouvernent leur fonctionnement, c'est le coefficient d'absorption α qui décrit l'absorptivité d'un matériau en fonction de son énergie de gap et l'énergie du photon incident comme montré dans l'équation [27]:

$$\alpha(h\nu) = A^* (h\nu - E_g)^{\frac{1}{2}} \tag{II-11}$$

Avec $h\nu$ l'énergie du photon incident [eV]

E_g le gap du matériau [eV]

A une constante indépendante de l'énergie du photon incident [cm^{-1}], [24].

Où
$$A^* \approx \frac{q^2 (2m_r^*)^3}{nch^2 m_n^*} \tag{II-12}$$

m_r^* : La masse réduite donnée en fonction de la masse effective de l'électron et celle de trou m_n^* et m_p^* respectivement par:

$$\frac{1}{m_r^*} = \frac{1}{m_n^*} + \frac{1}{m_p^*} \quad (\text{II-13})$$

n : Représente l'indice de réfraction

q : La charge élémentaire

h : Constante du Planck

c : vitesse de la lumière

La figure II-9 montre l'évolution du coefficient d'absorption α en fonction de l'énergie du photon $h\nu$ pour l'échantillon de 25 nm d'épaisseur en $In_{0,1}Ga_{0,9}N$ sur un substrat Lumilog [27].

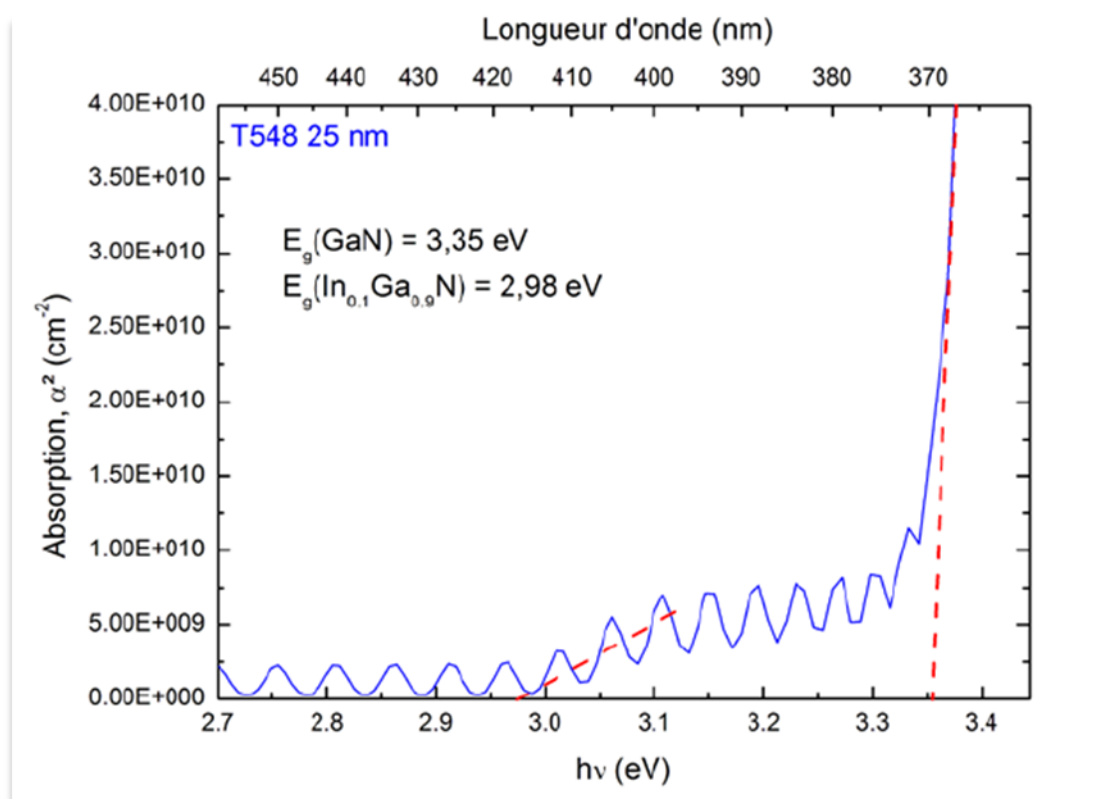


Figure II-9: Courbe d'absorption, α^2 , en fonction de l'énergie du photon $h\nu$.

La figure montre clairement que le coefficient d'absorption α^2 est de l'ordre de 10^5 cm^{-1} .

- **Lumilog**: est une entreprise spécialisée dans la fabrication de substrats de nitrure de gallium de haute qualité cristalline pour l'optoélectronique et l'électronique. Lumilog est une entreprise créée par trois fondateurs issus de la recherche publique (Laboratoire CRHEA-CNRS de Sophia Antipolis).

- **N.B** : pour plus d'information concernant le coefficient d'absorption voir Hadis MorkoSc Nitride Semiconductor Devices.

2-11 L'hétérojonction InGaN/GaN

Une hétérojonction est une jonction entre deux semiconducteurs dont le gap (la bande interdite) est différent. Soit le GaN ayant un gap d'énergie E_g^{GaN} et un semiconducteur InGaN qui a un gap d'énergie E_g^{InGaN} , on a alors une différence entre les deux gaps des matériaux qui est non nulle. On note :

$$\Delta E_g = E_g^{GaN} - E_g^{InGaN}. \quad (\text{II-14})$$

Cette différence de gaps se répartie alors en deux discontinuités : la discontinuité de bande de valence (ΔE_v) et la discontinuité de bande de conduction (ΔE_c) de sorte que :

$$\Delta E_v + \Delta E_c = \Delta E_g \quad (\text{II-15})$$

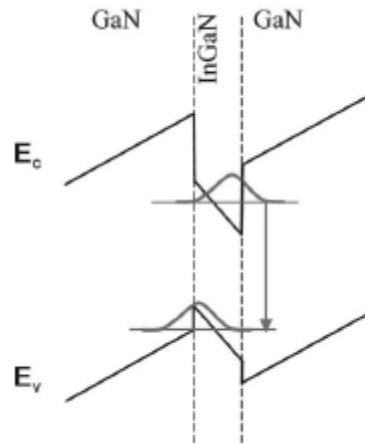


Figure II-10: Structure de bandes de l'hétérojonction InGaN/GaN

En raison de son importance considérable dans la réalisation des composants électroniques et optoélectroniques, l'hétérojonction InGaN/GaN a été énormément étudiée dans plusieurs revues, en particulier la discontinuité de la bande de conduction qui est $\Delta E_c = 0,09 \pm 0,07$ pour $x = 0,054$ et $\Delta E_c = 0,22 \pm 0,05$ pour $x = 0,09$, les mesures montrent que la densité de charges induite par la polarisation est de $(1,8 \pm 0,32) \times 10^{12} e/cm^2$ pour $x = 0,054$ et égale à $(4,38 \pm 0,36) \times 10^{12} e/cm^2$ pour $x = 0,09$ [28]. Chris G et *al* montrent aussi que ΔE_v reste inférieure à 0.1 eV à l'interface de l'hétérojonction GaN/In_{0.2}Ga_{0.8}N [29].

2-12 L'influence de la polarisation sur la structure de bandes d'énergies

En raison de l'anisotropie de la structure wurtzite et le couplage spin-orbite, la bande de valence s'éclate en trois sous-bandes énergétiques comme montré dans la figure II-11.

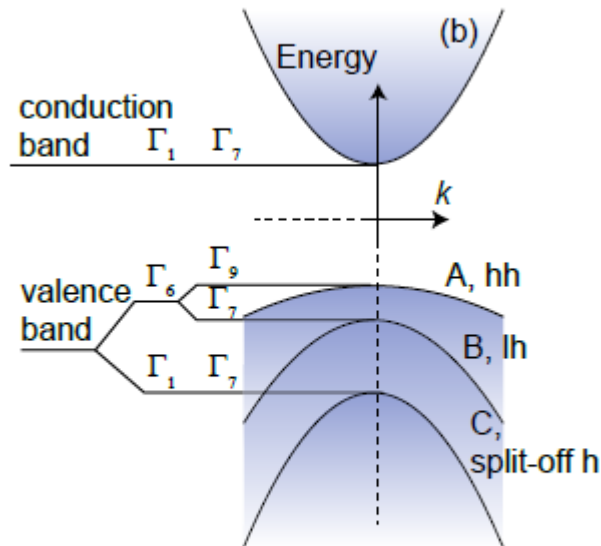


Figure II-11: structure de la bandes du GaN ($k = 0$) dégénérée, A (trous lourds (hh)), B (trous légers(lh)), et C (split-off hole).

L'effet du champ cristallin engendré par l'anisotropie de la structure provoque la division de bande de valence en deux bandes Γ_1 et Γ_6 , et si on prendrait en compte l'interaction spin-orbite, la sous-bande Γ_6 se divise en Γ_7 qui correspondre aux trous légers (LH : Light Hole) et Γ_9 celle des trous lourds (HH : Heavy Hole). Alors que la bande Γ_1 est ainsi affectée et se transforme en Γ_7 split-off (CH : Crystal field split-off Hole) [29, 30,31].

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons montré que les matériaux III-N ont des propriétés remarquables et très attractives pour la fabrication des composants optoélectroniques, on a vu aussi les différents substrats conventionnels pour la croissance des matériaux III-N. Une attention particulière a été faite à l'alliage ternaire InGaN choisi pour son application aux cellules solaires.

- [1] *M. Razeghi and M. Henini*, Optoelectronic devices III-Nitrides. 2004
- [2] *Bo-Ting Liou, Sheng-Horng Yen, Yen-Kuang Kuo*, Vegard's law deviation in band gaps and bowing parameters of the wurtzite III-nitride ternary alloys Taiwan. 2004
- [3] *J. W. Ager III, J. Wu, K. M. Yu, R. E. Jones, S. X. Li, W. Walukiewicz, E. E. Haller*. Group III-Nitride Alloys as Photovoltaic *Materials*. 2004
- [4] *Pierre Ruterana, Martin Albrecht, Jrg Neugebauer*, Nitride Semiconductors Handbook on Materials and Devices. 2006
- [5] *Hadis Morkoc*, Handbook of Nitride Semiconductors and Devices 2009.
- [6] *Rüdiger Quay*, Gallium Nitride Electronics 2008.
- [7] *T. Hanada* Basic Properties of ZnO, GaN, and Related Materials 2009.
- [8] *S.M. Sze and Kwok. Ng*, Physics of semiconductor devices third edition. Wiley 2007
- [9] *Zohra benzarti*, Qualification des Nitrures de Gallium pour les Dispositifs Optoélectroniques : Application aux Diodes Electroluminescentes bleues 2006.
- [10] *Nicolas Defrance*, caractérisation et modélisation de dispositifs de la filière nitrure pour la conception de circuit intègres de puissance hyperfréquence 2007.
- [11] *Zeggai Oussama*, Étude et caractérisation d'un microsysteme à base de matériau nitruré AlGaIn pour les applications biologique et biomédicale 2015.
- [12] *Yacine Marouf*, Modélisation des cellules solaires en InGaIn en utilisant Atlas Silvaco 2013.
- [13] *Bouaraba Fazia*. Etude d'une LED à base d'une InGaIn pour l'émission de lumière blanche. 2012
- [14] *R. R. Pelá, C. Caetano, M. Marques, L. G. Ferreira, J. Furthmüller et al*, Accurate band gaps of AlGaIn, InGaIn, and AlInN alloys calculations based on LDA-1/2 approach APPLIED PHYSICS LETTERS, 2011

[15] *Selmane Djamel*, Modélisation et optimisation des lasers à puits quantiques à base de nitrures et de matériaux II- VI utilisant des hétérostructures de l'ordre de l'Angstrom "

Présenté par : 2009

[16] *Hadis Morkoc*, Handbook of Nitride Semiconductors and Devices. 2009

[17] *Belarbi Abdelmalik*, Transistor DHFET à base d'InGaN:Simulation et optimisation de ses performances DC et RF par le logiciel Silvaco 2014

[18] *Janotti, A. and Van de Walle, C.G.* Applied Physics Letters. 2008.

[19] *Hageman, P.R., et al.* N-type doping of wurtzite GaN with germanium grown with Plasmaassistedmolecular beam epitaxy. Journal of Crystal Growth. 2004.

[20] *walukiewicz, W.* Intrinsic limitations to the doping of wide-gap semiconductors. Physica B. 2011, Vols. 302-303, 123-134.

[21] *Stephen J. Gummy R*, Gallium Nitride processing for electronics, sensors and spintronics. 2006

[22] *Hadis Morkoç*, Handbook of Nitride Semiconductors and Devices Vol. 3: GaN-based Optical and Electronic Devices 2009

[23] *Bachir - Dahmani Nadia* Etude des composés ternaires à base de nitrure, en utilisant la méthode de simulation de monte carlo. 2014

[24] *Hadis MorkoSc*, Nitride Semiconductor Devices Fundamentals and Applications 2013.

[25] *Zhu Xue-Lianget al*, Characteristics of High In-content InGaN Alloys Grown by MOCVD. CHIN. PHYS. LETT 2006.

[26] *B. N. Pantha*, Electrical and optical properties of p-type InGaN APPLIED PHYSICS LETTERS 95, 261904-2009.

[27] *Vanessa Gorge*, Caractérisations de matériaux et tests de composants des cellules solaires a base des nitrures des éléments III-V. 2012

[28] *H. Zhang*, Measurement of polarization charge and conduction-band offset at $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ heterojunction interfaces 2004.

[29] *Chris G*, Small valence-band offsets at GaN/InGaN heterojunctions 1997.

[30] *Julie Tourret*, Etude de l'épitaxie sélective de GaN/saphir et GaN/GaN-MOVPE par HVPE. Application à la croissance de structures périodiques de faible dimensionnalité 2012.

[31] *El gmiel Youssef*, Etude et caractérisations par cathodoluminescence de couches minces d'InGaN pour le photovoltaïque 2013

[32] *Marlene Glauser*, InGaN alloys and heterostructures: impact of localization effects on light-matter interaction in planar microcavities 2014.

3

La polarisation spontanée et piézoélectrique

Sommaire

3-1 Introduction.....	44
3-2 Les directions.....	44
3-3 Les plans.....	46
3-4 La polarité.....	47
3-5 Structure à une face polaire.....	49
3-6 Structure à une face non polaire	49
3-7 Structure à une face semi polaire.....	50
3-8 Polarisation Spontanée.....	51
3-8-1 L'origine de la polarisation spontanée.....	51
3-8-2 L'effet de la polarisation spontanée.....	51
3-8-3 La non-linéarité de la polarisation Spontanée.....	52
3-9 Polarisation piézoélectrique.....	53
3-9-1 La non-linéarité de la polarisation piézoélectrique.....	54
Conclusion.....	55

3-1 Introduction

Dans ce troisième chapitre, c'est l'effet de la polarisation qui a pris toutes nos attentions. En commençant premièrement par des notions fondamentales de la cristallographie concernant la phase hexagonale (les directions, les plans...), et en deuxième étape on a étudié la polarité des matériaux III-nitride et les différents plans fondamentaux qui déterminent la nature polaire des matériaux.

3-2 Les directions

La plupart des propriétés mécaniques, électriques et optoélectroniques dépendent de l'orientation cristallographique des matériaux, le choix de la direction devient très important, car la réponse d'un cristal à une force extérieure (compression ou dilatation, champ électrique, un flux optique etc...) dépend de la direction de la stimulation, pour ça qu'il très important de spécifier les directions des cristaux.

Les directions sont décrites d'une manière générale par $[uvw]$, où les trois indices u , v et w définissent les coordonnées d'une point dans un réseau, l'indice u représente la coordonnée selon l'axe a , v selon l'axe b et w selon l'axe c . Donc en utilisant ces trois indices, on peut déterminer la position de n'importe quel atome dans le réseau cristallographique par le vecteur $P(uvw)$ [1]:

$$P(uvw) = ua + vb + wc \quad (\text{III-1})$$

Où a , b et c sont les vecteurs élémentaires de la maille primitive et u , v et w sont des entiers comme indiqués dans la figure III-1 suivante :

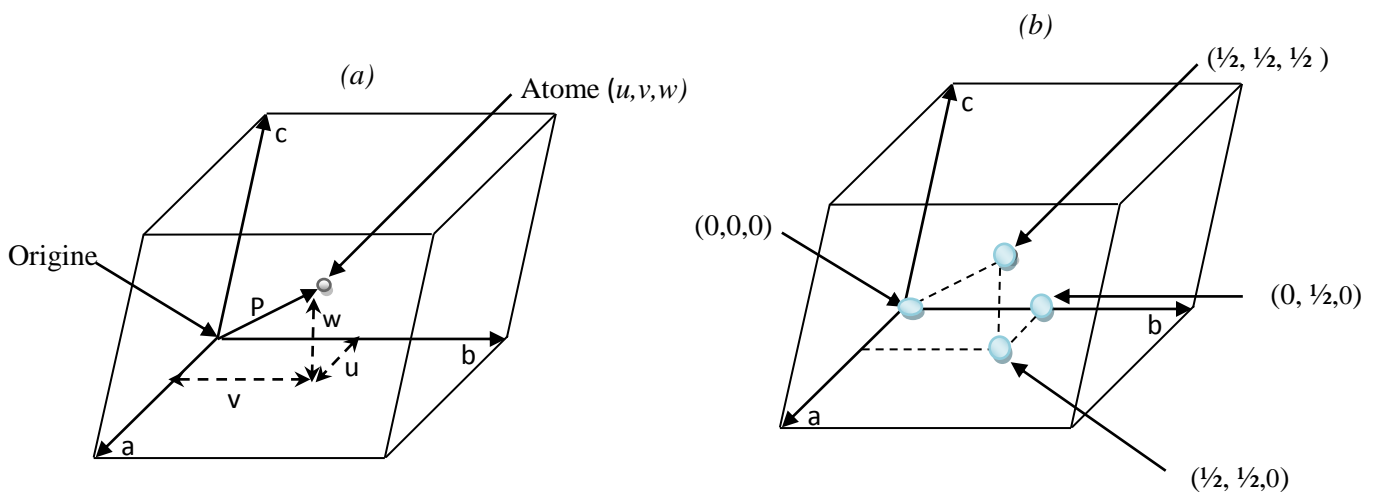


Figure III-1: (a) position d'un atome dans la maille primitive, (b) atomes dans les positions $(0,0,0)$, $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$, $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ et $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$.

Suivant les conventions internationales, une rangée $P = ua + vb + wc$ d'un réseau cristallin se note $[uvw]$. (Indices entre des crochets, sans virgules de séparation). Les indices négatifs sont surlignés $\bar{u}, \bar{v}, \bar{w}$ [1].

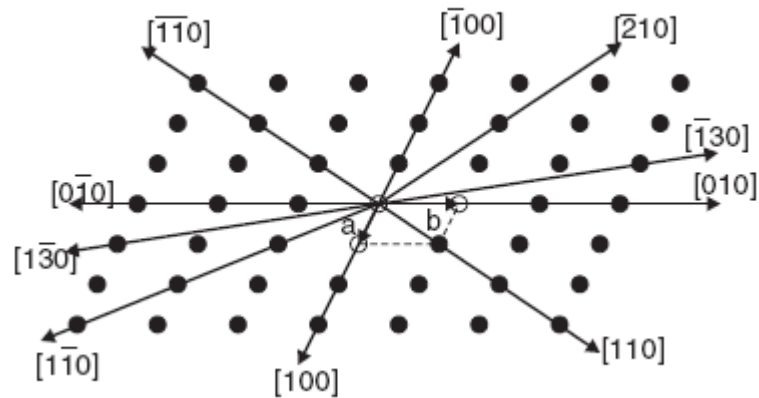


Figure III-2: conventions internationales des directions dans les cristaux

Les directions dans les cristaux qui ont une structure hexagonale sont souvent spécifiées en termes de quatre indices appelés indices de Weber, et pour passer du système à trois indices vers le système de quatre indices on utilise la règle suivante [1]:

$$[uvw] \rightarrow [UVTW]$$

$$U = n(2u - v)/3$$

$$V = n(2v - u)/3$$

(III-2)

$$T = -(U + V)$$

$$W = nw$$

Dans ces équations n est un facteur, on peut utiliser la règle pour transformer $[100]$ à $[2\bar{1}10]$. La figure III-3 illustre les directions fondamentales dans la structure hexagonale.

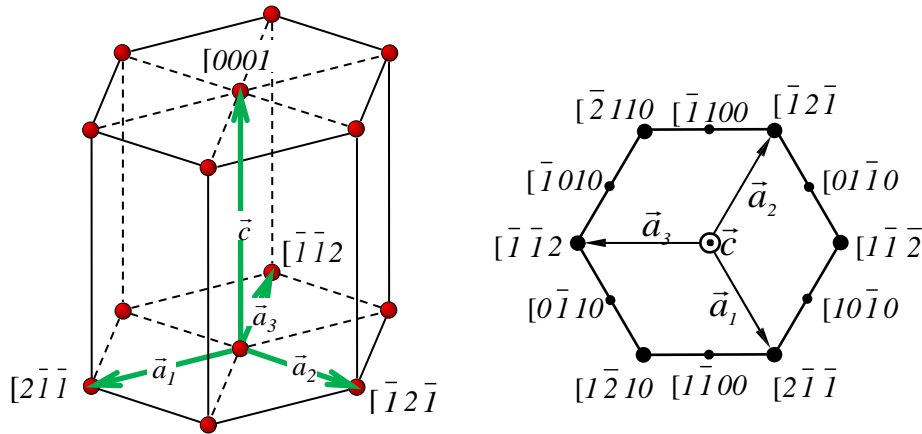


Figure III-3: Différentes orientations cristallographiques en symétrie hexagonale représentées par leurs indices [UVTW].

3-3 Les plans Cristallographiques

Les plans jouent un rôle très important dans la croissance des composants électroniques et optoélectroniques, pour les matériaux nitrurés d'élément III. Il y a quatre plans fondamentaux qui sont : le plan a , le plan c , le plan m et le plan r [2]. La figure III-4 montre les différents plans utilisés dans la structure cristallographique des matériaux III-N.

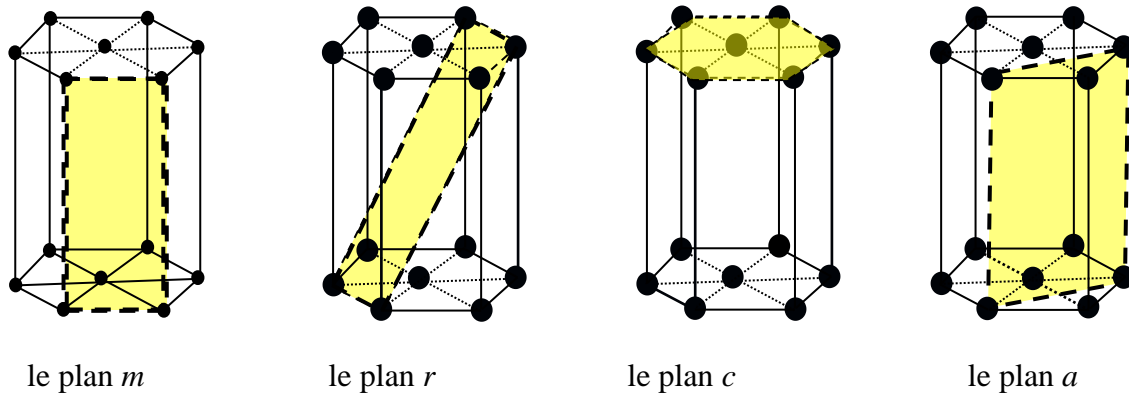


Figure III-4: représentations des différents plans pour les matériaux III-N en phase hexagonale.

3-4 La polarité

Un dipôle est formé par deux types de charges différentes, l'un est positif et l'autre est négatif, donc la présence de la polarité dans les matériaux III-N est due premièrement à la différence de l'électronégativité entre les deux types d'atomes qui forment les matériaux III-N (l'atome de gallium et l'atome de nitrure) et deuxièmement à l'absence d'un centre de symétrie, en conséquence les directions $[0001]$ et $[000\bar{1}]$ ne sont pas équivalentes [3]. Les atomes de gallium étant moins électronégatifs que ceux d'azote, respectivement 1,6 eV et 3 eV [3]. Les dipôles créés dans les structures hexagonales sont montrés dans la figure III-5.

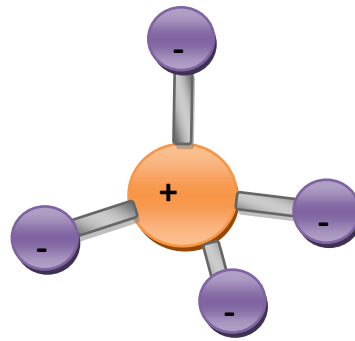


Figure III-5: la création d'un dipôle dans les matériaux III-N

Une polarité est de type Ga lorsque la liaison allant des atomes du gallium (cation) vers les atomes d'azote (anion) selon la direction $[0001]$ avec l'axe Z qui est la direction positive et en similaire si la liaison allant des atomes d'anion N vers les atomes de cation Ga, il s'agit de la polarité de type N à travers la direction $[000\bar{1}]$ avec l'axe Z qui représente la direction négative, comme montré dans la figure III-6.

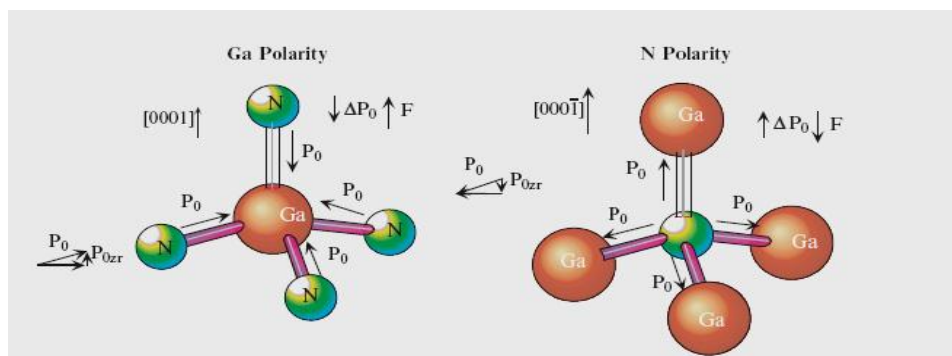


Figure III-6:représentation des différents types de polarité dans les matériaux III-N

Pour mieux comprendre : la polarité de type Ga veut dire que si quelqu'un veut couper un solide parfait à travers le plan c , il va trouver que la surface se termine par les atomes de gallium, les modèles de la polarité N et celui de Ga sont schématisés dans la figure III-7.

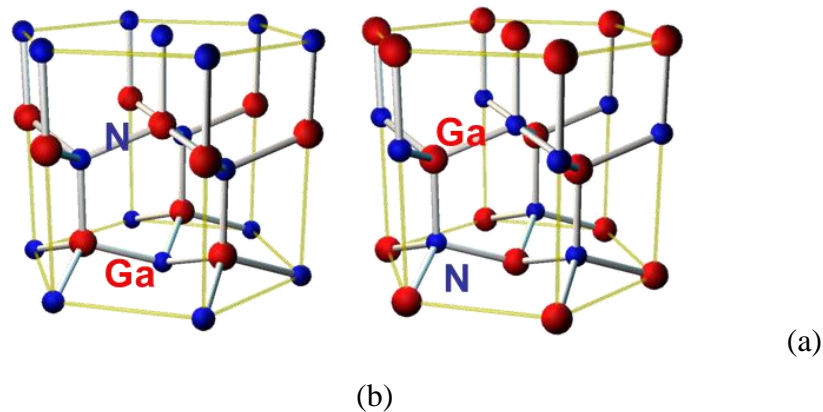


Figure III-7: représentation de la polarité d'une face N (a) et celle d'une face Ga (b) [4]

Donc c'est la direction qui détermine le type de polarité, ça nous permet de définir trois cas de structures cristallographiques suivant les plans mentionnés précédemment : une structure à une face polaire, une structure à une face non polaire et une structure à une face semi-polaire.

3-5 Structure à une face polaire

C'est le cas usuel durant la croissance de la plus part des composants électroniques ou optoélectroniques à base des matériaux nitrurés, on a le plan c qui nous donne des surfaces polaires pour les deux types (polarité de type Ga selon la direction $[0001]$ et polarité de type N à travers la direction $[000\bar{1}]$) (figure III-8).

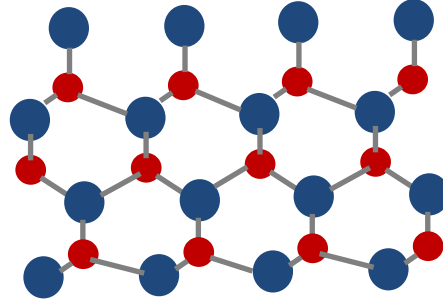
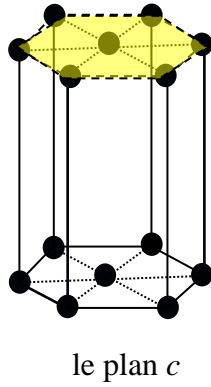


Figure III-8: représentation des plans polaires pour les matériaux III-nitrures hexagonal

On trouve que ce type de plan (le plan c) est largement utilisé pour la croissance des structures des composants optoélectroniques qui ont des régions actives, où la densité de charge doit être élevée comme les diodes électroluminescentes et les diodes lasers. Ce même plan est utilisé pour le transistor HEMT AlGaIn/GaN suivant la direction $[0001]$ avec une densité de charge plus de $1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ dans le canal [5].

3-6 Structure à une face non polaire

L'accroissement se fait suivant le plan a qui permet de trouver des structures non polaires, car les atomes colorés en rouge (figure III-9) sont en symétrie par rapport au plan a , ainsi l'utilisation du plan m a le même but. Ces deux plans perpendiculaires au plan c $[0001]$ sont les plus préférables car ils ne possèdent pas une polarisation spontanée.

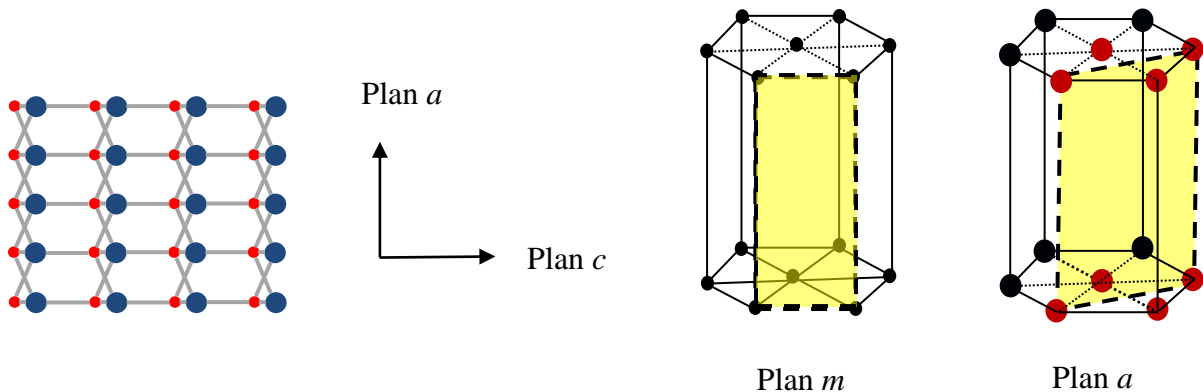


Figure III-9: représentation des plans non polaires pour les matériaux III-nitrures hexagonal

La première couche de GaN a été obtenue par croissance suivant le plan a par Sano and Aoki en 1976 par la méthode HVPE [6], et le premier AlN a été obtenu en 1983 par Yoshida et al par la méthode MBE [7]. L'année 2002 marque la réalisation de la première couche de GaN suivant le plan a sur un substrat de saphir épitaxie suivant le plan r [8]. Cette année marque aussi la réalisation de la première structure à multi-puits quantique (MQWs) de GaN/AlGaN [34] et de GaN/AlN [9] au niveau des laboratoires de Bell sur des substrats de saphir suivant le plan r . Et comme application, et en 2003 a été réalisé la première diode électroluminescente à multi-puits quantique à base la structure GaN/InGaN sur un substrat de saphir [10].

Après le succès connu pour la croissance des couches de GaN selon le plan non polaire a , la première couche de GaN suivant le deuxième plan non polaire m a été réalisée par la méthode HVPE sur un substrat de LiAlO₂ en 2005 [11], et dans la même année une couche m-GaN fortement dopée type P a été réalisée sur un substrat m-6H-SiC par la méthode MBE [12]. Pour ces couches, les résultats expérimentaux ont montré que la densité des dopants atteint la valeur $7.2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ qui est supérieure à la meilleur valeur réalisée pour les couches GaN épitaxies suivant le plan qui est égale à $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ [13].

3-7 Structure à une face semi polaire

Les structures semi-polaires sont réalisées par la croissance selon le plan r incliné par rapport au plan c [2], pour lesquelles on suppose qu'elles possèdent un champ électrique réduit (figure III-10). Notons que les premières couches semi-polaires de GaN épitaxies par la méthode MOVPE sur un substrat de MgAl₂O₂(100) ont été réalisées en 2005 [14]. Ce ci a permis durant la même année la réalisation de la première diode électroluminescente à multi-puits quantiques semi-polaire GaN/InGaN sur un substrat de MgAl₂O₄ [15].

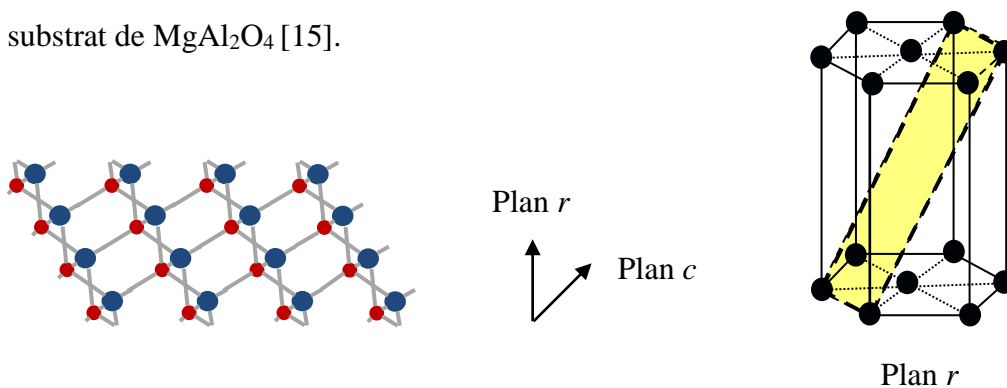


Figure III-10: représentation des plans semi-polaires pour les matériaux III-nitrurés hexagonal

3-8 Polarisation Spontanée

Les couches de nitrure en phase wurtzite peuvent présenter une polarisation macroscopique non nulle même avec l'absence de toute contrainte extérieure.

3-8-1 L'origine de la Polarisation Spontanée

Les matériaux III-N sont formés d'ions positifs et négatifs qui sont à leurs positions d'équilibre dans certain intervalle de température. Par conséquent, les barycentres liés aux cations Ga et ceux liés aux anions N qui ne coïncident pas. Ces deux facteurs mènent à la naissance d'une polarisation spontanée interne très élevée comme montrée par Bernardini et al [16].

Les valeurs de la polarisation spontanée pour les binaires GaN et InN sont tabulées dans le tableau III-1 [7].

	GaN	InN
$P_{SP} (\text{C m}^{-2})$	-0,0336	-0,0434

Tableau III-1: valeurs de la polarisation spontanée des binaires GaN et InN.

3-8-2 L'effet de la Polarisation Spontanée

La polarisation spontanée va séparer spatialement les électrons et les trous et crée ainsi une accumulation de charges aux extrémités de la couche perpendiculairement à l'axe c (interface substrat/couche épitaxie ou surface de la couche épitaxie) qui peut modifier les propriétés électriques du matériau.

3-8-3 La non-linéarité de la polarisation spontanée

L'évolution de la polarisation en fonction de la composition d'indium et de contrainte pour les ternaires III-N a été toujours un sujet de recherche intéressant. Bernardini et Fiorentini ont montré que la polarisation varie non-linéairement en terme de la fraction mole d'indium et de contrainte mécanique. D'après Bernardini et Fiorentini la non-linéarité de la polarisation spontanée est due principalement à la structure microscopique de l'alliage (la pression hydrostatique des composés binaires et les effets des contraintes internes à cause de l'alternation des liaisons) [17].

Pour les matériaux ternaires $In_xGa_{1-x}N$, la polarisation spontanée est donnée par une relation non-linéaire (figure III-11) en fonction de la concentration de l'indium et les

valeurs des constantes P_{SP} des deux binaires GaN et InN comme le montre l'équation suivante.

$$P_{SP}(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) = xP_{SP}(\text{InN}) + (1-x)P_{SP}(\text{GaN}) - xb(1-x) \quad (\text{III-3})$$

Avec b paramètre de courbure de la polarisation spontanée dans l'InGaN qui est égal à $0,037 \text{ C m}^{-2}$ comme rapporté par Bernardini et al et Fiorentini et al [17].

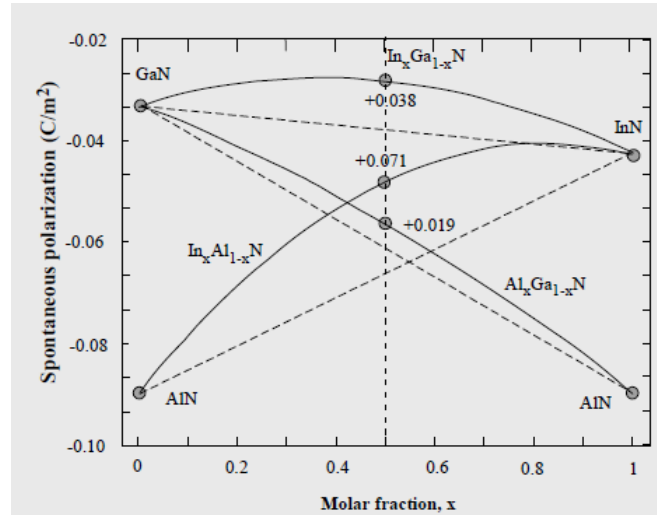


Figure III-11: Polarisation spontanée en fonction de la composition x , les lignes discrètes représentent l'interpolation linéaire (loi de Vegard) et les lignes continues c'est l'évolution non-linéaire (paramètre de courbure), les nombres vus dans la figure sont les paramètres de courbure exprimés en l'unité de C/m^2 [7].

3-10 Polarisation piézoélectrique

Dans un milieu polarisable, le vecteur du déplacement peut s'exprimer en fonction du vecteur de champ électrique et le vecteur de polarisation suivant la relation [19] :

$$\vec{D} = \epsilon \vec{E} + 4\pi \vec{P} \text{ dans le système d'unité cgs} \quad (\text{III-4})$$

et $\vec{D} = \epsilon \vec{E} + \vec{P}$ dans le système d'unité *msk*.

Etant donné que les matériaux III-N sont piézoélectriques, lorsqu'ils sont soumis à un champ de contrainte biaxiale, il apparait une polarisation macroscopique dite polarisation piézoélectrique P_{pz} . La polarisation piézoélectrique est reliée à la déformation via le tenseur de constante piézoélectrique d'ordre 3.

$$\vec{P}_{pz} = \vec{e} \vec{\epsilon} \quad (\text{III-5})$$

Où \vec{e} et $\vec{\varepsilon}$ sont les tenseurs piézoélectriques et contraintes respectivement, et dans le cas d'une déformation biaxiale, il vient [19]:

$$\begin{pmatrix} P_x^{pz} \\ P_y^{pz} \\ P_z^{pz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e_{24} & 0 & 0 \\ e_{31} & e_{31} & e_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ \varepsilon_{yx} \\ \varepsilon_{zx} \\ \varepsilon_{xz} \end{pmatrix} \quad (\text{III-6})$$

Où P_i^{pz} est la polarisation piézoélectrique dans la direction i , ε_{ij} est le tenseur des contraintes dans la couche et e_{ij} est le tenseur d'ordre 3 représentant les coefficients piézoélectriques propres au matériau. Pour la symétrie hexagonale : $e_{15} = e_{24}$

Si on considère la déformation biaxiale seulement : $\varepsilon_{yx} = \varepsilon_{zx} = \varepsilon_{xz} = 0$

$$\varepsilon_{xx}(\varepsilon_{11}) = \varepsilon_{yy}(\varepsilon_{22}) = \frac{a - a_0}{a_0} \quad (\text{III-7})$$

Où a est le paramètre de maille de la couche contrainte et a_0 celui du même matériau non contraint.

Et suivant la direction z , la déformation est donnée par : $\varepsilon_{zz} = \frac{c - c_0}{c_0}$

Si on néglige la contrainte de cisaillement on trouve $e_{15} = 0$

Dans ce cas la polarisation piézoélectrique devient :

$$P_{pz} = e_{31}\varepsilon_{xx} + e_{31}\varepsilon_{xx} + e_{33}\varepsilon_{zz} = 2e_{31}\varepsilon_{xx} + e_{33}\varepsilon_{zz} \quad (\text{III-8})$$

La polarisation piézoélectrique est donnée finalement par: $P_{pz} = \left(e_{31} - e_{33} \frac{C_{13}}{C_{33}} \right) \varepsilon_{\perp}$

C_{ij} sont les coefficients élastiques propres au matériau [19].

3-11 La non-linéarité de la polarisation piézoélectrique

La polarisation piézoélectrique présente une caractéristique fortement non-linéaire en fonction de la fraction molaire x (figure III-12). Pour le cas du $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$, le polynôme d'interpolation est [17] :

$$P_{\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}}^{\text{PZ}} = -0.148x + 0.0424x(1-x) \quad (\text{III-9})$$

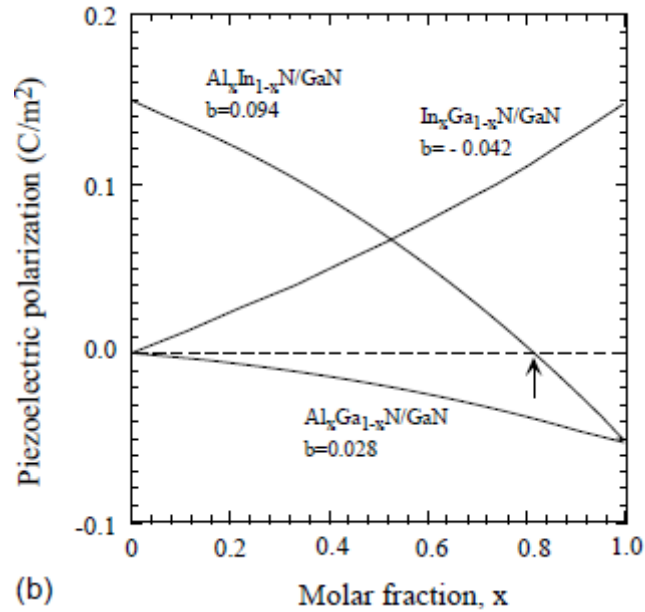


Figure III-12: Polarisation piézoélectrique en fonction de x , le paramètre de courbure

$b = 0.042$ pour l'hétérojonction InGaN/GaN [19].

La polarisation totale dans la couche de nitrure en phase hexagonale est la somme des deux types de polarisations : piézoélectrique et spontanée, elle s'écrit donc :

$$\vec{P} = \vec{P}^{sp} + \vec{P}^{pz} \quad (\text{III-10})$$

Conclusion

On peut conclure que l'orientation atomique joue un rôle très important dans la détermination de la nature polaire des matériaux III-N, ce qui nous permet de modéliser l'effet de la polarisation spontanée et celle piézoélectrique. Ces polarisations jouent un rôle essentiel dans le bon fonctionnement ainsi que l'amélioration des performances des cellules solaire à base des nitrures.

Bibliographie

- [1] *Richard J. D.* Crystals and Crystal Structures, University of Cardiff John Wiley & Sons 2006
- [2] *Tanya Paskova.* Nitrides with Nonpolar Surfaces Growth, Properties, and Devices WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim 2008
- [3] *Hadis Morkoç,* Handbook of Nitride Semiconductors and Devices Vol. 1: Materials Properties, Physics and Growth 2008
- [4] http://www.matsuoka-lab.imr.tohoku.ac.jp/?TOPPAGE%2FRESEARCH_ENG
- [5] *Pierre Ruterana, Martin Albrecht, J g Neugebauer* Nitride Semiconductors Handbook on Materials and Devices
- [6] *Sano, M. and Aoki, M,* Japanese Journal of Applied Physics. 1976
- [7] *Yoshida, S., Misawa, S., and Gonda, S.* Applied Physics. 1983
- [8] *Craven, M.D., Lim, S.H., Wu, F.et al.* Applied Physics. 2002
- [9] *Ng, H.M., Bell, A., Ponce, F.A., and Chu, S.N.G.* Applied Physics. 2003
- [10] *Chen, C.Q., Adivarahan, V., Yang, J.W.et al.* Japanese Journal of Applied Physics. 2003
- [11] *Haskell, B.A., Baker, T.J., McLaurin, M.B. et al.* Journal of Electronic Materials 2005
- [12] *Armitage, R., Yang, Q., and Weber, E.R.* MRS Internet Journal of Nitride Semiconductor Research. 2003
- [13] *McLaurin, M., Mates, T.E., and Speck, J.S.* Applied Physics. 2005
- [14] *Kaeding, J.F., Iza, M., Sato, H. et al.* Japanese Journal of Applied Physics. 2006
- [15] *Chakraborty, A., Baker, T.J., Haskell, B.A.et al.* Japanese Journal of Applied Physics. 2005

- [16] *Laurent Nevou*, EMISSION et MODULATION INTERSOUSBANDE dans les NANOSTRUCTURES de NITRURES 2008
- [17] *F. Bernardini and V. Fiorentini*. Nonlinear Behavior of Spontaneous and Piezoelectric Polarization in III-V Nitride Alloys. *Physica status solidi (a)*, 190(1):65–73, 2002.
- [18] *Vincenzo Fiorentini, Fabio Bernardino, and Oliver Ambacher*. Evidence for nonlinear macroscopic polarization in iii–v nitride alloy heterostructures. *Applied Physics Letters*, 80(7) :1204–1206, 2002.
- [19] *Hadis MorkoSc*, Nitride Semiconductor Devices Fundamentals and Applications 2013.

4

Simulation et discussion des résultats

Sommaire

4-1 Introduction.....	60
4-2 Pourquoi la simulation.....	60
4-3 Généralités sur le logiciel de simulation 1D-DDCC	62
4-4 Simulation et discussion des résultats.....	67
4-5 Discussion des résultats.....	71
4-5-1 Influence de la polarisation sur la structure de bande.....	71
4-5-2 Influence de la polarisation sur les porteurs.....	72
4-5-3 Influence de la polarisation sur la fonction d'onde.....	74
4-5-4 Influence de la polarisation sur les caractéristiques J-V.....	74
Conclusion.....	76

4-1 Introduction

C'est dans ce dernier chapitre qu'on va appliquer les connaissances vues dans les chapitres précédents. Tout d'abord, on présentera le principe de la simulation numérique d'une manière générale et on parlera de l'outil de simulation 1D-DDCC d'une manière spéciale. Après on passe à la discussion des résultats trouvés au sein de ce travail en donnant les arguments nécessaires pour expliquer les différents résultats obtenus durant la simulation.

4-2 Pour quoi la simulation ?

Un modèle est une construction théorique créée pour représenter des processus réels et les paramètres d'influence. Les modèles sont largement utilisés dans la science pour simplifier des systèmes complexes en négligeant les paramètres qui ne sont pas importants. Un bon modèle veut dire que tous les paramètres importants sont tenus en compte.

La modélisation est largement utilisée dans l'analyse des cellules solaires monocristallines et poly-cristallines à cause de la nature complexe des couches minces, donc la modélisation numérique est nécessaire pour comprendre le comportement des composants soit électroniques ou bien optoélectroniques. De ce fait, les constructeurs et les chercheurs varient leurs méthodes de production pour améliorer les performances des composants, la modélisation numérique peut prédire l'impact du changement des propriétés des matériaux sur les performances des cellules solaires et l'influence des autres paramètres tels que la température, l'épaisseur de chaque couche de la cellule et les défauts [1].

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 majoritaires et minoritaires, deux équations de continuité ainsi que pour les majoritaires et les minoritaires et la loi de Poisson, le couplage de ces équations n'ont pas une solution analytique si et seulement si :

- Les conditions de l'état stationnaire sont satisfaites
- Le champ électrique est différent de zéro seulement dans la jonction (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 de dopages sont constantes dans les deux régions n et p [2].

La plupart des simulateurs peuvent prédire les caractéristiques électriques qui sont associées aux structures et les conditions spécifiques des composants. Dans la simulation, la structure d'un composant 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 tous les équations motionnées précédemment.

Il y a plusieurs raisons justifiées pour l'utilisation de la simulation, l'une des raisons est que la simulation d'un composant est plus rapide et économique que sa croissance et nous donne une idée initiale sur les performances de nouveaux composants ainsi que la compréhension de son comportement.

Plusieurs programmes ont été écrits afin de modéliser les cellules solaires, elles ont des différentes possibilités et limitations, mais le rôle principale est le même. Deux de ces programmes sont largement exploités dans la fabrication des cellules solaires, AMPS-1D (Analysis for Microelectronic and Photonic Structures), qui est développé par S. Fonash et collègues à l'université de Pennsylvanie [3] et SCAPS-1D (Solar Cell Capacitance Simulator en 1 Dimension) qui a été développé par M. Burgelman et collègues à l'université de Gent, Belgium [4]. L'un des avantages du SCAPS-1D par rapport à AMPS-1D est la possibilité de calculer les caractéristiques capacité-tension $C(V)$ et capacité-fréquence $C(F)$ [1]. Il offre aussi la possibilité d'étudier les états d'interfaces des structures considérées.

4-3 Généralités sur le logiciel de simulation 1D-DDCC

Le 1D-DDCC (the One Dimensional Poisson, Drift-Diffusion, and Schrodinger Solver simulator), est un outil de simulation créé et développée par Yuh-Renn Wu [5] pour simuler les propriétés optoélectroniques des composants basés sur les matériaux III-N, le 1D-DDCC est écrit sous MATLAB. L'utilisation du logiciel 1D-DDCC nécessite donc l'installation de MATLAB Compiler (figure IV-1).

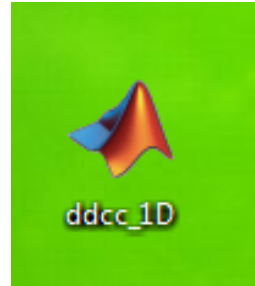


Figure IV-1: icone pour lancer le 1D-DDCC.

Dans les étapes suivantes nous expliquerons comment utiliser le 1D-DDCC. Lorsqu'on démarre le 1D-DDCC, une fenêtre va apparaître comme montrée dans la figure IV-2, la zone sélectionnée est réservée aux choix des paramètres des matériaux. Pour construire par exemple la structure de la cellule solaire InGaN/Si, on choisit l'icône dans le petit rectangle « Basic parameters » tel qu'il est montré dans la figure IV-3 [5].

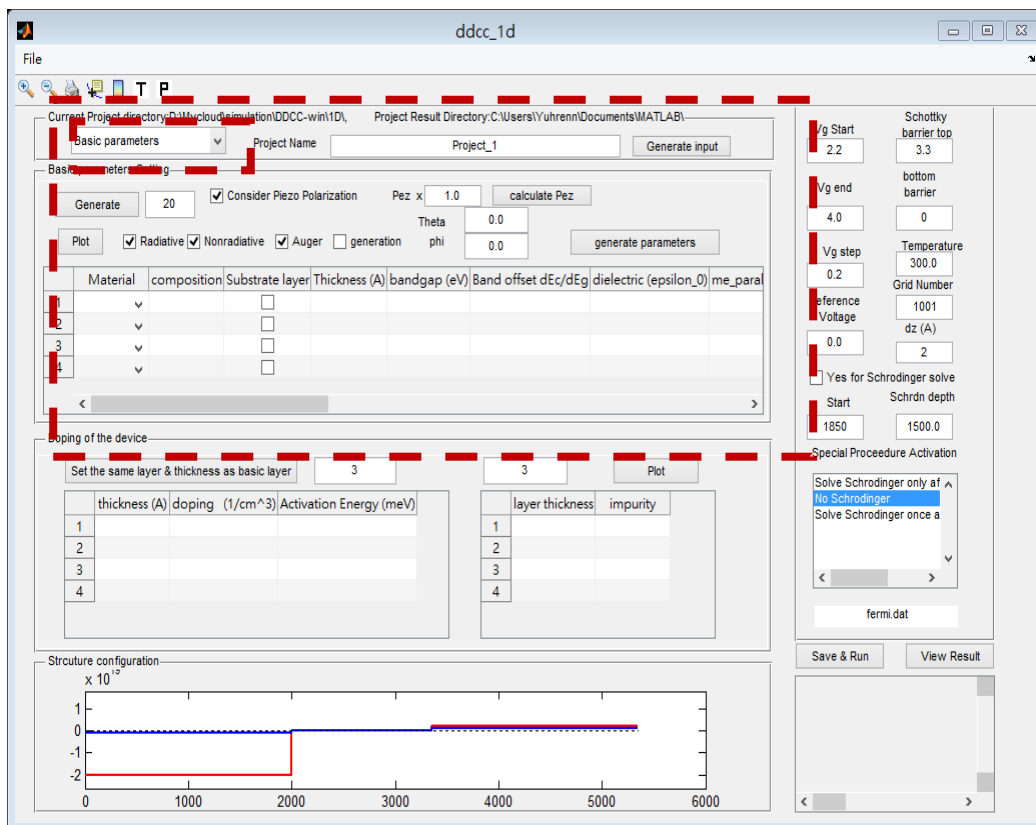
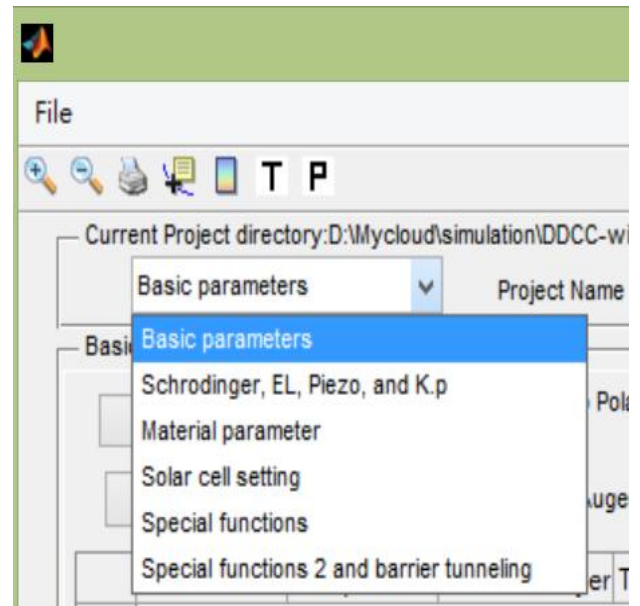


Figure IV-2: fenêtre fonctionnelle de 1D-DDCC.

Dans ce panneau on peut ouvrir

- 1- Les paramètres de base.
- 2- Schrödinger, EL, Piezo et Kp.
- 3- Paramètre des matériaux.
- 4- Paramètre de la cellule solaire.
- 5- Fonctions spéciales.
- 6- Fonctions spéciales 2 et l'effet tunnel.

Figure IV-3: paramètres de base [5]



La figure IV-4 explique les différentes étapes pour construire un dispositif optoélectronique en utilisant le 1D-DDCC [5].

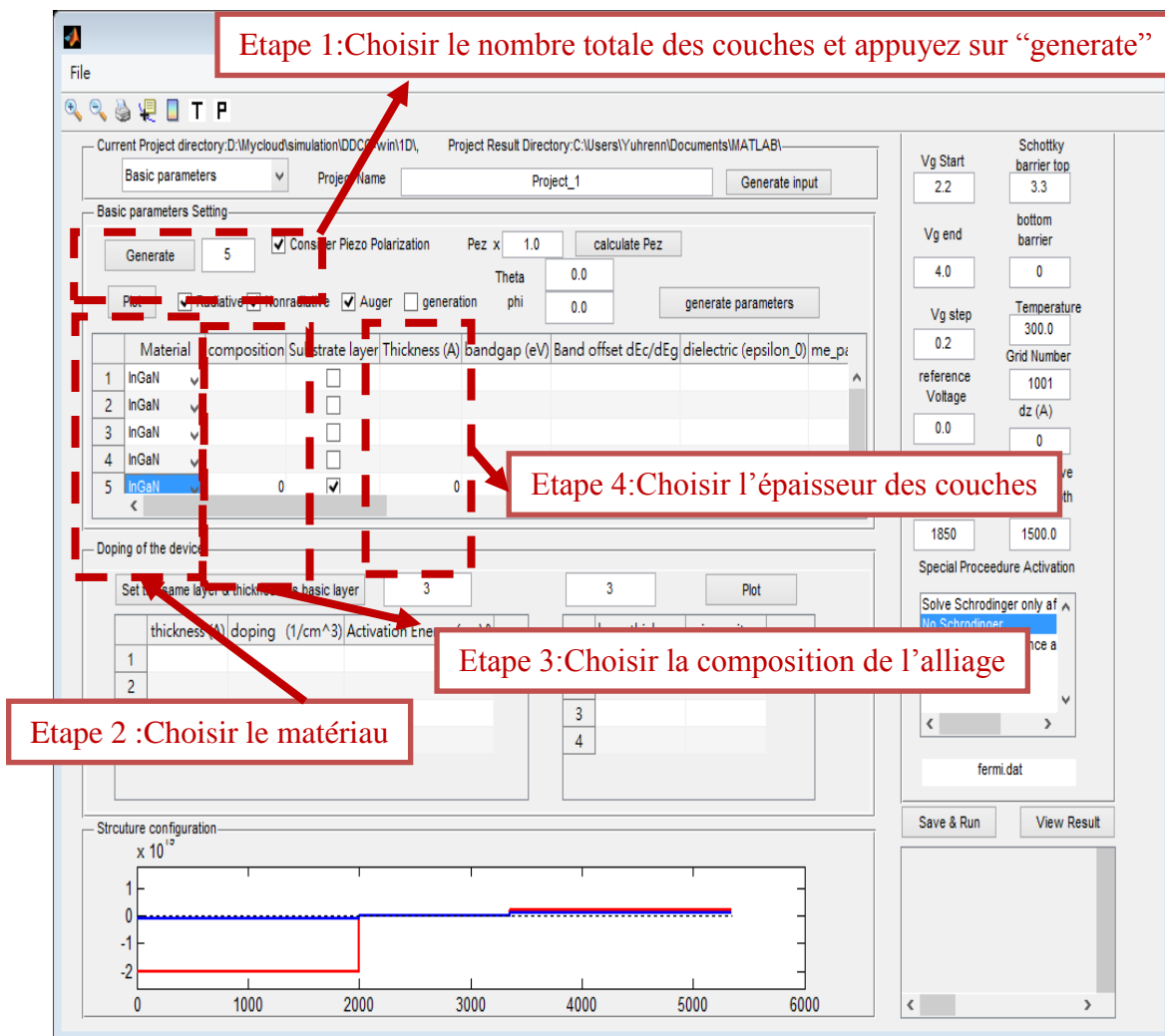


Figure IV-4: Introduire des paramètres de la structure choisie.

La polarisation piézoélectrique utilise les conditions théoriques idéales. Certaines seront une valeur inférieure en raison de la relaxation des contraintes, ainsi l'utilisateur peut utiliser le panneau dans la figure IV-5 pour ajuster la polarisation.

Theta est l'angle de rotation, $\theta = 0^\circ$ correspond au plan *c* et $\theta = 90^\circ$ correspond au plan non-polaire *m* [5].

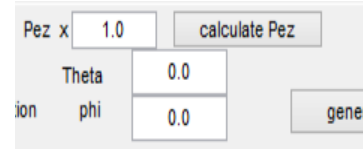


Figure IV-5: polarisation, theta et phi.

La sixième étape concerne les choix des types de dopage et les impuretés dans le panneau sélectionné dans la figure IV-6. Pour un dopage type *p*, la concentration choisie est $-2.10^{19} \text{ cm}^{-3}$ [5].

Etape 6: choisir le dopage et les impuretés

thickness (A)	doping (1/cm ³)	Activation Energy (meV)	layer thickness	impurity	
1	2000	-2.0000e+19	1	2000	0
2	30	0	2	30	1.0000e+17
3	150	0	3	150	1.0000e+17
4	30	0	4	30	1.0000e+17
5	3000	5.0000e+18	5	3000	0

Figure IV-6: Choix du type de dopage et les impuretés.

La septième étape consiste à nommer le projet comme indiqué dans la figure IV-7. Dans la huitième étape, on doit enregistrer notre projet puis l'exécuter en appuyant sur « Save and Run » [5].

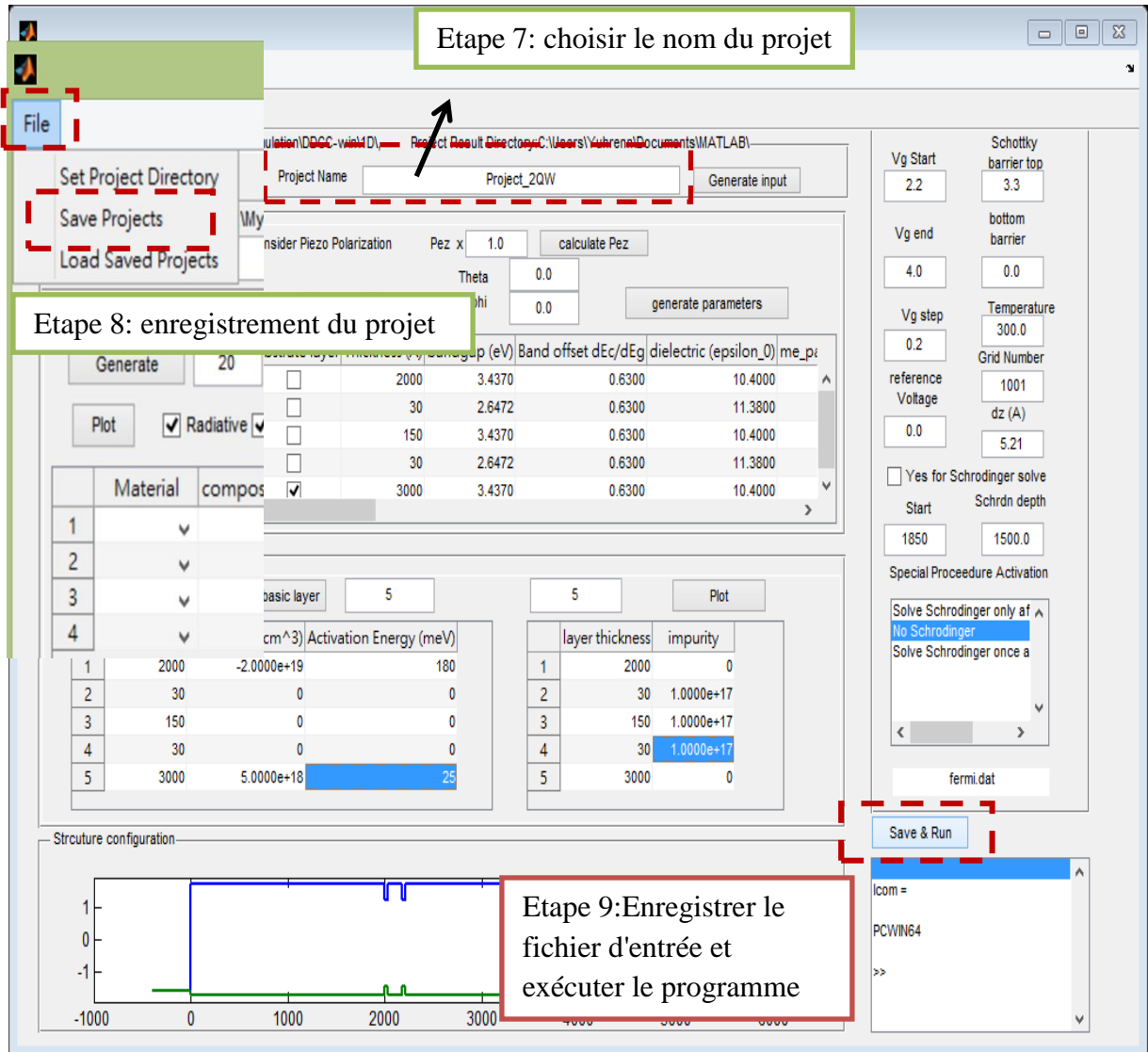


Figure IV-7 : L'enregistrement et l'exécution du programme

Suite à l'enregistrement et l'exécution du programme, deux fenêtres apparaissent (figure IV-8) [5].

- 1: un bloc-notes avec un fichier d'entrée
- 2: le cmd de Windows et ddcc.exe

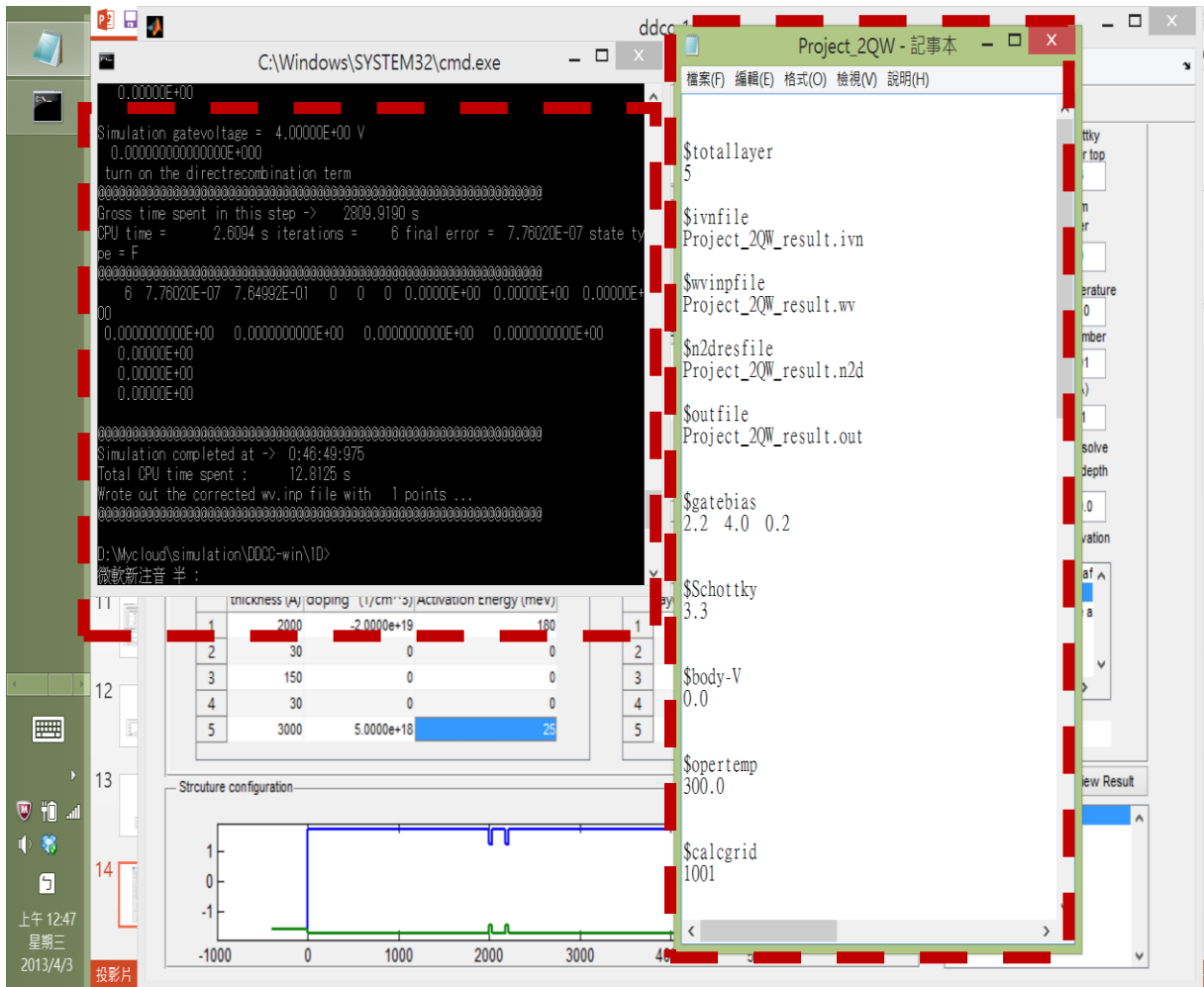


Figure IV-8: Les deux fenêtres qui apparaissent après l'exécution du programme.

4-4 Simulation et discussion des résultats

Il est bien connu que les matériaux semi-conducteurs III-nitride ont des propriétés uniques qui les rendent extrêmement attrayante pour l'optoélectronique, de haute puissance, et les applications à haute fréquence [6-8]. En raison de leur gap direct allant de 0,65 eV (InN) jusqu'à 6,2 eV (AlN) [9], en plus, ils possèdent une polarisation électrique spontanée et ont les plus grandes constantes piézoélectriques de semi-conducteurs [10-16]. A cause de leurs structures, un excès de charge et un champ électrique seront induits ; ce dernier peut être utilisé de manière constructive dans la conception de cellule solaire pour réduire la résistance ohmique afin de diminuer la recombinaison de surface. Pour les composés de semi-conducteur III-nitride, la phase stable est la phase wurtzite qui possède la symétrie hexagonale. Une telle symétrie va induire plusieurs effets sur cette classe de semi-

conducteurs. La structure hexagonale présente un axe de symétrie élevé ce qui implique que les composés III-V nitrure sont des cristaux anisotropes. Dans la structure wurtzite, puisque les barycentres des charges positives et négatives ne coïncident pas, une polarisation spontanée apparaît orientée selon l'axe polaire. D'autre part, lorsque le réseau cristallin est déformé, un grand effet piézoélectrique sera également ajouté en corrélation directe avec la variation de l'anisotropie cristalline.

Récemment, les cellules solaires à base des matériaux III-nitrure deviennent bien connues et intéressantes. Cet intérêt provient de la propriété unique que les III-nitrides possèdent une forte polarisation dans la phase wurtzite ; celui-ci présente deux composés, qui sont : la polarisation spontanée P_{SP} et polarisation piézoélectrique P_{PZ} . La première est intrinsèque et se produit spontanément en raison de la différence de l'électronégativité des atomes de l'anion (N) et de cations (Ga / In / Al), et en raison de la non-centrosymétrie à l'intérieur de la structure de wurtzite, de l'autre côté, la deuxième composés est causée par des contraintes [17,18]. Celle ci est d'environ 70 fois plus grande dans les nitrides comparée à d'autres semi-conducteurs [19]. Pour cela, le rendement de la cellule solaire ne dépend plus seulement du type matériau, mais aussi lié fortement à la direction de croissance et l'orientation atomiques ; ce qui permet de définir trois types de matériaux III-N en fonction de leur polarité : Les matériaux polaires, les matériaux non-polaires et les matériaux semi-polaires. Par ailleurs, une analyse théorique suggère que l'incorporation d'In dans la barrière et / ou de couches de canal peut augmenter considérablement la charge de polarisation à l'interface de l'hétérojonction [20].

L'objectif principal de ce chapitre est de faire une simulation numérique pour étudier l'effet de la présence de la polarisation le long du plan polaire c et l'absence de la polarisation le long du plan non-polaire m dans les cellules solaires InGaN/Si.

Dans cette thèse, nous avons analysé les effets de la polarisation spontanée et piézoélectrique sur les propriétés physiques et électriques de la cellule solaire InGaN/Si, en utilisant DDCC_1D simulateur [5], créé et développé par Yuh-Renn Wu pour simuler les propriétés optoélectroniques des dispositifs à base des matériaux III-N. Les différentes couches de la cellule considérée dans le cadre de ce travail sont : p-GaN/n-In_{0.12}Ga_{0.88}N/n-In_{0.5}Ga_{0.5}N/p-Si/n-Si. Cette cellule a été étudiée par GF Brown et *al* pour améliorer le

rendement d'une cellule à base InGaN [21]. La figure IV-9 représente les caractéristiques physiques et géométriques de la structure considérée.

Au sein de ce travail, nous avons examiné les effets de la polarisation piézoélectrique et spontanée sur les propriétés de cellules solaires via la simulation des structures de bande, la fonction d'onde des électrons et les caractéristiques $J(V)$, pour des structures polaire et non-polaire de la cellules InGaN/Si.

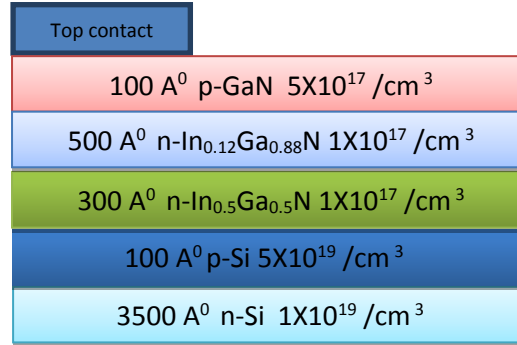


Figure IV-9: structure de la cellule solaire GaN/InGaN/GaN/Si

Au cours de cette simulation, nous avons inclus les plus importants paramètres physiques des matériaux III-N, tels que les paramètres de la bande de valence A_i (correspondant aux paramètres de Luttinger dans le système ZB où ils servent à décrire la masse effective de trou), le potentiel de déformation D_i , champ cristallin et les énergies de spin-orbite Δ_1 et $\Delta_{2,3}$, et les constantes élastiques c_{ij} comme indiqués dans le tableau IV-1. Tous ces paramètres sont liés à l'hamiltonien comme suit [22]:

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \mathbf{F} & 0 & -\mathbf{H}^* & 0 & \mathbf{K}^* & 0 \\ 0 & \mathbf{G} & \Delta & -\mathbf{H}^* & 0 & \mathbf{K}^* \\ -\mathbf{H} & \Delta & \lambda & 0 & \mathbf{I}^* & 0 \\ 0 & -\mathbf{H} & 0 & \lambda & \Delta & \mathbf{I}^* \\ \mathbf{K} & 0 & \mathbf{I} & \Delta & \mathbf{G} & 0 \\ 0 & \mathbf{K} & 0 & \mathbf{I} & 0 & \mathbf{F} \end{pmatrix} \quad (\text{VI-1})$$

Où F, G, I, D, H, I et K sont définis comme suite:

$$F = \Delta_1 + \Delta_2 + \lambda + \theta$$

$$G = \Delta_1 - \Delta_2 + \lambda + \theta$$

$$\lambda = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[A_1 k_z^2 + A_2 (k_x^2 + k_y^2) \right] + D_1 \varepsilon_{zz} + D_2 (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy})$$

$$\theta = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[A_3 k_z^2 + A_4 (k_x^2 + k_y^2) \right] + D_3 \varepsilon_{zz} + D_4 (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}) \quad (\text{VI-2})$$

$$K = \frac{\hbar^2}{2m_0} A_5 (k_x + ik_y)^2 + D_5 (\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy} + 2i\varepsilon_{xy})$$

$$H = \frac{\hbar^2}{2m_0} i \left[A_6 k_z (k_x + ik_y) + A_7 (k_x + ik_y) \right] + iD_6 (\varepsilon_{xz} + i\varepsilon_{yz})$$

$$I = \frac{\hbar^2}{2m_0} i \left[A_6 k_z (k_x + ik_y) - A_7 (k_x + ik_y) \right] + iD_6 (\varepsilon_{xz} + i\varepsilon_{yz})$$

$$\Delta = \sqrt{2} \Delta_3$$

Les paramètres A_i de l'équation. (2) sont liés aux masses effectives parallèles m'' des trous comme suite [22]:

$$m_0 / m''_{hh} = -(A_1 + A_3);$$

$$m_0 / m''_{lh} = -(A_1 + A_3); \quad (\text{VI-3})$$

$$m_0 / m''_{so} = -A_1.$$

Où m'' est suivant la direction k_z ($k_x = k_y = 0$).

Pour les masses effectives des trous perpendiculaires m^\perp , elles peuvent s'exprimer en termes des paramètres Luttinger A_i comme montrées dans l'équation (4).

$$m_0 / m^\perp_{hh} = -(A_2 + A_4 - A_5),$$

$$m_0 / m^\perp_{lh} = -(A_2 + A_4 - A_5) - 2A_7^2 / |\Delta_1|, \quad (\text{VI-4})$$

$$m_0 / m^\perp_{so} = -A_2 + 2A_7^2 / |\Delta_1|.$$

m^\perp Représente la masse dans le plan ($k_x; k_y$), ce qui veut dire $k_z = 0$.

Paramètres	InN	GaN
Constant de réseau		
a (Å)	3,54	3,189
c (Å)	5,705	5,185
Paramètres d'énergie		
E_g (eV)	0,608	3,437
Δ_1 (eV)	0,041	0,022
$\Delta_2 = \Delta_3$ (eV)	0,00033	0,005
Paramètres de Luttinger		
A_1	-8,21	-0,91
A_2	-0,68	5,65
A_3	7,57	-2,83
A_4	-5,23	-3,13
A_5	-5,11	-4,86
A_6	-5,96	0
A_7	0	-1,70
Potentiel de déformation (eV)		
D_1	2,2	6,3
D_2	3,2	8,0
D_3	0,1	-4,0
D_4	-0,05	-4,0
D_5	-3,5	-5,5
D_6	-8,8	
Constante élastique (10^{11} dyn/cm ²)		
C_{11}	22,3	36,7
C_{12}	11,5	13,5
C_{13}	9,2	10,3
C_{33}	20,0	40,5
C_{44}	4,80	9,50
C_{66}	7,40	12,3
Constante diélectrique		
ϵ_r	15,3	10,0

Tableau IV-1: paramètres physiques utilisés dans ce travail pour InN et GaN [24].

4-5 Discussion des résultats

Les performances électroniques et optoélectroniques d'une cellule solaire basée sur des matériaux III-N sont fortement dépendantes de leur direction de croissance et de l'orientation atomique. Ainsi, nous avons concentré notre intérêt sur deux principaux plans différents (les plans c et m) pour expliquer comment la polarisation affecte les propriétés des cellules solaires InGaN/Si.

4-5-1 Influence de la polarisation sur la structure de bande

Tout d'abord, nous étudions les effets de polarisation sur la cellule : p-GaN/n-In_{0.12}Ga_{0.88}N/ n-In_{0.5}Ga_{0.5}N/p-Si/n-Si épitaxie suivant le plan polaire c (0001) par rapport à celui épitaxie suivant le plan non-polaire m ($\bar{1}\bar{1}00$) sous des conditions ambiante (illumination AM1.5G où $T = 300\text{K}$). Le diagramme de bandes correspondant de la structure étudiée est représenté sur la figure IV-10.

Il est évident que la présence de la polarisation spontanée et piézoélectrique dans les couches III-nitrurées a une influence considérable sur les bords de la bande de conduction et la bande de valence comme représentée schématiquement sur la figure IV-2, l'inclinaison dans les bords de la structure de bande de la cellule est due aux champs électriques qui sont de l'ordre de méga-volt par cm [24, 25]. Cependant, nous ne voyons aucun changement dans la structure de bande de silicium Si parce qu'il ne contient aucune polarisation en raison du haut degré de symétrie dans sa structure diamant.

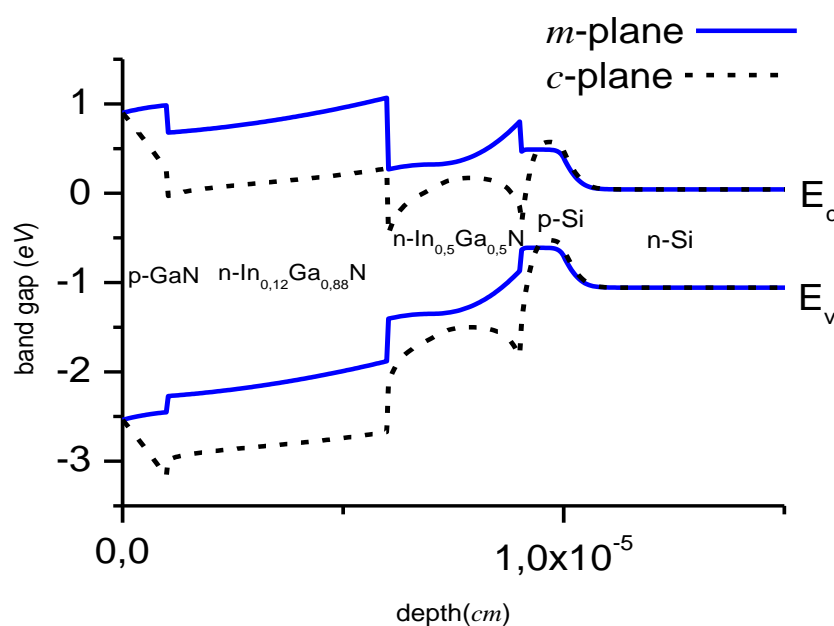
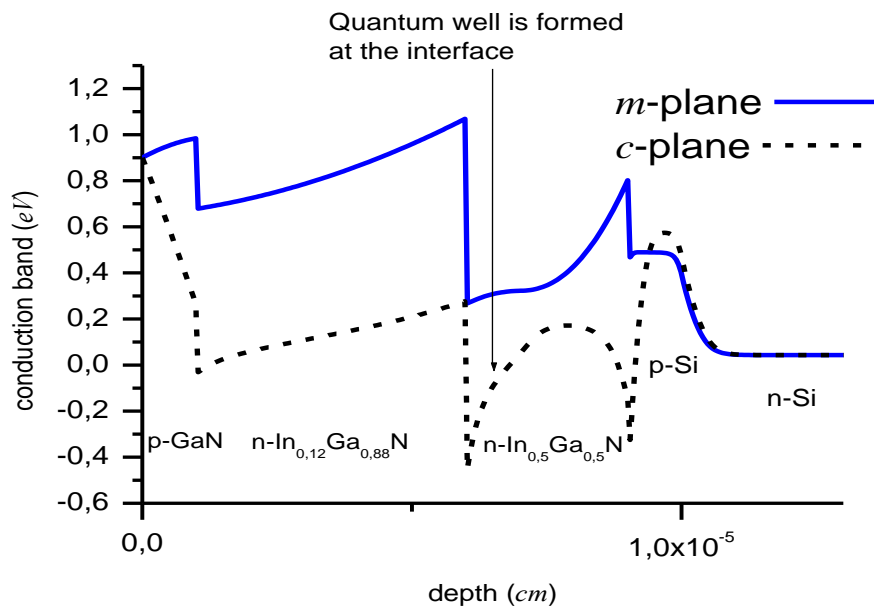


Figure IV- 10: diagramme de bande d'énergie avec polarisation (ligne discrète) et sans polarisation (ligne continue).

Les modifications des bords de bande causées par les champs de polarisation peuvent avoir une influence négative. Ainsi, nous avons illustré le profil de la bande de conduction dans la figure IV-11 pour les cellules solaires suivant les plans c et m . L'amplitude des discontinuités de la bande de conduction (ΔE_c) créée par les charges de polarisation à l'interface est très élevée et, par conséquent, un puits quantique triangulaire est formé à l'interface $n\text{-In}_{0,12}\text{Ga}_{0,88}\text{N}/n\text{-In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{N}$. La profondeur de ce puits quantique est presque 0,6 eV, ce qui est beaucoup plus grande que l'énergie d'excitation thermique à température ambiante. Par conséquent, il peut donc servir comme un piège ; conduisant à diminuer le courant de court-circuit. D'autre part, ce puits quantique induit par la polarisation entraîne des taux de recombinaison élevé menant à une baisse de durée de vie des porteurs minoritaires [26,27].



FigureIV-11: Profil de la bande de conduction avec une polarisation (ligne discrète) et sans polarisation (ligne continue) .

4-5-2 Influence de la polarisation sur les porteurs

Le but de cette section est de souligner que les champs induits par la polarisation modifient non seulement la structure électronique, mais aussi la distribution de porteurs libres (cas des électrons dans la bande de conduction). Le profil de la bande de conduction et la densité des électrons sont présentés dans la figure IV-12. Comme nous l'avons vu précédemment, les effets induits par la polarisation spontanée et piézoélectriques peuvent

exercer une influence importante sur la structure de bande. Ce champ de polarisation peut influencer de manière significative la répartition des porteurs libres dans la cellule solaire Si/InGaN et peut avoir une influence importante sur ses performances.

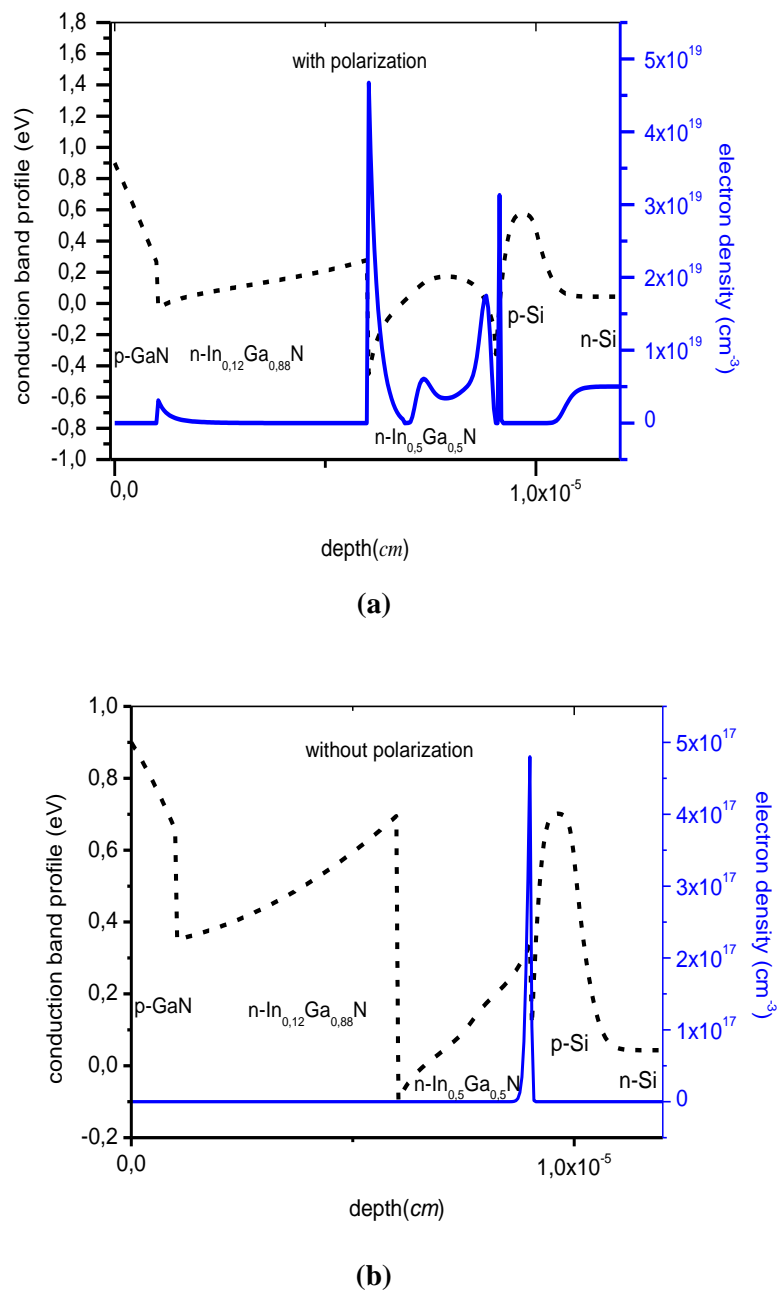


Figure IV-12: profil de la bande de conduction (ligne discrète) et densité des électrons (ligne continue).

Dans la figure IV-12 (b) (absence de polarisation dans le plan non-polaire m), la densité d'électrons est d'environ $4,8 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, et elle est principalement localisée à l'interface n-In_{0.5}Ga_{0.5}N/p-Si. Toutefois, dans le diagramme (a) où la polarisation est considérée, la

densité d'électrons dans la bande de conduction est $4 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ et poussée à l'interface n-In_{0,12}Ga_{0,88}N / n In_{0,5}Ga_{0,5}N. Cet excès de densité d'électrons est principalement dû à l'effet de la polarisation piézoélectrique et spontanée. Cette comparaison avec et sans la contribution des champs de polarisation montre l'importance de considérer les polarisations dans la modélisation des cellules base de III-N.

4-5-3 Influence de la polarisation sur la fonction d'onde

En outre, les charges fixes à l'interface induite par la polarisation provoquent des champs électriques importants (de l'ordre de MV cm^{-1}) qui sont les origines de l'effet quantique quantifié de Stark (QCSE) [23], cela conduit à la séparation de la fonction d'onde des électrons et des trous [29]. Ceci est confirmé par le résultat montré sur la figure IV-13.

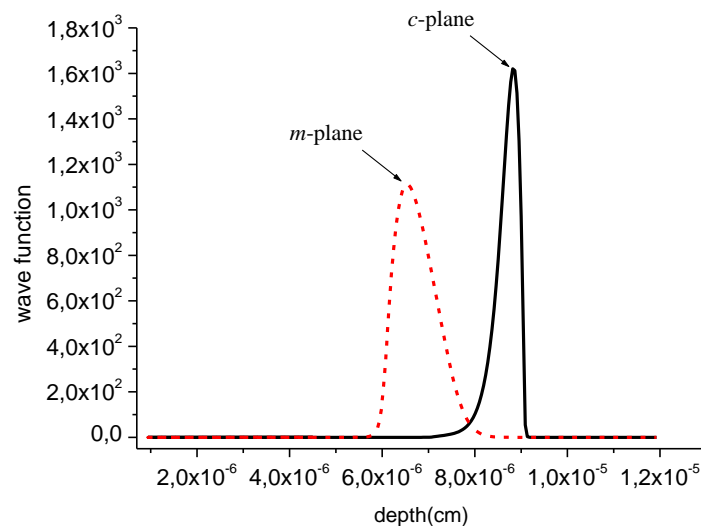
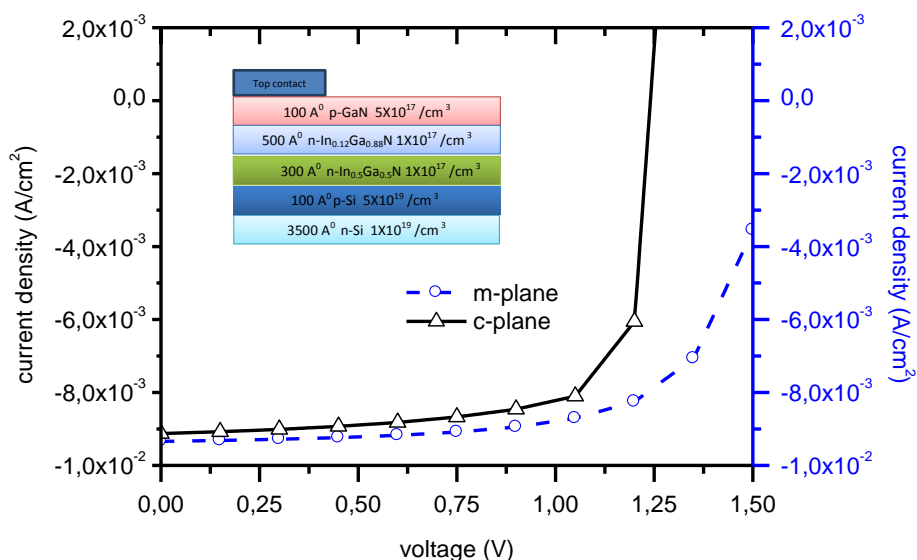


Figure IV-13: Fonction d'onde de l'électron en termes de la profondeur avec polarisation (ligne continue) et sans polarisation (ligne discrète).

4-5-4 Influence de la polarisation sur les caractéristiques J-V

Les effets de la polarisation sur les caractéristiques J-V sont intéressants. La figure IV-14 illustre clairement que la courbe de la densité de courant-tension (J-V) est fortement affectée par la présence de la polarisation spontanée et piézoélectrique. La cellule solaire suivant le plan *m* a des valeurs légèrement élevés de V_{oc} et J_{SC} comparés à celles de la cellule solaire suivant le plan *c*. Cela est essentiellement dû au puits quantique (qui joue le rôle d'un piège) créé par P_{SP} et P_{PZ} , qui à son tour empêche la collection des porteurs et ainsi réduit la densité de courant de court-circuit [30-31]. Nous pouvons affirmer à travers

ces résultats que l'augmentation de l'efficacité de la cellule solaire Si/InGaN est principalement due à l'augmentation de V_{oc} et J_{sc} ; nos résultats sont en bon accord avec d'autres travaux théoriques [32].



FigureIV-14: Caractéristique (J–V) de la cellule sans polarisation (cercle) et avec polarisation (triangle).

Le tableau IV-2. Regroupe les paramètres calculés de la cellule solaire avec et sans l’effet de polarisation, les valeurs de densité de courant de court-circuit (J_{sc}), tension en circuit ouvert (V_{oc}) et le rendement (η).

Cellules solaires	Cellule solaire suivant le plan <i>c</i>	Cellule solaire suivant le plan <i>m</i>
Paramètres		
$J_{sc}(mA/cm^2)$	9,12	9,33
$V_{oc}(V)$	1,05	1,23
FF (%)	85,84	86,17
Rendement (%)	8,22	9,88

Tableau IV-2: paramètres de la cellule solaire avec et sans l’effet de polarisation.

Conclusion

La simulation numérique est utilisée pour étudier l'influence de la polarisation sur les cellules solaires basée sur III-N épitaxie suivant le plan polaire c par rapport à celle épitaxie suivant le plan non-polaire m . Les calculs ont été effectués dans des conditions normales ($T = 300\text{K}$ et masse d'air égal à 1,5). Nos résultats démontrent que les cellules solaires suivant le plan non-polaire m , ont des paramètres remarquables par rapport à des cellules solaires suivant le plan polaire c . Pour cela, il est très important de prendre en compte l'effet de polarisation au cours de la croissance des cellules solaires à base de matériaux III-N, cette importance est démontrée par l'augmentation du rendement.

References

- [1] Macho Anani ,Christian Mathieu , Mohammed Khadraoui , Zouaoui Chama , Sara Lebid , YoucefAmar, High-grade efficiency III-nitrides semiconductor solar cell. 2009
- [2] Ana Kanevce, anticipated performance of cu(In,Ga)se₂ solar cells in the thin film limit. 2007.
- [3] <http://www.ampsmodeling.org/>
- [4] Scaps.elis.ugent.be
- [5] <http://yrwu-wk.ee.ntu.edu.tw/1D-DDCC.htm>.
- [6] R. Langer, J. Simon, V. Ortiz, N. T. Pelekanos, A. Barski, R. André, and M. Godlewski, Giant electric fields in unstrained GaN single quantum well,” Appl. Phys. 1999.
- [7] P. Lefebvre, A. Morel, M. Gallart, T. Taliercio, J. Allègre, B. Gil, H. Mathieu, B. Damilano, N. Grandjean, and J. Massies, High internal electric field in a graded-width InGa_N/Ga_N quantum well: Accurate determination by time-resolved photoluminescence spectroscopy, Appl. Phys. 2001.
- [8] J. C. Freeman, Basic equations for the modeling of Gallium Nitride (Ga_N) High Electron Mobility Transistors (HEMT),” NASA/TM – 2003.
- [9] RA Beach, TC McGill, Piezoelectric fields in nitride devices, Journal of Vacuum Science & Technology B, 1999.
- [10] R. D. King-Smith, D. Vanderbilt, Theory of polarization of crystalline solids,” Phys. Rev. B, 1993.
- [11] F. Bernardini, V. Fiorentini, D. Vanderbilt, Spontaneous polarization and piezoelectric constants of III-V nitrides, Phys. Rev. B 56, R10024 (1997).
- [12] V. Fiorentini and F. Bernardini, Spontaneous versus Piezoelectric Polarization in III-V Nitrides: Conceptual Aspects and Practical Consequences, Phys. Stat. Sol. B, 1999.

- [13] *H. Morkoç, R. Cingolani, and B. Gill*, Polarization effects in nitride semiconductors and device structures,” *Mat.* 1999.
- [14] *O. Ambacher, R. Dimitrov, M. Stutzmann, B. E. Foutz, M. J. Murphy, J. A. Smart, J. R. Shealy, N. G. Weimann, K. Chu, M. Chumbes, B. Green, A. J. Sierakowski, W. J. Schaff, L. F. Eastman*, Role of spontaneous and piezoelectric polarization induced effects in group-III nitride based heterostructures and devices,” *Phys. Stat. Sol. B*, 1999.
- [15] *O. Ambacher, J. Smart, J. R. Shealy, N. G. Weimann, K. Chu, M. Murphy, W. J. Schaff, L. F. Eastman, R. Dimitrov, L. Wittmer, M. Stutzmann, W. Rieger, and J. Hilsnbeck*, Two-dimensional electron gases induced by spontaneous and piezoelectric polarization charges in N- and Ga-face AlGa_N/Ga_N heterostructures,” *J. Appl. Phys.* 1999.
- [16] *O. Ambacher, B. Foutz, J. Smart, J.R. Shealy, N.G. Weimann, K. Chu, M. Murphy, A.J. Sierakowski, W.J. Schaff, L.F. Eastman, R. Dimitrov, A. Mitchell, M. Stutzmann, J.* Two-dimensional electron gases induced by spontaneous and piezoelectric polarization charges in N- and Ga-face AlGa_N/Ga_N heterostructures *Appl. Phys.* 2000.
- [17] *E.T. Yu, G.J. Sullivan, P.M. Asbeck, C.D. Wang, D. Qiao, S.S. Lau*, Measurement of piezoelectrically induced charge in Ga_N/AlGa_N heterostructure field-effect transistors *Appl. Phys. Lett.* 1997.
- [18] *A. Hangleiter, J.S. Im, H. Kollmer, S. Heppel, J. Off, F. Scholz*, *MRS Internet J.* The role of piezoelectric fields in Ga_N-based quantum wells, *Nitride Semicond*, 1998.
- [19] *Y. Burenkov, Y. Burdukov, M. Davidov, S. Yu., and S.P. Nikanorov*. Temperature dependences of the elastic constants of gallium arsenide. *Sov. Phys. Solid State*, 1976.

- [20] *E. T. Yu, X. Z. Dang, P. M. Asbeck, S. S. Lau and G. J. Sullivan*, Spontaneous and piezoelectric polarization effects in III–V nitride heterostructures, *J. Vac. Sci. Technol.* 1999.
- [21] *G.F. Brown, J.W. Ager III, W. Walukiewicz, J.W.*, Finite element simulations of compositionally graded InGaN solar cells. *solar Energy Materials & Solar Cells* 2010.
- [22] *Hadis Morkoc*, *Handbook of Nitride Semiconductors and Devices Vol. 1: Materials Properties, Physics and Growth*, Wiley-VCH, 2008.
- [23] *Vurgaftman, I. and Meyer, J.R.* Band parameters for nitrogen-containing semiconductors. *Journal of Applied Physics*, 2003.
- [24] *O.Jani, C.Honsberg, Y.Huang, J.O.Song, I.Ferguson, G.Namkoong, E.Trybus, A.Doolittle, S.Kurtz,Design, Growth, Fabrication and Characterization of High-BandGap InGaN/GaN Solar Cells*, Proc. of the IEEE 4th World Conference on Photovoltaic Energy Conversion, Waikoloa, Hawaii, May, 2006.
- [25] *O. Jani, I. Ferguson, C. Honsberg, and S. Kurtz*, Design and Characterization of GaN/InGaN Solar Cells,” *Applied Physics Letters*, 2007.
- [26] *Boer K W*, *Survey of Semiconductor Physics* (New York: Van Nostrand Reinhold) 1990.
- [27] *Im J S, Kollmer H, Off J, Sohmer A, Scholz F and Hangleiter A Mater. Res. Symp. Proc.* 1998.
- [28] *Deguchi, T., Sekiguchi, K., Nakamura, A. et al.* *Japanese Journal of Applied Physics*, 1999.
- [29] *Waltreit, P., Brandt, O., Trampert, A. et al. Nature*, Nitride semiconductors free of electrostatic fields for efficient white light-emitting diodes, 2000.
- [30] *Z.Q. Li, M. Lestradet, Y.G. Xiao, S. Li*, Effects of polarization charge on the photovoltaic properties of InGaN solar cells, *Phys. Status Solidi* 2011.

[31] *J.-Y. Chang, S.-H. Yen, Y.-A. Chang, Y.-K. Kuo*, Simulation of high-efficiency GaN/InGaN p-i-n solar cell with suppressed polarization and barrier effects, *IEEE J. Quantum Electron*, 2013.

[32] *ManojThosar, Manish Mathew*, *IOSR Journal of Electrical and Electronics Engineering IOSR-JEEE*, 2013.

Conclusion générale

La technologie des cellules solaires à base des matériaux III-N présente des performances remarquables grâce à leurs propriétés particulières telles que: le point de fusion élevé, la haute dureté, la haute conductivité thermique, une faible permittivité diélectrique et une énergie de gap très large qui couvrent tout le spectre de visible jusqu'au proche ultraviolet, et la caractéristique essentiel pour la réalisation des composantes optoélectroniques qui est la gap direct pour la phases wurtzite, de symétrie hexagonale.

Dans le cadre de ce travail, nous avons étudié l'influence de la polarisation spontanée et piézoélectrique sur le comportement des cellules solaires à base de l'InGaN selon les deux plans proposés polaire et non-polaire pour la cellule GaN/InGaN/GaN/Si.

Pour étudier l'influence de la polarisation spontanée et piézoélectrique sur les paramètres électriques tels que V_{OC} , J_{SC} , FF et le rendement total, nous avons utilisé un outil de simulation 1D-DDCC qui est utilisé pour simuler les composantes optoélectroniques basés sur les matériaux III-N. La première partie de simulation concerne les effets de la polarisation piézoélectrique et spontanée sur les structures de bande ainsi que les fonctions d'ondes des électrons et finalement les caractéristiques $J(V)$,

D'après les résultats de la simulation, nous avons remarqué que les cellules solaires suivant le plan non-polaire m , ont des paramètres remarquables par rapport aux cellules solaires suivant le plan polaire c . La différence apparait aussi au niveau du rendement qui est de l'ordre de 9,89 % pour la cellule suivant le plan non-polaire m et 8,22% pour la cellule suivant le plan polaire c d'une part, et d'autre part selon la densité de courant qui est égale à 9,33 (mA/cm^2) pour suivant le plan m et 9,12 (mA/cm^2) pour le plan c . De ce fait, on peut conclure que la croissance des cellules solaire basée sur les matériaux III-N est plus importante suivant le plan non-polaire m que celle pour le plan polaire c .

Finalement, les cellules solaires à base de nitrure de gallium d'indium, présentent des performances considérables montrées par leurs rendements, il y a plusieurs paramètres qui n'ont pas été tenus en compte au cours ce travail et qui peuvent faire

l'objet des travaux en perspectives, tels que l'influence des défauts physiques, le gaz des électrons en deux dimension, la résistance des contacts, l'influence de substrat ...etc.

Annexe I : Démonstration des équations du chapitre I

Les cellules solaires sont des semi-conducteurs qui exploitent l'effet photovoltaïque, c'est-à-dire transformer l'énergie solaire (photons) en une énergie électrique (paire électrons-trous).

L'équation de transport qui gouverne la concentration des porteurs est basée sur cinq équations différentielles qui sont : deux équations de courants des porteurs majoritaires et minoritaires, deux équations de continuité aussi pour les majoritaires et les minoritaires et la loi de Poisson, le couplage de ces équations n'ont pas une solution analytique si et seulement si :

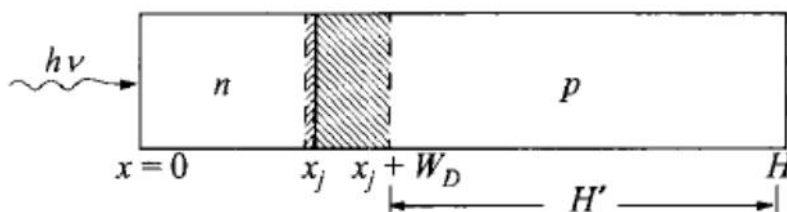
- Les conditions de l'état stationnaire sont satisfaites
- Le champ électrique est différent de zéro seulement dans la jonction (zone de charge d'espace)
- Il y a une faible injection : c'est-à-dire la concentration des porteurs minoritaires est plus petite par rapport à celle de majoritaires
- Les concentrations de dopages sont constantes dans les deux régions n et p
Donc l'équation différentielle peut s'écrire pour les porteurs minoritaires dans l'une des deux régions de la cellule solaire sous la forme :

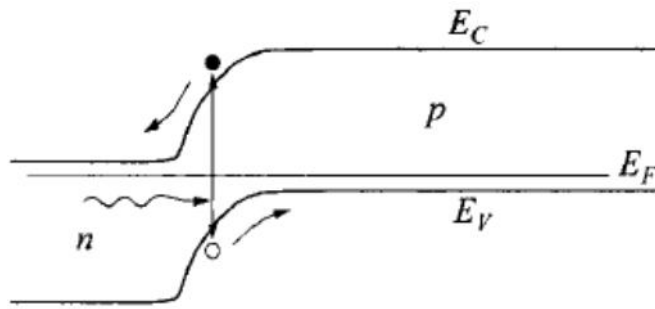
Pour les électrons dans la région P :

$$G_n - \left(\frac{n_p - n_{p0}}{\tau_n} \right) + \frac{1}{q} \frac{dJ_n}{dx} = 0 \quad (\text{A-1})$$

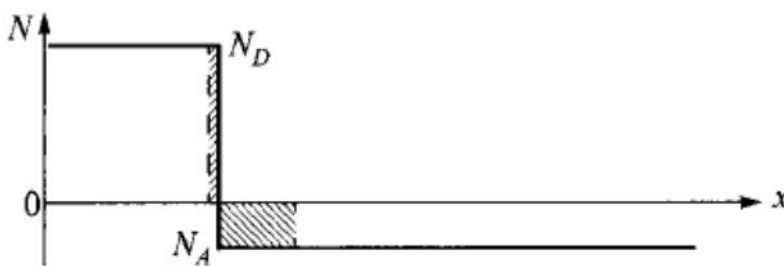
Pour les trous dans la région n :

$$G_p - \left(\frac{p_n - p_{n0}}{\tau_p} \right) - \frac{1}{q} \frac{dJ_p}{dx} = 0 \quad (\text{A-2})$$





On suppose que $N_D \gg N_A$, donc la zone de charge d'espace existe seulement sur le côté P.



L'équation de courant pour les trous est constituée de deux termes : courant de diffusion et courant d'entraînement.

$$J_p = q \cdot p \cdot v_p - qD_p \left(\frac{dp_p}{dx} \right) \tag{A-3}$$

La même chose pour les électrons

$$J_n = q \cdot n \cdot v_n + qD_n \left(\frac{dn_p}{dx} \right) \tag{A-4}$$

On sait que le courant dans les zones neutres est un courant de diffusion, les équations (A-3) et (A-4) peut s'écrire sous la forme.

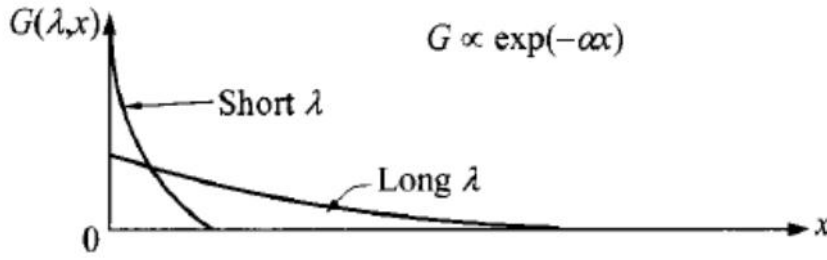
$$J_p = -qD_p \left(\frac{dp_p}{dx} \right) \quad \text{Pour les trous} \tag{A-5}$$

$$J_n = qD_n \left(\frac{dn_p}{dx} \right) \quad \text{Pour les électrons} \tag{A-6}$$

Le taux de génération des paires électron-trou à une distance x de la surface de semiconducteur est donné par l'équation :

$$G(\cdot, x) = r(\cdot) W(\cdot) [1 - R(\cdot)] \exp[-r(\cdot) x] \tag{A-7}$$

$$G(x) = rW_0 e^{-rx} \quad (\text{A-8})$$



En substituant les équations (A-5) et (A-8) dans l'équation de continuité (A-2) on trouve pour les trous.

$$D_p \frac{d^2 p_n}{dx^2} + rW(1-R)\exp(-rx) - \frac{p_n - p_{n0}}{\tau_p} = 0 \quad (\text{A-9})$$

La solution générale de cette équation est donnée sous la forme :

$$p_n - p_{n0} = C_1 \cosh\left(\frac{x}{L_p}\right) + C_2 \sinh\left(\frac{x}{L_p}\right) - \frac{rW(1-R)\tau_p}{r^2 L_p^2 - 1} \exp(-rx) \quad (\text{A-10})$$

Où $L_p = \sqrt{D_p \tau_p}$ est la longueur de diffusion des trous et C_1, C_2 sont des constantes, il y a deux conditions aux limites, la recombinaison sur la surface avec une vitesse S_p .

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

A la limite de la zone de déplétion, l'excès de la densité de porteurs est petit à cause du champ électrique dans la zone de déplétion

$$p_n - p_{n0} \approx 0 \quad \text{à } x = x_j$$

On introduit ces conditions aux limites dans l'équation (A-10), l'équation devient.

$$p_n - p_{n0} = \left[\frac{rW(1-R)\tau_p}{r^2 L_p^2 - 1} \right] \times \left[\frac{\left(\frac{S_p L_p}{D_p} + r L_p \right) \sinh \frac{x_j - x}{L_p} + \exp(-rx_j) \left(\frac{S_p L_p}{D_p} \sinh \frac{x}{L_p} + \cosh \frac{x}{L_p} \right)}{\left(\frac{S_p L_p}{D_p} \right) \sinh \frac{x_j}{L_p} + \cosh \frac{x_j}{L_p}} - \exp(-rx) \right] \quad (\text{A-11})$$

Avec:

$$C_2 = \frac{L_p S_p}{D_p} C_1 - \frac{r w (1-R) \dagger_p L_p \left(r^2 + \frac{S_p}{D_p} \right)}{r^2 L^2 - 1} = \frac{L_p S_p}{D_p} C_1 - \frac{r w_0 \dagger_p \frac{L_p}{D_p} (r^2 D_p + S_p)}{r^2 L^2 - 1}$$

$$C_1 = \frac{r w_0 \dagger_p}{r^2 L^2 - 1} \frac{e^{-r x_j} + \frac{L_p}{D_p} \operatorname{sh} \left(\frac{x_j}{L_p} \right) (S_p + r^2 D_p)}{\frac{S_p L_p}{D_p} \operatorname{sh} \left(\frac{x_j}{L_p} \right) + \operatorname{ch} \left(\frac{x_j}{L_p} \right)}$$

Et la densité de photocourant des trous est donnée par l'équation

$$J_p = -q D_p \left(\frac{dp_n}{dx} \right) =$$

$$J_p = \frac{q r \Phi (1-R) L_p}{(r L_p)^2 - 1} \left[-r L_p e^{-r w_e} + \frac{S_e \frac{L_p}{D_p} + r L_p - e^{-r w_e} \left(S_e \frac{L_p}{D_p} \operatorname{Ch} \frac{w_e}{L_p} + \operatorname{Sh} \frac{w_e}{L_p} \right)}{\operatorname{Ch} \frac{w_e}{L_p} + S_e \frac{L_p}{D_p} \operatorname{Sh} \frac{w_e}{L_p}} \right] \quad (\text{A-12})$$

12)

Avec $x_j = w_e$ l'épaisseur de l'émetteur

II- Pour trouver le photocourant des électrons générés dans la zone P, on utilise les équations (A-1), (A-8) et (A-6) :

$$G_n - \left(\frac{n_p - n_{p0}}{\dagger_n} \right) + \frac{1}{q} \frac{dJ_n}{dx} = 0 \quad G(x) = r w_0' e^{-r x}$$

Où w_0' est le flux de photons à la base.

$$D_n \frac{d^2 n_p}{dx^2} + r w_0' (1-R) \exp(-r x) - \frac{n_p - n_{p0}}{\dagger_n} = 0 \quad (\text{A-13})$$

La solution de l'équation (A-13) est de la forme :

$$n_p - n_{p0} = A \cosh\left(\frac{x}{L_n}\right) + B \sinh\left(\frac{x}{L_n}\right) - \frac{r w' (1-R) \Phi_n}{r^2 L_n^2 - 1} \exp(-rx) \quad (\text{A-14})$$

Les conditions aux limites sont :

$$n_p - n_{p0} \approx 0 \quad \text{à } x=0$$

$$-D_n \frac{dn_p}{dx} = S_n (n_p - n_{p0}) \quad \text{à } x=H$$

Où H est la largeur totale de la cellule,

$$\text{à } x=0 \quad n_p - n_{p0} \approx 0 \Rightarrow A - \frac{r w' (1-R) \Phi_n}{r^2 L_n^2 - 1} = 0 \Rightarrow A = \frac{r w' (1-R) \Phi_n}{r^2 L_n^2 - 1}$$

$$-D_n \frac{dn_p}{dx} = S_n (n_p - n_{p0}) \Rightarrow$$

$$B = \frac{r w' (1-R) \Phi_n}{r^2 L_n^2 - 1} \frac{e^{-rH} (r D_n - S_n) + \frac{D_n}{L_n} \text{sh}\left(\frac{H}{L_n}\right) + S_n \text{ch}\left(\frac{H}{L_n}\right)}{S_n \text{Sh}\left(\frac{H}{L_n}\right) + \frac{D_n}{L_n} \text{Ch}\left(\frac{H}{L_n}\right)}$$

Et le photocourant dû à la collection des électrons à la limite de la zone de déplétion est donné par

$$J_n = q D_n \left(\frac{dn_p}{dx} \right) = \frac{q r \Phi_0' (1-R) L_n}{(r L_n)^2 - 1} \left[-r L_n - \frac{S_B \frac{L_n}{D_n} \left(\text{Ch} \frac{w_b}{L_n} - e^{-r w_b} \right) + r L_n e^{-r w_b} + \text{Sh} \frac{w_b}{L_n}}{\text{Ch} \frac{w_b}{L_n} + S_B \frac{L_n}{D_n} \text{Sh} \frac{w_b}{L_n}} \right]$$

(A-15)

Où $H = W_b$ est la largeur de la région neutre p

III- le courant de génération dans la zone de déplétion

Le champ électrique dans cette zone est généralement élevé et les porteurs photo générés sont accélérés hors de la zone de déplétion avant leur recombinaison, l'efficacité quantique dans cette zone est presque égale à 100 % et le photocourant aura pour expression :

$$D_n \frac{d^2 n_p}{dx^2} = G = r w' (1-R) \exp(-rx) \quad \text{Ou } x_J \leq x \leq x_J + W_D \quad (\text{A-16})$$

Donc la densité de photocourant est :

$$J_{\text{phzCE}} = q(D_n, D_p) \frac{d(\Delta n_p, \Delta p_n)}{dx} = q \int G dx = q r W (1 - R) \int_{x_j}^{x_j + W_D} \exp(-r x) dx \quad (\text{A-17})$$

$$J_{dr} = q W [1 - R] \exp(-r x_j) [1 - \exp(-r W_D)] \quad (\text{A-18})$$

Et le photocourant total pour une longueur d'onde donnée est la somme de (A-12), (A-15) et (A-18) :

$$J_L(\lambda) = J_p(\lambda) + J_n(\lambda) + J_{dr}(\lambda)$$

V- pour le courant d'obscurité, on pose $w_0' = 0$ et $w_0 = 0$ pour les deux types de porteurs, les équations (A-9) et (A-13) deviennent :

$$D_p \frac{d^2 p_n}{dx^2} - \frac{p_n - p_{n0}}{\tau_p} = 0 \quad (\text{A-19})$$

$$D_n \frac{d^2 n_p}{dx^2} - \frac{n_p - n_{p0}}{\tau_n} = 0 \quad (\text{A-20})$$

Et les solutions de ces deux équations sont données sous la forme :

Pour les trous

$$p_n - p_{n0} = A' \cosh\left(\frac{x}{L_p}\right) + B' \sinh\left(\frac{x}{L_p}\right) \quad (\text{A-21})$$

En tenir en compte les conditions aux limites.

$$\text{à } x=0, \quad D_p \frac{d(p_n - p_{n0})}{dx} = S_p (p_n - p_{n0}) \Rightarrow B' = \frac{S_p L_p}{D_p} A'$$

$$\text{à } x=x_j, \quad p_n - p_{n0} = p_{n0} \left[e^{\frac{v}{V_T}} - 1 \right] \Rightarrow A' \operatorname{ch}\left(\frac{x_j}{L_p}\right) + B' \operatorname{sh}\left(\frac{x_j}{L_p}\right) = p_{n0} \left[e^{\frac{v}{V_T}} - 1 \right]$$

on remplace B par sa valeur on trouve

$$A' \operatorname{ch}\left(\frac{x_j}{L_p}\right) + A' \frac{S_p L_p}{D_p} \operatorname{sh}\left(\frac{x_j}{L_p}\right) = p_{n0} \left[e^{\frac{v}{V_T}} - 1 \right] \Rightarrow A' = \frac{p_{n0} \left[e^{\frac{v}{V_T}} - 1 \right]}{\operatorname{ch}\left(\frac{x_j}{L_p}\right) + \frac{S_p L_p}{D_p} \operatorname{sh}\left(\frac{x_j}{L_p}\right)}$$

$$\Rightarrow B' = \frac{S_p L_p}{D_p} \frac{p_{n0} \left[e^{\frac{v}{V_T}} - 1 \right]}{\operatorname{ch}\left(\frac{x_j}{L_p}\right) + \frac{S_p L_p}{D_p} \operatorname{sh}\left(\frac{x_j}{L_p}\right)}$$

$$\text{Donc : } p_n - p_{n0} = \frac{p_{n0} \left[e^{\frac{v}{V_T}} - 1 \right]}{\operatorname{ch}\left(\frac{x_j}{L_p}\right) + \frac{S_p L_p}{D_p} \operatorname{sh}\left(\frac{x_j}{L_p}\right)} \left[\cosh\left(\frac{x}{L_p}\right) + \frac{S_p L_p}{D_p} \sinh\left(\frac{x}{L_p}\right) \right]$$

$$J_p = -qD_p \left(\frac{dp_n}{dx} \right)_{x=x_j} = \frac{qD_p p_{n0} \left[\sinh\left(\frac{x_j}{L_p}\right) + \frac{S_p L_p}{D_p} \cosh\left(\frac{x_j}{L_p}\right) \right]}{L_p \operatorname{ch}\left(\frac{x_j}{L_p}\right) + \frac{S_p L_p}{D_p} \operatorname{sh}\left(\frac{x_j}{L_p}\right)} \left[e^{\frac{v}{V_T}} - 1 \right] \quad (\text{A-22})$$

Si on pose $x_j = W_e$ et $p_{n0} = \frac{n_i^2}{N_{\text{Deff}}}$

$$J_p = \frac{qD_p n_i^2}{N_{\text{Deff}} L_p} \frac{\left[\sinh\left(\frac{W_e}{L_p}\right) + \frac{S_p L_p}{D_p} \cosh\left(\frac{W_e}{L_p}\right) \right]}{\operatorname{ch}\left(\frac{W_e}{L_p}\right) + \frac{S_p L_p}{D_p} \operatorname{sh}\left(\frac{W_e}{L_p}\right)} \left[e^{\frac{v}{V_T}} - 1 \right] \quad (\text{A-23})$$

-Pour les électrons On suit la même manière on trouve

$$J_n = \frac{qD_n n_i^2}{N_{\text{Aeff}} L_n} \frac{\left[\sinh\left(\frac{W_b}{L_n}\right) + \frac{S_n L_n}{D_n} \cosh\left(\frac{W_b}{L_n}\right) \right]}{\operatorname{ch}\left(\frac{W_b}{L_n}\right) + \frac{S_n L_n}{D_n} \operatorname{sh}\left(\frac{W_b}{L_n}\right)} \left[e^{\frac{v}{V_T}} - 1 \right] \quad (\text{A-24})$$

VI- la densité spectrale

La densité spectrale est définie comme :

$$SR(\lambda) = \frac{J_L(\lambda)}{qW(\lambda)[1-R(\lambda)]} = \frac{J_p(\lambda) + J_n(\lambda) + J_{dr}(\lambda)}{qW(\lambda)[1-R(\lambda)]}$$

Supposant que $rL_p \gg 1$ et $rx_j \gg 1$

$$\text{La densité spectrale devient : } SR(\lambda) = \frac{1 + \frac{S_p}{rD_p}}{\frac{S_p L_p}{D_p} \operatorname{sh}\left(\frac{x_j}{L_p}\right) + \operatorname{Ch}\left(\frac{x_j}{L_p}\right)}$$

Une fois que la densité spectrale SR est connue le photo-courant est donné par l'équation suivante :

$$J_L = q \int_0^{\lambda_m} W(\lambda)[1-R(\lambda)]SR(\lambda) d\lambda$$

Où λ_m est la longueur d'onde maximale et pour trouver un photo-courant le plus grand possible, il faut minimiser $R(E)$ et maximiser SR dans le spectre $0 < \lambda < \lambda_m$

Annexe I

Propriétés de silicium

Propriétés	Si
Densité atomique (cm^{-3})	5.02×10^{22}
Structure cristalline	Diamant
Densité (g/cm)	2.329
Constante de réseau (Å)	5.43102
Constante diélectrique	11.9
Affinité électronique (eV)	4.05
Energie de gap (eV)	1.12 (Indirect)
La densité effective d'états dans la bande conduction N_c (cm^{-3})	2.8×10^{19}
La densité effective d'états dans la bande valence N_v (cm^{-3})	2.65×10^{19}
La concentration intrinsèque des porteurs n_i (cm^{-3})	9.65×10^9
La masse effective des électrons (m^*/m_0)	0.98
La masse effective des trous (m^*/m_0)	0.16
Mobilité des électrons (cm^2/Vs)	1450
Mobilité des trous μ_h (cm^2/Vs)	500
Vitesse de saturation μ_t (cm/s)	1×10^7
Champ de claquage (V/cm)	$2.5 - 8 \times 10^5$
Duré de vie des minoritaires (s)	10^{-3}
Indice de réfraction	3.42
Point de fusion ($^\circ\text{C}$)	1414

N.B : Toutes les propriétés sont données à la température ambiante

Annexe II

Propriétés des matériaux binaires III-N

Matériaux			
Paramètres	GaN	AlN	InN
Structure cristalline	W	W	W
Energie de gap (eV) à 300 K	D 3,42	D 6,28	D 0,7
Affinité			
électronique (eV)	4.1		
Constante			
diélectrique à 300K	10.4	9,14	
Masse effective			
m_e^* d'électron (300K)	0.2 m_0	0.4 m_0	0,11 m_0
Masse effective			
m_t^* de trou (300K)	0.8 m_0		0,65 m_0
N_c (cm ⁻³) à 300K	$2.3 \cdot 10^{18}$	$6,3 \cdot 10^{18}$	$9 \cdot 10^{17}$
N_v (cm ⁻³) à 300K	$4.6 \cdot 10^{19}$	$4,8 \cdot 10^{20}$	$5,3 \cdot 10^{19}$
Mobilité d'électron (cm ² V ⁻¹ s ⁻¹)	1400 à 300K		
Mobilité de trou (cm ² V ⁻¹ s ⁻¹)			
Gamme de dopage			
n (cm ⁻³)	10^{16} à 10^{19}		
Gamme de dopage			
p (cm ⁻³)	10^{16} à 10^{18}		

من المعروف أن البنى القائمة على اساس الأزوت تحتوي على ما يسمى بالاستقطاب (بنوعيه العفوي و الكهربيضغطي) . في هذا البحث ، تم دراسة تأثير الاستقطاب على الخصائص الكهروضوئية للخلايا الشمسية Si/InGaN باستخدام برنامج المحاكاة (1D-DDCC) و الذي يعمل على حل معادلات بواسون، تيار الانتشار ، و شرودنجر. اظهرت المحاكاة تحسنا في جهد الدارة المفتوحة (V_{OC}) ، و شدة تيار الدارة القصيرة لخلية مصنوعة وفق المستوي غير القطبي m (1100) (بدون الاستقطاب) مقارنة مع الخلية التي بنيت على طول المستوي القطبي c (0001) (مع الاستقطاب).

Abstract

It is well known that nitride-based structures contain the polarization effects. In this thesis, the effects of polarization on the photovoltaic characteristics of Si/InGaN tandem solar cells have been analyzed by using the One Dimensional Poisson, Drift-Diffusion, and Schrodinger Solver (1D-DDCC) simulator; the simulations show an improvement in the open-circuit voltage (V_{oc}), and the short-circuit current density (J_{sc}) for a cell grown along the non-polar m -plane (1100) (without polarization) as compared to that grown along the polar c -plane (0001) (with polarization).

Résumé

Il est bien connu que les structures à base de nitrure contiennent les effets de polarisation. Dans cet thèse, les effets de la polarisation sur les caractéristiques photovoltaïques de cellules solaires Si/InGaN ont été analysées en utilisant le (1D-DDCC), les simulations montrent une amélioration de la tension en circuit ouvert (V_{oc}), et la densité de courant du court-circuit (J_{sc}) pour une cellule épitaxie le long de le plan non-polaire m (sans polarisation) par rapport à celle épitaxie le long de le plan polaire c (avec polarisation).