

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية  
République Algérienne démocratique et populaire

وزارة التعليم العالي و البحث العلمي  
Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique

جامعة سعد دحلب البلدية  
Université SAAD DAHLAB de BLIDA

كلية التكنولوجيا  
Faculté de Technologie

قسم الإلكترونيك  
Département d'Électronique



## Mémoire de Projet de Fin d'Études

présenté par

Djebbour Mohamed Yacine

pour l'obtention du diplôme de Master en Électronique option Télécommunication & Réseaux  
Informatique

---

Thème

---

Etude et simulation des structures à base de  
GaInAlSb/GaInSb et GaInAsSb/GaInSb pour le  
photovoltaïque

---

Proposé par : Mr. Aissat Abdelkader

Année Universitaire 2011-2012

## Remerciements

---

Je tiens à exprimer mes vifs remerciements à mes promoteurs **Aissat Abdelkader , EL BEY & Bestam Rachid**, pour leurs entières dispositions, et leurs judicieux conseils, leurs patiences et leurs gentilleses, mais surtout pour leurs esprits paternel.

Mes sentiments de profonde gratitude vont à mes professeurs qui tout au long des années d'études nous ont transmis leur savoir sans réserve.

Mes remerciements s'adressent également à tous les membres du jury pour l'honneur qu'ils me font en acceptant de juger mon travail.

Mes remerciements vont aussi à tous ceux et celles qui ont participé de près ou de loin à l'élaboration de la présente thèse.

Enfin, je tiens à remercier tous mes amis et collègues pour leur soutien moral tout au long de cette préparation.

Je dédie ce modeste travail à :

Mes très chers parents qui n'ont pas cessé de m'encourager et me soutenir dans les moments difficiles et qui ont prié Dieu pour moi, et qui ont su m'entourer de toute leur affection et amour.

Mes frères Ismail, Youcef et le petit Lotfi.

---

## ملخص:

درس أول نحن. الضوئية لتطبيق هيكل على القائمة الموصلات لأشباه والمحاكاة النمذجة على يركز العمل هذا GaInSb الركيزة على GaInAsSb الفوقي GaInAlSb و سبائك من مختلفة المعلمات على الإنديوم تركيز تأثير الشمسي الطيف لامتناهات للاهتمام جدا مثيرة هي التي سبيكة، في الفجوة من الإنديوم يقلل الكثافة زيادة أن والواقع الأقصى.

بوصفها التحويل كفاءة على تؤثر التي المختلفة العوامل في الاختلافات تبيين التي البيانية الرسوم تشمل الدراسة لأنه GaInSb / GaInAlSb هو العمل لهذا الأنسب هيكل. الموصلات أشباه طبقة وسمك الإنديوم تركيز من وظيفة أفضل أداء على يحتوي

---

## Résumé :

Ce travail porte sur la modélisation et la simulation d'une structure à base de semi-conducteurs pour une application photovoltaïque. Nous avons étudié d'abord l'influence de la concentration d'indium sur les différents paramètres de l'alliage GaInAlSb et GaInAsSb épitaxie sur substrat de GaInSb. En effet l'augmentation de la densité d'indium diminue le gap de l'alliage, ce qui est très intéressant pour absorber le maximum de spectre solaire.

L'étude comprend des graphes donnant les variations des différents facteurs influant sur le rendement de conversion en fonction de la concentration d'indium et de l'épaisseur de la couche des semi-conducteurs. La structure la plus appropriée pour ce travail est GaInSb/GaInAlSb car elle possède un meilleur rendement.

---

## Abstract :

This work focuses on modeling and simulation of structure-based semiconductors for photovoltaic application. We first studied the influence of the concentration of indium on the various parameters of the alloy and GaInAsSb epitaxial GaInAlSb on GaInSb substrate. Indeed, the increased density of indium decreases the gap of the alloy, which is very interesting to absorb maximum solar spectrum.

The study includes graphs showing the variations of the different factors affecting the conversion efficiency as a function of the concentration of indium and the thickness of the semiconductor layer. The most appropriate structure for this work is GaInSb / GaInAlSb because it has better performance.

---

# Table des matières

<u>INTRODUCTION GENERALE</u> .....	9
<u>CHAPITRE 1</u> .....	11
1.1 Introduction_ .....	1
1.2 Le soleil .....	13
1.3 Principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque .....	17
1.4. Facteurs limitants le rendement (Pertes physiques et technologiques) .....	23
1.5 Schema électrique équivalent d'une cellule photovoltaïque .....	25
1.6 Conclusion .....	27
<u>CHAPITRE 2</u> .....	28
2.1 Introduction .....	28
2.2 Structure cristalline des semi-conducteurs III-V .....	29
2.3 Le paramètre de maile à base de semi-conducteurs III-V .....	33
2. 4 Notion de couche contrainte et épaisseur critique .....	35
2.5 Effet de la contrainte sur les semiconducteurs III-V .....	38
2.6 Conclusion .....	45
<u>CHAPITRE 3</u> .....	46
3.1 Introduction .....	46
3.2 Simulation de la structure $\text{Ga}_{(1-x)}\text{In}_{(x)}\text{Sb}/\text{GaInAsSb}$ .....	46
3.3 Simulation de la structure $\text{Ga}_{(1-x)}\text{In}_{(x)}\text{Sb}/\text{GaInAlSb}$ .....	63
3.4 L'effet de la contrainte sur le coefficient d'absorption .....	68
3.5 Diagramme des bandes d'énergie .....	70
3.6 Caractéristiques photovoltaïques .....	71
3.7 Comparaison entre les deux structures étudiées .....	77
3.9 Conclusion .....	81
<u>CONCLUSION GENERALE</u> .....	82

## Liste des figures

<u>CHAPITRE 1</u> .....	11
Figure 1.1 : Vision historique des densités atmosphériques d'anhydride carbonique et de méthane .....	12
Figure 1.2 : Evolution de la température globale de la terre .....	12
Figure 1.3 : Relevés annuels de production du pétrole brut du monde avec des taux de croissance .....	13
Figure 1.4 : Schéma représentant les conditions AM <sub>0,5</sub> , AM <sub>1</sub> et AM <sub>1,5</sub> et le spectre d'émission solaire aux conditions AM <sub>0</sub> et AM <sub>1,5</sub> . .....	15
Figure 1.5 : Exemples de fermes solaires-Calvia, Mallorca, Spain et Lucainena de las Torres, Andalusia, Spain .....	17
Figure 1.6 : Schéma de la structure d'une cellule photovoltaïque .....	18
Figure 1.7 : transition inter bande d'électron dans un semi-conducteur .....	20
Figure 1.8 : coefficient d'absorption du silicium et profondeur de pénétration des photons .....	20
Figure 1.9 : caractéristique courant-tension $I = f(V)$ en obscurité et sous éclairage d'une cellule photovoltaïque .....	22
Figure 1.10: schéma équivalent d'une cellule photovoltaïque .....	26
<u>CHAPITRE 2</u> .....	28
Figure 2.1 : Maille élémentaire .....	30
Figure 2.2 : Types de réseaux de Bravais cubiques ; a) cubique simple b) cubique centré c) cubique à faces centrées .....	30
Figure 2.3 : La structure diamant et Zinc-blende .....	32
Figure 2.4 : La cellule Wurtzite hexagonale. L'axe C correspond à la direction du vecteur $a_3 = c$ .....	32
Figure 2.5 : Les différentes structures cristallines selon leurs paramètres de mailles ..	33

Figure 2.6 : Couche totalement contrainte a) cas ( $a_{epitax} > a_{sub}$ ) compression, b) cas ( $a_{epitax} < a_{sub}$ ) allongement .....	35
Figure 2.7: Propagation de dislocation dans la couche épitaxie épaisse.....	36
Figure 2.8 : La structure de bande d'un semi-conducteur à gap direct .....	38
<b>CHAPITRE 3 :</b> .....	46
Figure 3.1 : Le paramètre de maille de la structure $Ga_{(1-x)}In_{(x)}Sb$ en fonction de la composition x de l'indium.....	47
Figure 3.2 : Les paramètres de maille de la structure $GaInAsSb$ en fonction de la composition x de l'indium et y en antimoine. ....	48
Figure 3.3 : Variation du désaccord en fonction des l'indium et de l'antimoine dans le quaternaire.....	49
Figure 3.4 : Variation du désaccord en fonction de l'indium dans le ternaire .....	49
Figure 3.5 : L'épaisseur critique en fonction de la composition x de l'indium .....	51
Figure 3.6 : Variation du gap en fonction de la concentration d'indium .....	52
Figure 3.7 : Variation du coefficient d'absorption en fonction de l'énergie incidente. ....	53
Figure 3.8 : Variation du coefficient d'absorption en fonction de la concentration d'indium .....	53
Figure 3.9 : variation de discontinuité des bandes de valence et conduction en fonction de la concentration d'indium .....	55
Figure 3.10 : Variation du photo-courant en fonction de la concentration d'indium dans le ternaire .....	56
Figure 3.11: caractéristique courant-tension pour plusieurs concentrations d'indium .....	57
Figure 3.12 : variation de la puissance pour plusieurs concentrations d'indium.....	58
Figure 3.13 : puissance maximale en fonction de la concentration d'indium .....	58
Figure 3.14 : Variation de $V_{CO}$ en fonction de la concentration d'indium .....	59
Figure 3.15 : variation de FF en fonction de la concentration d'indium.....	60
Figure 3.16 : Rendement en fonction de la concentration d'indium .....	61
Figure 3.17 : Les paramètres de maille de la structure $GaInAlSb$ en fonction de la composition x de l'Aluminium et y en Gallium .....	61

Figure 3.18 : Variation du désaccord en fonction de l'Aluminium et du Galium dans le quaternaire.....	63
Figure 3.19 : Variation du désaccord en fonction de l'indium dans le ternaire .....	64
Figure 3.20 : L'épaisseur critique en fonction de la composition x de l'indium .....	65
Figure 3.21 : Variation du gap en fonction de la concentration d'indium .....	66
Figure 3.22: Variation du coefficient d'absorption en fonction de l'énergie incidente	67
Figure 3.23 : Variation du coefficient d'absorption en fonction de la concentration d'indium .....	68
Figure 3.24 : variation de discontinuité des bandes de valence et conduction en fonction de la concentration d'indium .....	69
Figure 3.25 : Variation du photo-courant en fonction de la concentration d'indium dans le ternaire .....	70
Figure 3.26 caractéristique courant-tension pour plusieurs concentrations d'indium	71
Figure 3.27 : variation de la puissance pour plusieurs concentrations d'indium.....	72
Figure 3.28 : puissance maximale en fonction de la concentration d'indium .....	73
Figure 3.29 : Variation de $V_{CO}$ en fonction de la concentration d'indium .....	74
Figure 3.30 : variation de FF en fonction de la concentration d'indium .....	75
Figure 3.31 : Rendement en fonction de la concentration d'indium .....	76

## Liste des tableaux

<u>CHAPITRE 2</u> .....	28
Tableau 2.1 : Table abrégée périodique des éléments.....	29
Tableau 2.2 : Paramètre de maille $a$ des matériaux binaires GaSb, GaAs, InSb, InAs, AlSb, AlAs. ....	34
<u>CHAPITRE 3</u> .....	46
Tableau 3.1 : Tableau récapitulatif des résultats des simulations .....	78

# Introduction générale

---

Depuis de nombreuses années l'humanité fait face à une demande en énergie croissante. Cette croissance, qui n'est que la conséquence directe de la croissance démographique mondiale et la mutation progressive de nombreuses économies primaires (basées sur l'agriculture) vers des économies secondaires (basées sur la production) dans les pays en voie de développement, entraîne une raréfaction des ressources naturelles utilisées pour répondre à ce besoin en énergie. Une très grande partie de ces ressources sont aujourd'hui issues des énergies fossiles : pétrole, charbon, gaz naturel. Bien que diversifiés et très abondantes, ces ressources ne sont pas inépuisables et l'exploitation qui en est aujourd'hui faite ne pourra durer plus d'un siècle. Mais la sûreté énergétique à long terme des pays du monde n'est pas le seul péril que fait encourir le recours aux énergies fossiles. Leur utilisation génère et de manière considérable du dioxyde de carbone, gaz en parti responsable de l'effet de serre. Cet effet de serre met en péril de nombreuses populations de part le monde ainsi que la stabilité géopolitique même de certaines régions du globe qui pourrait être mise à mal par des phénomènes climatiques majeurs.

Pour répondre à ces préoccupations, de plus en plus d'états mettent en place des politiques incitant à l'économie de l'énergie, mais aussi à la production d'énergie grâce à d'autres moyens qualifiés de « propres » en référence au fait qu'il ne génère pas de dioxyde de carbone. Ces moyens de production sont principalement issus des énergies renouvelables, c'est à dire ceux dont les ressources sont inépuisables par nature. Parmi celles-ci, on peut citer l'énergie éolienne (issue du vent), marémotrice (issue du ressac, des vagues et des mouvements des marées) ou encore l'énergie « solaire ». Ce dernier terme recouvre en réalité de nombreuses technologies, parmi lesquelles l'énergie photovoltaïque. Il s'agit d'un processus qui permet de convertir

directement la lumière du soleil en électricité, sans intermédiaire, grâce à un matériau semi-conducteur.

L'énergie photovoltaïque a connu un développement formidable en l'espace de 50 ans. La recherche spatiale a permis de financer les recherches initiales. La compréhension des phénomènes physiques qui a découlée de ces recherches a permis à de nombreux matériaux d'être développés avec succès par la suite, et petit à petit, avec la baisse du coût des matières utilisées et une meilleure maîtrise de la technologie, les panneaux photovoltaïques ont quitté l'espace pour être utilisés sur terre. Les politiques d'incitation gouvernementales ont permis l'essor de cette filière arrivée à maturité et qui connaît depuis maintenant 20 ans des taux de croissance à deux chiffres.

Le développement des cellules photovoltaïques passe essentiellement par la maîtrise des matériaux utilisés dans la conception des composants. La plupart de ces matériaux sont obtenus par alliage sur des substrats standard. Ils pourraient à priori couvrir une large gamme de compositions et donc d'applications.

L'étude présentée dans ce mémoire, porte sur la modélisation, la simulation et la caractérisation d'une cellule photovoltaïque de type semi-conducteur/semi-conducteur.

- Dans le premier chapitre, nous décrivons le principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque, la caractéristique électrique et les principaux facteurs limitant le rendement de conversion qui permettent de modéliser la cellule par un circuit électrique.
- Le deuxième chapitre, est consacré à la description des semi-conducteurs III-V et à définir leurs propriétés (paramètre de maille, désaccord paramétrique, largeur de la bande interdite, épaisseur critique, et coefficient d'absorption).
- Dans le troisième chapitre, nous étudions l'influence de la concentration de l'indium sur les paramètres physiques de l'alliage  $Ga_{(1-x)}In_xSb$  (paramètre de maille, désaccord paramétrique avec les deux alliages  $Ga_{(1-x)}In_xAs_{(1-y)}Sb_y$  et  $Ga_yIn_{(1-x-y)}Al_xSb$ , largeur de la bande interdite, épaisseur critique, et coefficient d'absorption). Ainsi que la simulation et à l'étude de l'effet de l'épaisseur de la couche isolante et la fraction d'indium sur le rendement de conversion de la cellule, avec une comparaison des résultats des simulations des deux structures proposée ( $Ga_{(1-x)}In_xAs_{(1-y)}Sb_y/Ga_{(1-x)}In_xSb$ ) et  $Ga_{(y)}In_{(1-x-y)}Al_{(x)}Sb/Ga_{(1-x)}In_xSb$  avec d'autres structures similaires.

# Chapitre 1 Généralités

---

## 1.1 Introduction

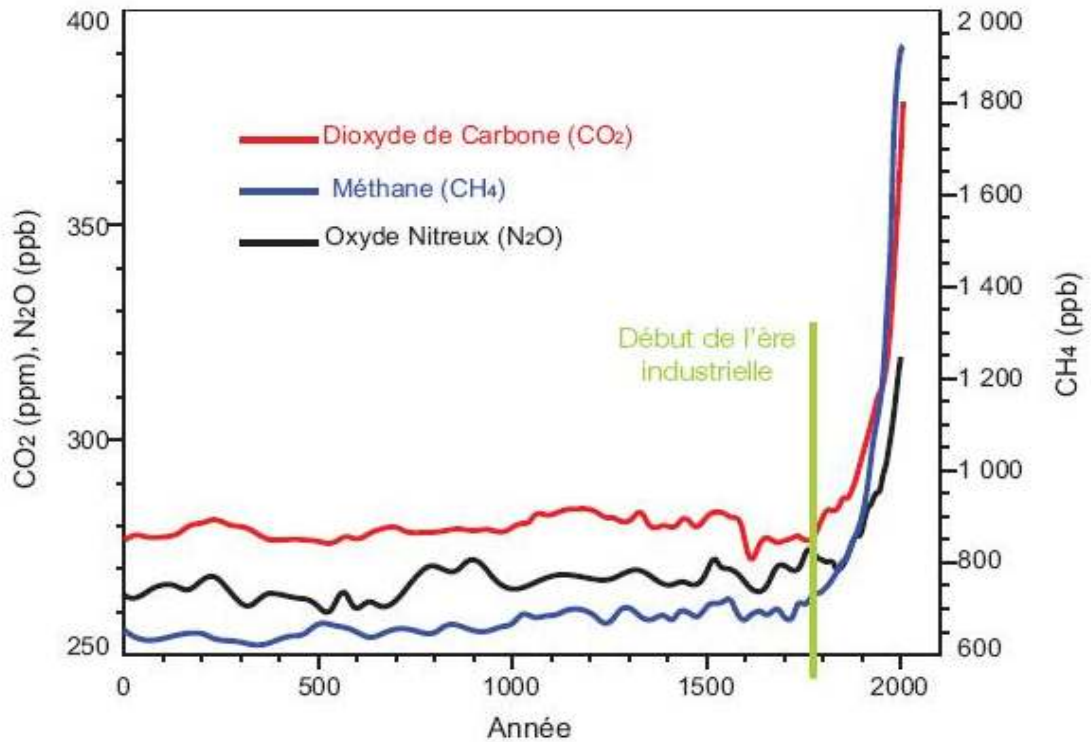
L'exploitation des ressources naturelles d'énergies comme le Charbon, le Gaz et le pétrole brut, engendre des conséquences néfastes voir catastrophique à l'environnement. L'atmosphère est de plus en plus polluée par des peroxydes d'azote, de méthane et d'anhydride carbonique ; cette pollution ne cesse de s'amplifier depuis 1750 (figure 1.1)[1].

On a constaté pendant les douze dernières années qui ont précédés (1998-2010) une forte hausse de la température dans notre écosystème. Ce réchauffement climatique, indiqué sur la figure 1.2 a engendré une augmentation des températures moyennes dans l'air et la mer, dont un impact substantiel direct de l'énergie combustible sur la dégradation de l'état de santé des humains : pour chaque perte de 1% de la couche d'ozone due à la pollution, on a une augmentation de 3% à 5% de risque de contracter un cancer de la peau.

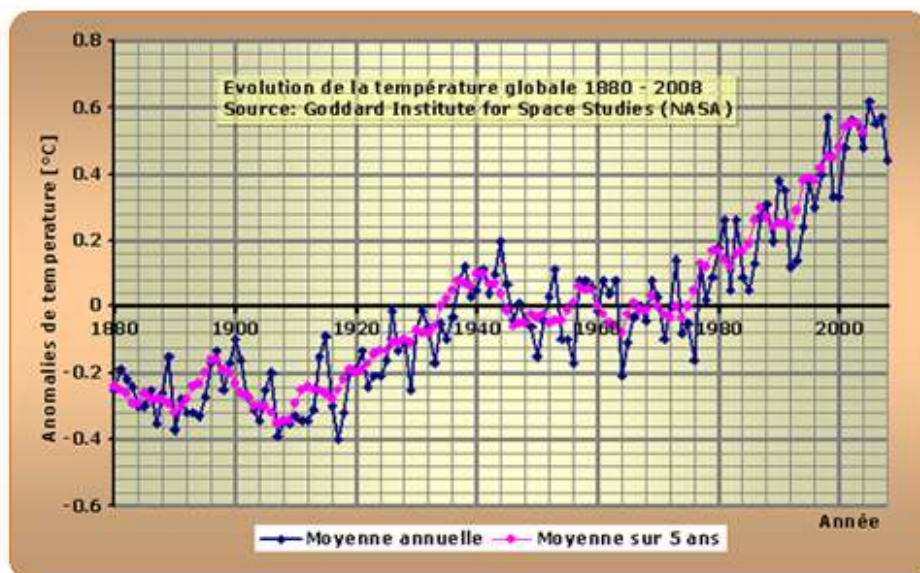
La forte dépendance de l'homme envers les énergies combustibles a engendré des préoccupations quotidiennes pour la quête de cette énergie. Selon une étude géologique aux Etats Unis, on estime que la production de pétrole va atteindre un pic en 2037 selon les indications de la figure 1.2 [1].

Cette dépendance a engendré de nombreux conflits en Afrique et au Moyen Orient où l'exploitation des ressources pétrolifères est source de grandes tensions. Les besoins des pays industrialisés se font de plus en plus forts. Généralement ce sont de grandes puissances militaires qui n'hésitent pas jusqu'à violer les lois internationales dans des perspectives hégémonistes pour subvenir à leur besoins : (le pétrole est une chose trop importante pour qu'on la laisse aux sols arabe) Dixit Henri Kissinger 1975 (ministre des A.E Américain). Le pétrole, matière hautement stratégique, est

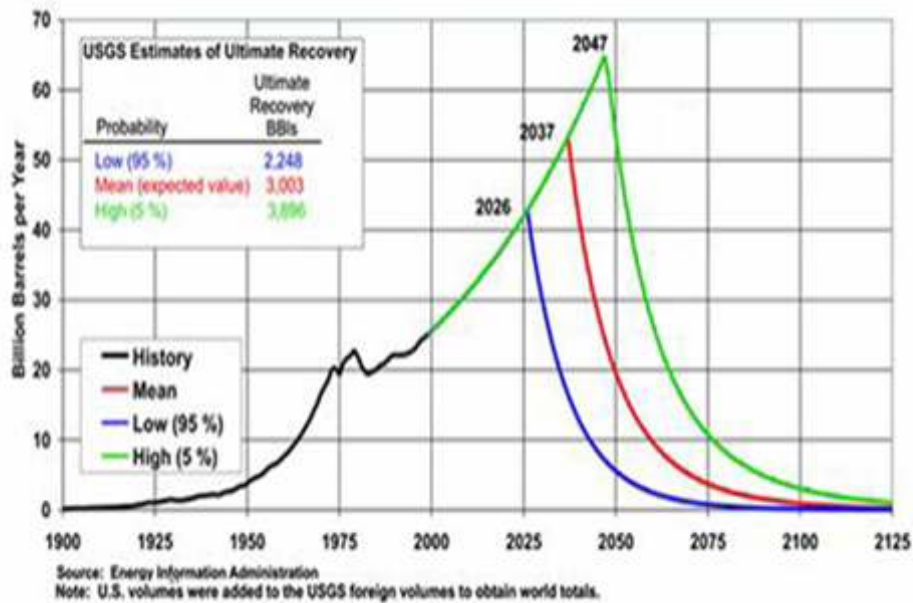
fréquemment associé aux affrontements internationaux depuis le début du 20<sup>ème</sup> siècle.



**Figure 1.1 :** Vision historique des densités atmosphériques d’anhydride carbonique (à gauche), et de méthane à droite [1].



**Figure 1.2:** Evolution de la température globale de la terre [1].



**Figure 1.3** : Relevés annuels de production de pétrole brut du monde avec des taux de croissance [1].

La nécessité est de trouver une solution à large utilisation des énergies renouvelables, afin de satisfaire nos besoins en énergie. Ainsi l'énergie solaire reste l'énergie la plus écologique, et la plus appropriée pour sauvegarder un monde meilleur.

## 1.2 Le soleil

### 1.2.1 Caractéristiques générales du soleil

Le Soleil est une étoile, dont le diamètre est de 1 391 000 km, son énergie provient des réactions thermonucléaires de fusion de l'hydrogène en hélium. Sa température superficielle moyenne est estimée à 5800°K. Elle est placée à 150 millions Km de la terre. Cette distance tellement grande, pourtant la lumière du soleil atteint la terre en seulement 8 minutes après avoir été émise. Pour rappel, la lumière a une vitesse de  $3 \cdot 10^8$  m/s, c'est-à-dire qu'elle peut faire 7 fois le tour de la terre en 1 seconde [2].

Quant à son volume, il peut contenir 1 300 000 Terre. Sa masse est de 330 000 fois celle de la Terre (2 milliards de milliards de tonnes). Le soleil représente 99,867% de la masse totale du système solaire, l'ensemble de toutes les planètes ne représente que le millième du Soleil [3]. Le système solaire et le soleil tournent à une vitesse d'environ

250 Km/s, il leur faut environ 240 millions d'années pour effectuer le tour de la Galaxie (Galaxie : Vaste ensemble d'étoiles, de poussières et de gaz interstellaires, isolé dans l'espace, dont la cohésion est assurée par la gravitation), en traversant des densités variables de poussières qui interceptent une partie du rayonnement qu'il nous renvoie. Cela a du certainement avoir un impact sur le climat de la Terre [4].

La lumière du soleil est 600 000 fois plus élevée que celle de la lune, elle est visible à 60 al (année-lumière).

La composition en gaz du soleil comporte 70% d'hydrogène et de 28% d'hélium, et 2% représentant la plupart des autres atomes présents dans l'univers. Il faut savoir que les étoiles sont des usines qui créent tous les matériaux qui existent dans l'univers, à partir de l'hydrogène. On peut identifier plus de 60 éléments chimiques, tel que l'OH (radical hydroxyle), CH (radical éthylique) et aussi du titane, du plomb, du mercure, du chlore, du silicium, indium, antimoine, zirconium, rhodium, etc. [5]

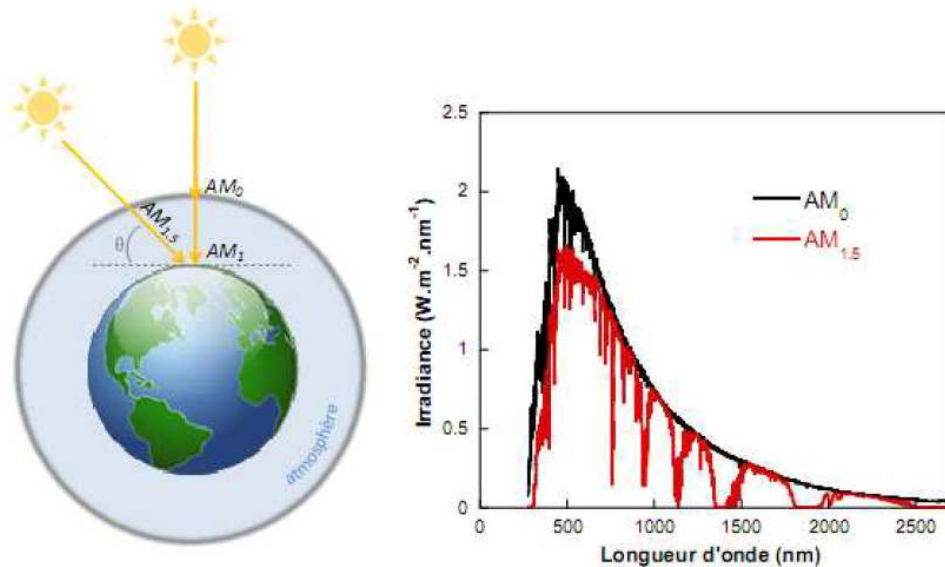
### 1.2.2 Le spectre solaire

La lumière qui nous parvient du soleil ne possède pas exactement le même spectre que celle émise par celui-ci. Le passage par l'atmosphère provoque une atténuation de la puissance de rayonnement solaire, voire une absorption totale de certaines bandes. Ce sont certaines molécules présentes dans l'atmosphère qui sont responsables de ce phénomène, comme l'eau ou le dioxyde de Carbone. De plus, cette atténuation n'est pas homogène sur l'ensemble de la planète, car elle dépend de l'épaisseur d'atmosphère traversée, elle-même fonction de la longitude à laquelle le rayonnement est reçu. Pour tenir compte de ces différences, on introduit un coefficient  $x$  appelé masse atmosphérique ou nombre d'air masse ( $AM_x$ ) dont l'expression est :

$$x = \frac{1}{\sin \theta} \quad (1,1)$$

$\theta$  représente l'élévation du soleil sur l'horizon (90° au zénith) comme le montre la figure 1.4. Ainsi, lorsque le Soleil est au Zénith, on dit que l'on a les conditions

AM<sub>1</sub> car les rayons lumineux traversent une épaisseur d'atmosphère unité (7,8 Km). Avec un soleil à 30° sur l'horizon, on obtient les conditions AM Hors atmosphère, à haute altitude, on définit les conditions AM<sub>0</sub>.



**Figure 1.4 :** Schéma représentant les conditions AM<sub>0,5</sub>,AM<sub>1</sub> et AM<sub>1,5</sub> (gauche) et le spectre d'émission solaire aux conditions AM<sub>0</sub> et AM<sub>1,5</sub>.

En réalité, le nombre d'air masse recouvre deux aspects. D'une part, il caractérise la puissance transportée par le rayonnement solaire (1353 W.m<sup>-2</sup> pour AM<sub>0</sub>, 833 W.m<sup>-2</sup> pour AM<sub>1,5</sub>) ; d'autre part, il sert à définir un spectre de référence pour calibrer les cellules étalons destinées à déterminer les performances des dispositifs photovoltaïques. Ainsi les conditions standards de qualification des cellules correspondant à un spectre AM<sub>1,5</sub>, une puissance incidente de 1000 W.m<sup>-2</sup> et une température de 25° C et c'est pour de telle conditions que doivent être fournies les performances et spécifications d'un dispositif photovoltaïque donné .

### 1.2.3 Energie solaire

Chaque année, la Terre reçoit  $1,56 \cdot 10^{18}$  kWh en énergie solaire, ce qui représente plus de 10000 fois la consommation mondiale d'électricité ! Il existe deux façons d'exploiter cet incroyable gisement : convertir le rayonnement en chaleur puis (éventuellement) en électricité (voie thermodynamique) ou convertir le rayonnement directement en électricité (voie photovoltaïque).

Dans le cas de la voie thermodynamique, on peut capter la lumière avec des matériaux absorbants (typiquement noirs) qui vont convertir la lumière en chaleur. Les ballons d'eau chaude solaires fonctionnent ainsi. Un panneau absorbant est mis sur le toit de la maison et l'énergie thermique récupérée sert à chauffer l'eau du robinet. On peut atteindre des températures comprises entre 60 et 80°C de la sortie.

Une approche plus industrielle consiste à disposer des miroirs concentrateurs au tour d'un dispositif contenant un fluide caloporteur (fluide évacuant la chaleur d'une machine thermique). Le fluide caloporteur, mis en contact avec un second réseau d'eau via des échangeurs thermiques fait passer celle-ci en phase vapeur, ce qui permet de faire tourner une turbine. De telles centrales existent déjà et permettent une production d'électricité de l'ordre de quelques mégawatts à plusieurs centaines de mégawatts (cas de la centrale de Luz Solar Energy en Californie). Des bacs de sels fondus permettent le stockage de l'énergie thermique excédentaire (jusqu'à plus de 550°C) et ainsi de lisser la production avec la possibilité de continuer de produire de l'électricité durant la nuit. On parle, pour ces technologies, de centrales solaires thermodynamiques.

Dans le cas de la voie photovoltaïque, on convertit directement 3 % à 40% de l'énergie lumineuse incidente en courant continu. La force de cette approche est la simplicité de mise en œuvre comparée à la précédente. Les faiblesses sont les mêmes : le problème du stockage de l'énergie produite lors de la journée ou des journées ensoleillées pour continuer de distribuer la nuit ou les journées ou la couverture nuageuses est trop importante pour permettre un fonctionnement correct des cellules.

L'aspect intéressant de ce mode de production vient du peu d'entretien que nécessite un panneau photovoltaïque une fois posé, et le fait que toutes les surfaces exposées au soleil sont candidates pour recevoir de tels panneaux. Ces deux points donnent un avantage significatif à filière solaire photovoltaïque par rapport à la filière thermodynamique. Là où la première fonctionne sans entretien, la seconde est une usine à part entière, avec l'entretien et les risques industriels que cela implique. Là où

la première ne nécessite qu'un toit, la seconde demande un terrain découvert pour les concentrateurs et le procédé en lui-même.

On comprend que l'avantage de l'énergie solaire photovoltaïque tient donc dans le fait qu'elle peut utiliser des surfaces inutilisées jusque là, et ne nécessite pas en soi de surface au sol.

Néanmoins, cela n'empêche pas de grandes fermes photovoltaïques d'être créées (figure 1.5). A Amareleja au Portugal ce ne sont pas moins de 262 000 modules (répartit sur 250 hectares) qui produisent 46 MW d'électricité



**Figure 1.5:**Exemples de fermes solaires-Calvia, Mallorca,Spain (image de gauche )et Lucainena de las Torres, Andalusia,Spain (image de droite)

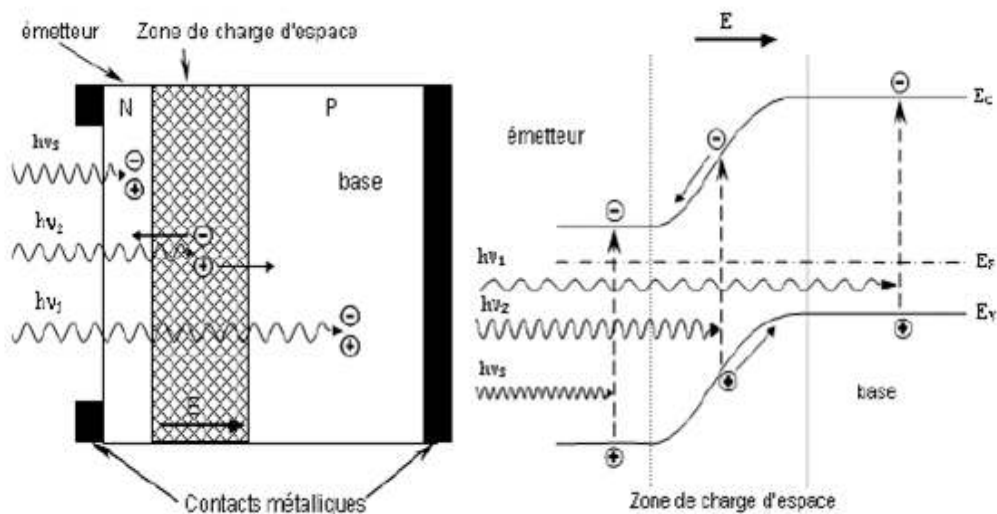
### 1.3 Principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque

Le courant inverse d'une jonction p-n est fonction d'une part des densités de porteurs minoritaires dans les régions neutres de la diode, et d'autre part de la génération de paires électron-trou dans la zone de charge d'espace. Dans une photodiode, le rayonnement augmente le courant inverse par la création de porteurs minoritaires dans les régions neutres et la génération de paires électrons-trous dans la zone de charge d'espace.

Le principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque est illustré sur la (figure 1.6). Les photons incidents créent des porteurs dans chacune des régions N, P et la zone de charge d'espace. Le comportement de ces porteurs libres diffère suivant le lieu de leur création. Dans les zones électriquement neutres N et P, les photo-porteurs minoritaires diffusent, ceux qui atteignent la région de charge d'espace sont propulsés

par le champ électrique  $E$  vers la région où ils deviennent majoritaires. Ces photo-porteurs contribuent donc au courant par leur diffusion, ils créent un photo-courant de diffusion.

Dans la zone de charges d'espaces, les paires électrons-trous créées par les photons sont dissociées par le champ électrique  $E$ , l'électron est propulsé vers la région type N et le trou vers la région de type P. ces porteurs donnent naissance à un photo-courant de génération. Ces deux contributions s'ajoutent pour créer un photo-courant résultant  $I_{ph}$ . C'est un courant de porteurs minoritaires. Il est proportionnel à l'intensité de la lumière.



**Figure 1.6** : Schéma de la structure d'une cellule photovoltaïque illustration

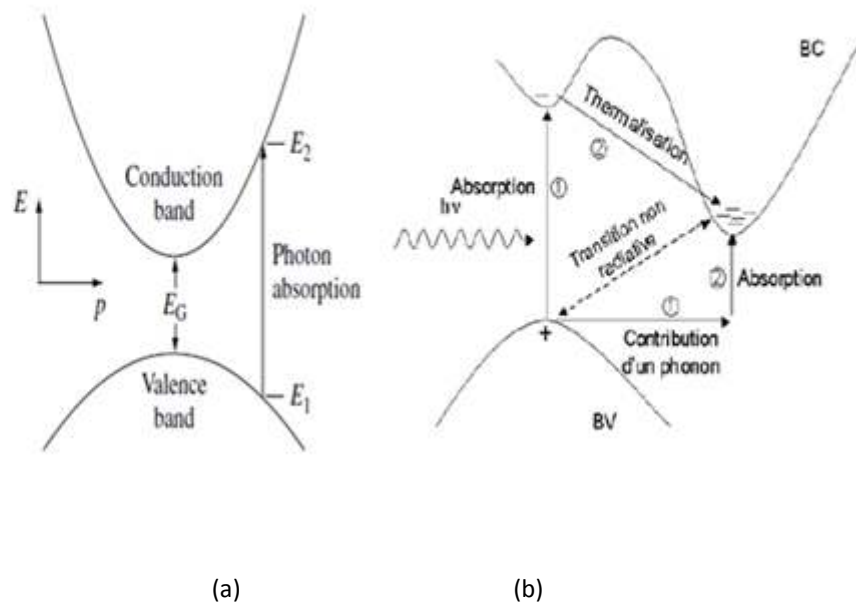
(a) phénomène de photo-génération (b) collecte des porteurs pour différentes longueurs d'ondes [6].

### 1.3.1 Interaction photon semi-conducteur

L'écart entre la bande de conduction et la bande de valence, le Gap, représente une caractéristique importante des semi-conducteurs. La figure 1.7 présente les différentes transitions possibles selon la nature du Gap.

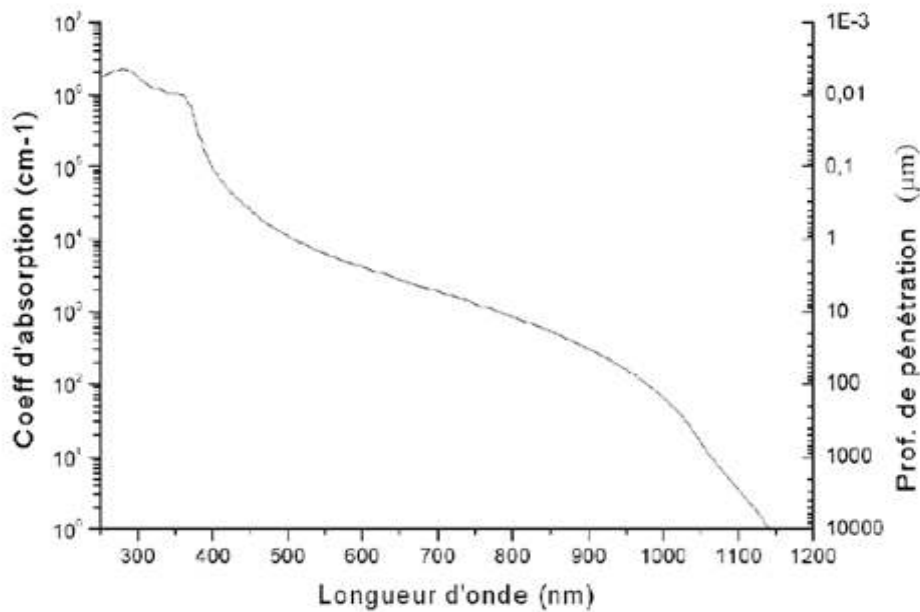
Quand le minimum de la bande de conduction coïncide avec le maximum de la bande de valence l'espace des  $k$ , il s'agit d'un Gap direct. Les transitions inter bandes s'effectuent verticalement et sont donc radiatives (figure 1.7). Ceci illustre le fonctionnement de la plupart des semi-conducteurs binaires III-V, tel que GaAs, GaSb...etc. qui sont fréquemment utilisés en optoélectronique. Dans le cas contraire c'est un Gap indirect. Comme le silicium, les transitions inter bande de conduction dans ce cas sont inclinés (le maximum de la bande de valence ne coïncide pas avec le minimum de la bande de conduction dans l'espace  $k$ ) car elles impliquent un changement de vecteur d'onde de l'électron. Les électrons du sommet de la bande de valence peuvent toutefois être directement excités vers le minimum relatif central de la bande de conduction grâce à un photon de plus grande énergie. Pour que la transition radiative s'effectue dans le Gap indirect, il faut qu'un photon soit au préalable absorbé (ou émis) par le matériau, afin que le vecteur d'onde de l'électron corresponde au maximum de la bande de valence, pour absorber un photon (figure 1.6-b[7]).

L'interaction entre les photons et les électrons peut s'exprimer pour les semi-conducteurs par le coefficient d'absorption. Il traduit le nombre de photons absorbés par unité d'épaisseur de matériau en fonction de la longueur d'onde. La figure (1.7) nous montre celui du silicium. Nous constatons que les photons ayant une longueur d'onde inférieure à 365 nm sont absorbés dans les 10 premiers nanomètres du matériau. Comme nous l'avons vu, ces transitions directes ne sont plus possibles pour des longueurs d'ondes plus grandes. Il faut alors qu'un premier photon excite l'électron pour que ce dernier passe de la bande de conduction à l'arrivage du deuxième photon (ou plusieurs). Ce phénomène réduit la probabilité de transition. La transition n'est plus possible, lorsque la longueur d'onde croisse encore jusqu'à ce que l'énergie du photon soit inférieure à celle du Gap du matériau, et l'énergie du photon va se dissiper sous forme de chaleur [8].



**Figure 1.7:** transition inter bande d'électron dans un semi-conducteur

a) Gap direct b) Gap indirect [9].



**Figure 1.8:** coefficient d'absorption du silicium et profondeur de pénétration des photons

L'absorption est traduite par la génération optique (création des paires électrons-trous), qui modifie localement la conductivité du matériau. Les porteurs minoritaires, sont instables et n'existeront que pour un temps égal à leur durée de

vie  $\tau$ . C'est le temps moyen entre la génération et la recombinaison d'un porteur minoritaire, donnée par :

$$\tau = \frac{L_D^2}{D} \quad (1.2)$$

$L_D$  : Longueur de diffusion.

$D$  : Coefficient de diffusion.

Pour générer du courant, il faut collecter les porteurs photo-générés dans un circuit électrique externe avant qu'ils ne se recombinent.

### 1.3.2 Caractéristiques électriques d'une cellule photovoltaïque

Dans la cellule photovoltaïque, deux courants s'opposent, le courant d'éclairement (photo-courant  $I_{ph}$ ) et un courant de la diode appelé courant d'obscurité  $I_{obs}$ , qui résulte de la polarisation du composant. Le courant résultant  $I(V)$  est [11] :

$$I(V) = I_{obs}(V) - I_{ph} \quad (1.3)$$

avec:

$$I_{obs}(V) = I_s \left( e^{\left(\frac{qV}{nkT}\right)} - 1 \right) \quad (1.4)$$

$$I_{ph} = q \times \Phi \left[ 1 - \frac{e^{-\alpha w}}{1 + \alpha w} \right] \times A \quad (1.5)$$

ou

$q$  : Charge élémentaire ( $q=1.6 \times 10^{-19}C$ ).

V : Tension aux bornes de la jonction.

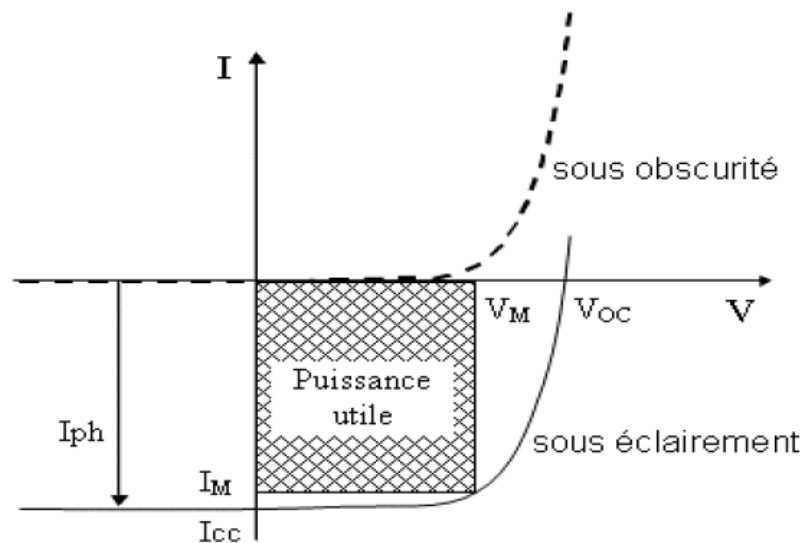
k : Constante de Boltzmann ( $k = 1.38 \times 10^{-23} \text{J.K}^{-1}$ ).

$\Phi$  : Flux incident.

T : Température en (K).

A : Surface de la cellule PV.

$I_s$  est le courant de saturation de la diode. n est le facteur d'idéalité de la diode, fonction de la qualité de la jonction (égal à 1 si la diode est idéale et égal à 2 si la diode réel). La caractéristique d'une cellule à l'obscurité est identique à celle d'une diode. Sous éclairement, la caractéristique courant-tension a l'allure présentée sur la (figure 1.9).



**Figure 1.9:** caractéristique courant-tension  $I = f(V)$  en obscurité et sous éclairement d'une cellule photovoltaïque [9].

A partir de la caractéristique courant-tension de la cellule photovoltaïque, on peut déduire les paramètres propres à la cellule et particulièrement :

$I_{CC}$  : Courant de court-circuit (obtenu pour  $V=0$ ).

$V_{OC}$  : Tension en circuit ouvert (obtenu pour  $I=0$ ).

$I_M$  : Courant à la puissance maximale de fonctionnement de la cellule PV.

$V_M$  : Tension à la puissance maximale de fonctionnement de la cellule PV.

$\eta$  : Rendement de conversion.

FF : Facteur de forme.

avec :

$$\eta = \frac{\text{(puissance électrique maximale fournie)}}{\text{(puissance solaire incidente)}}$$

$$\eta = \frac{V_M I_M}{P_i \cdot A} = \frac{FF \cdot V_{OC} \cdot I_{CC}}{P_i \cdot A} \quad (1.6)$$

$P_i$  : Puissance d'éclairement reçue par unité de surface.

$$FF = \frac{\text{(puissance maximale délivrée sur la charge)}}{V_{OC} I_{CC}}$$

$$FF = \frac{V_M I_M}{V_{OC} I_{CC}} \quad (1.7)$$

## 1.4 Facteurs limitant le rendement (pertes physiques et technologiques)

Les différents facteurs de pertes, sont dus soit aux bornes purement physiques liées au matériau, soit aux limitations technologiques induites par le processus de fabrication. Des choix de technologies appropriés peuvent cependant avoir des conséquences sur la limitation intrinsèque du matériau.

### 1.4.1 Pertes physiques

Le photon qui possèdent une longueur d'onde supérieure à celle associée au gap du semi-conducteur ( $\lambda_{ph} > \lambda_g$ ), ne peuvent pas générer des paires électrons-trous et sont donc perdus.

Le photon d'énergie supérieure au gap, ne peuvent générer qu'une seule paire électron-trou, l'excès d'énergie supérieure à la longueur de la bande interdite, est dissipé sous forme de chaleur (thermalisation).

Facteur de tension ( $\frac{qV_{co}}{E_g}$ ), c'est le rapport de la énergie maximale développée par la cellule par l'énergie de gap. La tension aux bornes de la cellule n'est qu'une fraction de l'énergie de gap à cause notamment de la chute de potentiel au niveau des contacts et de la jonction, les meilleures valeurs obtenues de  $V_{OC}$  sont de l'ordre de 700mV [11].

Le facteur de forme, ne peut dépasse 0.86 [10], car les courbes courant-tension sont générées par les équations de Boltzmann sous forme exponentielle ( $\exp(qV/kT)$ ), donc il n'existe pas des courbes  $I(V)$  de forme rectangulaire, même dans le cas d'une cellule idéale (voir la figure 1.9). Ce paramètre dépend également de la conception de la cellule, de la qualité de la jonction des matériaux utilisés, de la résistivité des contacts métalliques, etc.

Ces facteurs physiques étant considérés comme limitatifs pour une structure donnée de cellules photovoltaïque, les facteurs technologiques sont les seuls acteurs qui peuvent améliorer le rendement de la cellule.

### 1.4.2 Pertes technologiques

Le rendement de la cellule photovoltaïque dépend à la base du nombre des photons incidents. Cette quantité d'énergie est limitée par le coefficient de réflexion de la surface de la cellule  $R$ , qui pondère toutes les équations de photo-courant de génération par un facteur  $(1-R)$ , le coefficient de réflexion peut être optimisé par la mise en œuvre des traitements de surface appropriés et de couche antireflet.

Les contacts métalliques présents sur la face avant de la cellule afin de collecter les porteurs, entraîne des pertes de puissance car ils couvrent des parties de la surface réceptrice de la cellule (effet d'ombre). La largeur de métal, engendre un compromis entre les pertes dues à la couverture partielle de l'émetteur et les pertes de facteur de forme FF provoquées par la résistance série (liée à la largeur de la métallisation).

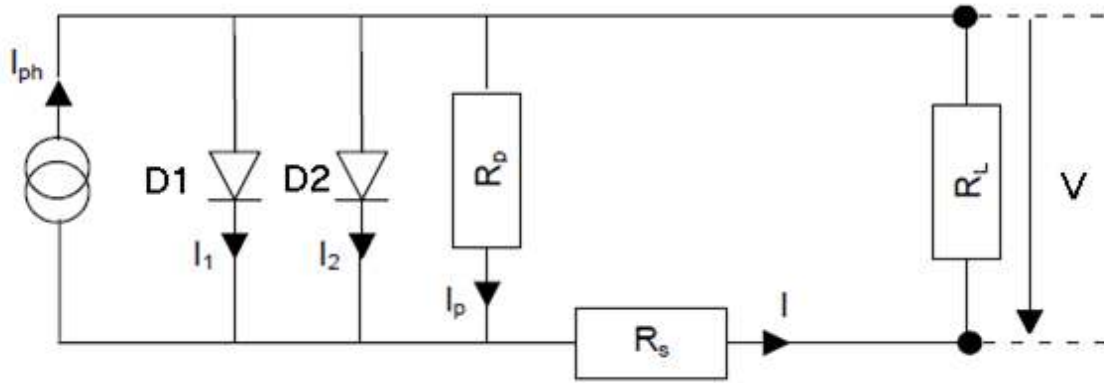
Il y a des photons, ayant l'énergie nécessaire pour créer une paire électron-trou, mais traversent l'épaisseur de la cellule sans être absorbés. Ce nombre de photons devient important surtout dans les cellules minces d'épaisseur ( $< 100 \mu\text{m}$ ). Ce phénomène réduit le rendement d'absorption, et peut être diminué en utilisant une couche réfléchissante sur la face arrière de la cellule (appelé réflecteur arrière ou miroir arrière « BSR ») [12].

Le rendement de collecte, c'est le rapport entre le nombre de porteurs de charge effectivement collectés, et le nombre des porteurs photo générés. En effet, certains porteurs se recombinent à la surface ou dans le volume de la cellule photovoltaïque. Ce phénomène est lié directement à la durée de vie  $\tau$  des porteurs minoritaires (le temps moyen entre la génération et la recombinaison d'un porteur minoritaire). Egalement ; il est possible d'améliorer la collecte par l'utilisation (diffusion) d'un champ arrière  $P^+$  dans le cas de la structure NP (BSF) [12].

Ces phénomènes peuvent être optimisés à l'aide des technologies de fabrication des cellules photovoltaïques.

## **1.5 Schéma électrique équivalent d'une cellule photovoltaïque**

La Figure 1.10 présente un modèle de la cellule photovoltaïque, prenant en compte les facteurs limitant le rendement, on trouve le générateur de courant  $I_{ph}$ , qui traduit le courant photo-généré ainsi que les résistances complémentaires,  $R_s$  et  $R_p$ , et deux diodes  $D_1$  et  $D_2$ .  $R_L$  est la résistance de charge [13].



**Figure 1.10:** schéma équivalent d'une cellule photovoltaïque.

L'équation de courant s'écrit :

$$I = I_1 + I_2 + I_p - I_{ph}.$$

$$I = I_{01} \left( e^{\frac{q(V-IR_s)}{n_1 kT}} - 1 \right) + I_{02} \left( e^{\frac{q(V-IR_s)}{n_2 kT}} - 1 \right) + \frac{V - IR_s}{R_p} - I_{ph} \quad (1.8)$$

$R_s$  la résistance série modélise résistance des différentes couches de la cellule (émetteur, base et contacts métallique). Pour limiter l'impact de cette résistance sur le courant de la cellule, il faut que sa valeur soit la plus faible possible. Ceci peut être réalisé en optimisant la surface de contact semi-conducteur/semi-conducteur et en réduisant la résistivité du matériau utilisé. Cependant, un dopage trop élevé entraîne une augmentation de la recombinaison des porteurs.

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

La première diode qui a un facteur d'idéalité  $n_1 \approx 1$  correspond au courant de diffusion dans la base et l'émetteur de la cellule.  $I_{01}$  C'est le courant de saturation de ce phénomène.

$I_2$  est le courant de génération-recombinaison ou d'effet tunnel dans la zone de charge d'espace, avec  $I_{02}$  le courant de saturation de ce phénomène et  $n_2 \approx 2$  le facteur d'idéalité de la deuxième diode.

## 1.6 Conclusion

Ce chapitre, nous a permis de comprendre le principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque, et de déduire la caractéristique courant tension et de présenter la nature des principaux facteurs limitant le rendement de conversion avec une modélisation de cette dernière par un circuit électrique.

# Chapitre 2 Les matériaux a base des semi-conducteurs III-V

---

## 2.1 Introduction

Les matériaux semi-conducteurs III-V sont des corps composés formés à partir d'un élément de la 3e colonne et d'un élément de la 5e colonne de la classification périodique. Parmi tous les composés binaires possibles, tous n'ont pas le même intérêt potentiel. L'étude de leurs propriétés, et en particulier de la structure de bandes, montre que les éléments les plus légers donnent des composés à large bande interdite, dont les propriétés se rapprochent de celles des isolants, et à structure de bande indirecte. Les composés incluant du bore, de l'aluminium, ou de l'azote, et le phosphore de gallium GaP entrent dans cette catégorie ; ils ont en général peu d'intérêt pour l'électronique rapide, qui demande des semi-conducteurs à forte mobilité de porteurs, ou pour l'optoélectronique où une structure de bande directe est nécessaire pour que les transitions optiques soient efficaces. A l'autre extrémité, les éléments lourds comme le thallium ou le bismuth donnent des composés à caractère métallique. On considérera donc essentiellement les composés à base de gallium (GaAs), ou d'indium (InAs), dont les propriétés sont les plus intéressantes.

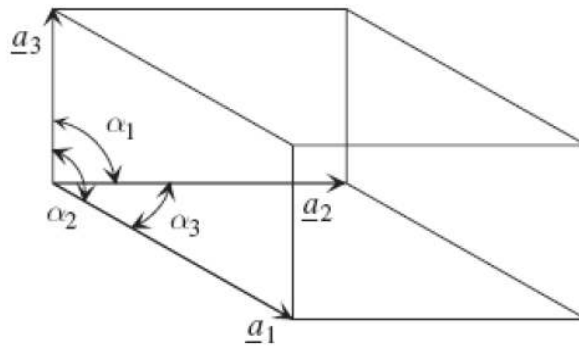
I	II	III	IV	V	VI
		B	C	N	O
		Al	Si	P	S
Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se
Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te

**Tableau 2.1** : Table abrégée périodique des éléments [15].

L'intérêt pratique des semi-conducteurs III-V est encore considérablement renforcé par la possibilité de réaliser des alliages par substitution partielle de l'un des éléments par un autre élément de la même colonne. On sait par exemple obtenir des alliages ternaires du type  $Ga_xAl_{(1-x)}As$ ,  $In_xGa_{(1-x)}As$ , ou quaternaires comme  $Ga_xIn_{(1-x)}As_yP_{(1-y)}$

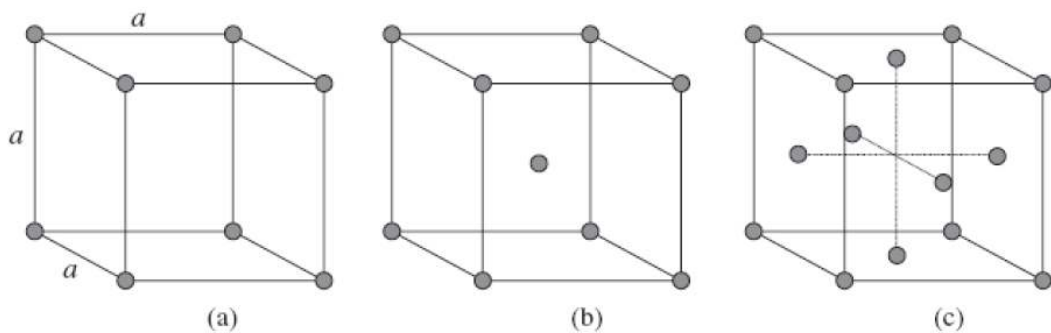
## 2.2 La structure cristalline des semi-conducteurs III-V

Les cristaux sont des arrangements réguliers périodiques des atomes en trois dimensions. « r » définissant les nœuds du cristal, correspondant aux positions atomiques (réseau de bravais) remplit les conditions  $r = ka_1 + la_2 + ma_3$ , ou k,l,m sont des nombres entiers et  $a_1, a_2, a_3$  sont des vecteurs qui désignent la maille élémentaire . Les réseaux de bravais peuvent être formés de manière à remplir tout l'espace si les angles  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$  prennent des valeurs à partir d'un ensemble discret ( $60^\circ, 90^\circ, 120^\circ$ , ou la valeur complémentaire à  $360^\circ$ ). Selon l'ampleur relative de  $a_1, a_2, a_3$  et pour les angles  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ , on peut démontrer l'existence de 14 réseaux de base [14].



**Figure 2.1** : Maille élémentaire

Dans les semi-conducteurs, on peut définir deux réseaux qui sont les plus importants actuellement dans le domaine de la technologie, à savoir le cube et l'hexagonal. La plupart des semi-conducteurs sont des cubes (exemples Si, Ge, GaAs, InP...), mais certains sont des (SiC, GaN). Trois types de réseaux de Bravais cubiques existent : le cubique simple, le cubique à face centrée et cubique centrée [14].



**Figure 2.2** : Types de réseaux de Bravais cubiques ;a) cubique simple b) cubique centré c) cubique a faces centrées

### 2.2.1 Les structures des semi-conducteurs :Diamant, Zinc-blende et Wurtzite

La cellule cubique diamant comprend 8 atomes, en effet, si l'on constate la figure (2.3), les atomes des coins contribuent chacune avec huit cellules adjacentes, de sorte que seulement  $8/8 = 1$  atome appartient à la cellule principale. La moitié des

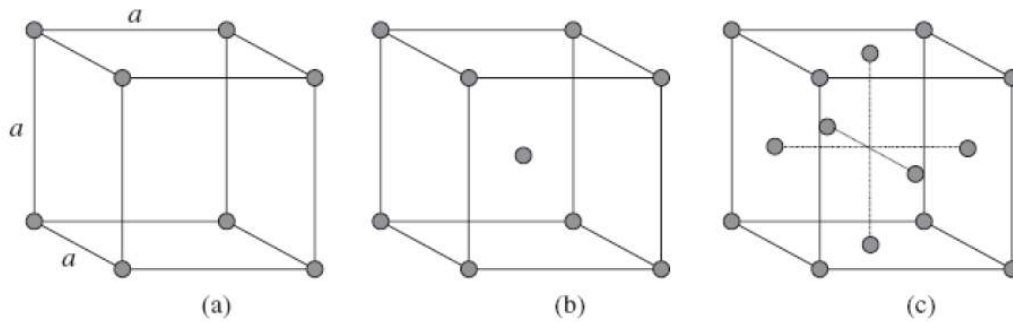
atomes situés sur les faces appartiennent à la cellule principale, l'autre moitié aux cellules les plus proches, de sorte que seulement 3 atomes appartiennent à la cellule principale, Alors que les autres ; 4 atomes internes appartiennent entièrement à la cellule. Par conséquent, le nombre total d'atomes dans une cellule est de 8. Dans la cellule Diamant, chaque atome est relié à ses voisins par une liaison tétraédrique. Tous les atomes sont les mêmes (C, Si, Ge...) dans le réseau cristallin du diamant, tandis que dans le réseau cristallin souvent appelé Zinc-blende, les atomes dans les deux mailles constituant la FCC sont différents (GaAs, Inp, SiC...). En particulier, les atomes du coin et de la face sont des métaux (par exemple, Ga) et les atomes internes sont non-métaux (par exemple, As), ou vice versa [14].

Dans les structures Diamant et Zinc-blende, les indices de Miller sont conventionnellement définis à l'égard de la cellule cubique de la face a. En raison de la symétrie des liaisons tétraédriques des atomes, plans (100) et (110), etc, deux liaisons de chaque côté, tandis que les plans (111) ont trois liaisons d'un côté, deux sur l'autre. En outre, la densité surfacique d'atomes est différente, conduisant, par exemple, à des vitesses différentes [14].

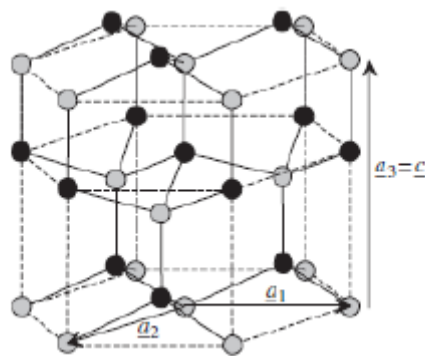
Certains semi-conducteurs, tels que le SiC et GaN, ont la structure cristalline hexagonale Wurtzite. Les réseaux hexagonaux admettent de nombreux poly-types. Selon l'empilement des couches successives d'atome, un grand nombre de poly-types existe, mais seulement quelques-uns ont des propriétés semi-conducteurs intéressantes (par exemple, 4H et 6H de SiC). La cellule Wurtzite est montrée dans la figure (2.4) ,12 atomes équivalents inclus. Dans le réseau idéal, on a :

$$|a_3| = c, |a_2| = |a_1| = a, \quad \frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}} \approx 1,633$$

Certaines propriétés des réseaux semi-conducteurs sont présentées au Tableau 2.1. Il peut être noté que ces semi-conducteurs basés sur Wurtzite sont souvent anisotrope (uni-axiaux) et ont deux constants diélectriques, l'un parallèle à l'axe C orthogonal [14].



**Figure.2.3** : La structure diamant (à gauche) et Zinc-blende (à droite). [16]



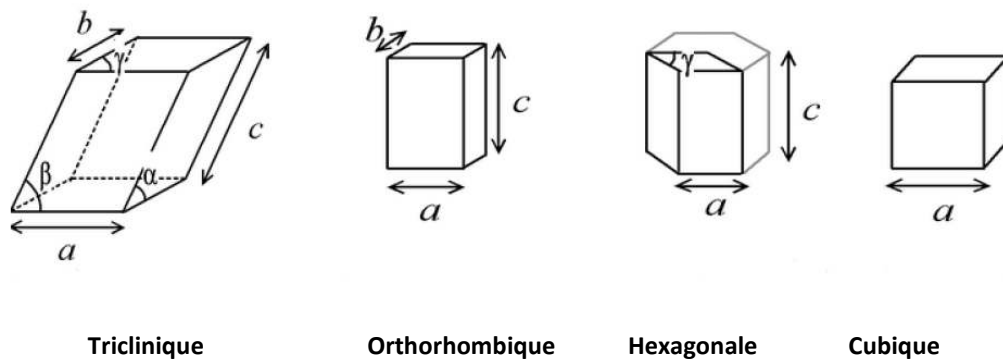
**Figure.2.4** La cellule Wurtzite hexagonale. L'axe C correspond à la direction du vecteur  $a_3 = c$  [14]

## 2.2.2 Le paramètre de maille

Les paramètres de maille  $a$  définissent la distance entre les atomes dans les réseaux cristallins. C'est un indicateur de compatibilité structurelle entre différents matériaux. Les constantes de réseau sont mesurées en nanomètres, et peuvent différer selon les axes de la structure cristalline pour les cristaux non-cubiques. L'adaptation de la constante de réseau est importante pour la croissance de couches minces de matériaux sur d'autres. Lorsque les deux constantes sont trop différentes, la couche subit des contraintes provoquant des défauts cristallins dans les couches

épitaxiales. Dans le cas plus complexe, le réseau triclinique, on a 6 paramètres : trois dimensions  $a, b$  et  $c$ , et trois angles  $\alpha, \beta$  et  $\gamma$ . Dans le cas du réseau cubique, on ne cite qu'un paramètre de maille,  $a$  (car  $a = b = c$ , et  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ ). dans le cas d'un orthorhombique, on n'en cite que trois  $a, b$  et  $c$  (car  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ ) et dans le cas de l'hexagonal, on en cite également trois,  $a, c$  et  $\gamma = 120^\circ$  (car  $a = b$ , et que  $\alpha = \beta = 90^\circ$ ) [15].

la Figure (2.5) illustre les différents cas cités précédemment.



**Figure 2.5 :** Les différentes structures cristallines selon leurs paramètres de mailles.

### 2.3 Le paramètre de maille à base des semi-conducteurs III-V

Le paramètre de maille d'un alliage à base des semi-conducteurs III-V dépend fortement de la nature des éléments chimiques mis en jeu. Une maille cristalline est d'autant plus grande que le numéro atomique des éléments constituants est grand. Ainsi dans les cas des structures ternaires et quaternaires, l'incorporation d'indium dans la maille cristalline de GaSb augmente le paramètre de maille  $a$  du ternaire ainsi l'incorporation de l'aluminium ou l'arséniure dans le ternaire accroît ces paramètres de maille afin de créer un alliage quaternaire. Pour le ternaire, on considère ces variations comme quasi-linéaires et données par les lois suivantes [16]:

Le tableau 2.1 [18] donne le paramètre de maille des alliages binaires semi-conducteurs III-V utilisés dans ce travail.

	GaSb	GaAs	InSb	InAs	AlSb	AlAs
a(A°)	6.0954	5.6532	6.4794	6.0584	6.1355	5.6622

**Tableau 2.2:** Paramètre de maille  $a$  des matériaux binaires GaSb, GaAs, InSb, InAs, AlSb, AlAs

### 2.3.1 Loi de Vegard pour un ternaire

$$a_{Ga_{(1-x)}In_xSb} = xa_{InSb} + (1-x)a_{GaSb} \quad (2.1)$$

### 2.3.2 Loi de Vegard pour un quaternaire

- Cas d'un mélange de 4 binaires comme GaInAsSb :

$$a_{(Ga_{(1-x)}In_xAs_{(1-y)}Sb_y)} = xy a_{(InSb)} + (1-x)y a_{(GaSb)} + x(1-y) a_{(InAs)} + (1-x)(1-y) a_{(GaSb)} \quad (2.2)$$

- Cas d'un mélange de 3 binaires comme GaInAlSb :

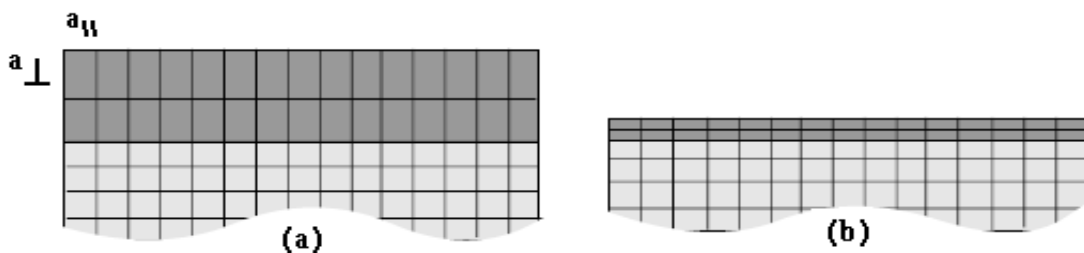
$$a_{(Ga_yIn_{(1-x-y)}Al_xSb)} = xa_{(AlSb)} + ya_{GaSb} + (1-x-y) \quad (2.3)$$

## 2.4 Notion de couche contrainte et épaisseur critique

### 2.4.1 Couche contrainte

Lors de l'épitation d'un matériau sur un substrat de paramètre de maille différent, un désaccord paramétrique est généré. Ce désaccord peut être rattrapé de deux façons différentes [18] :

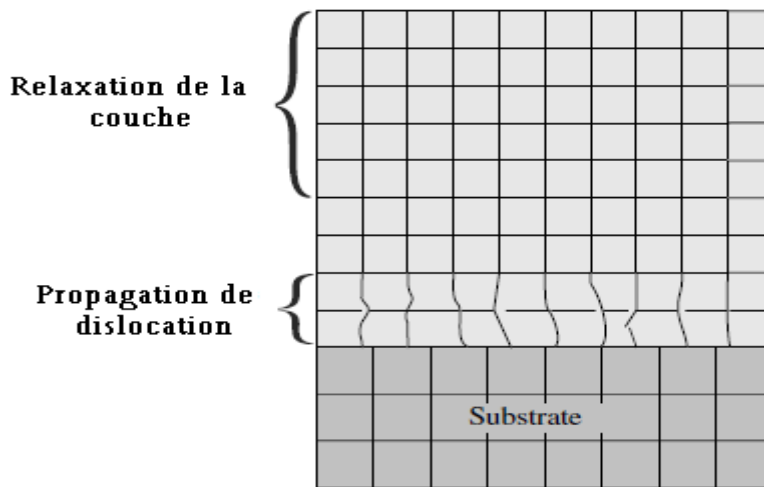
- Dans le cas où les couches épitaxiales sont suffisamment fines, la maille du matériau épitaxial (ANNEXE) se déforme de manière élastique de telle sorte que le paramètre de maille s'accorde au paramètre du substrat dans la direction parallèle à l'interface. Dans la direction perpendiculaire à l'interface de croissance le réseau se déforme en s'allongeant ou se comprimant selon que le paramètre de maille de la couche est plus petit ou plus grand que celui du substrat. Dans ce cas la couche est considérée comme étant totalement contrainte (figure 2.6).



**Figure 2.6 :** Couche totalement contrainte a) cas ( $a_{epitax} > a_{sub}$ ) compression, b) cas ( $a_{epitax} < a_{sub}$ ) allongement.

- Dans le cas d'une couche épitaxiale plus épaisse, la déformation de la maille du matériau ne suffit plus à équilibrer l'énergie mécanique engendrée par la croissance. Le désaccord est alors rattrapé par la génération de dislocations à l'interface de

croissance. Ces dislocations se propagent du substrat vers l'interface de croissance et la couche commence à relaxer.



**Figure 2.7** : Propagation de dislocation dans la couche épitaxie épaisse.

#### 2.4.2 Epaisseur critique $h_c$

L'épaisseur au-delà de laquelle la couche épitaxie commence à relaxer est appelée épaisseur critique. Cette épaisseur critique dépend des propriétés mécaniques des matériaux (coefficients élastiques  $C_{ij}$ ), ainsi que du degré de désaccord paramétrique  $\Delta_a$  (équation 2.4) entre le substrat et la couche épitaxie. Si l'épaisseur de la couche épitaxie dépasse la valeur de l'épaisseur critique, les mailles ne subissent plus les contraintes mécaniques imposées par le substrat et le paramètre de maille atteint celui du matériau massif. Le réseau est totalement relaxé [19].

Pour calculer l'épaisseur critique du système le modèle le plus classique, celui de K. Koksai et B. Gonul [21], Qui traite le cas d'un matériau faiblement désaccordé par rapport au substrat. Il définit l'épaisseur critique comme l'épaisseur à partir de laquelle une dislocation initialement présente à l'interface de contact se propage latéralement sous l'effet du champ de contrainte. La valeur de l'épaisseur critique  $h_c$  qui en résulte dans le cas d'un matériau de structure sphalérite (blende de zinc) épitaxié sur la surface (001) est donnée par l'équation suivante [21] :

$$h_c = \frac{a_{epit}}{k \cdot \sqrt{2} \cdot \pi \cdot \Delta_a} \times \frac{1 - (0.25 \cdot \gamma)}{(1 + \gamma)} \times \ln \left( \frac{h_c \cdot \sqrt{2}}{a_{epit}} + 1 \right) \quad (2.4)$$

$a_{epit}$  : Paramètre de maille de la couche relaxée.

$\Delta_a$  : Désaccord paramétrique.

$\gamma$  : Coefficient de Poisson donné par :

$$\gamma = \frac{C_{12}}{C_{11} + C_{12}} \quad (2.5)$$

$C_{ij}$  : Les coefficients élastiques ( $\text{cm}^{-2}$ ).

$k$  : est un coefficient égal à 1 dans le cas d'un super-réseau ; à 2 pour un puits quantique ; 4 dans le cas d'une couche unique.

## 2.5 Effet de la contrainte sur les semi-conducteurs III-V

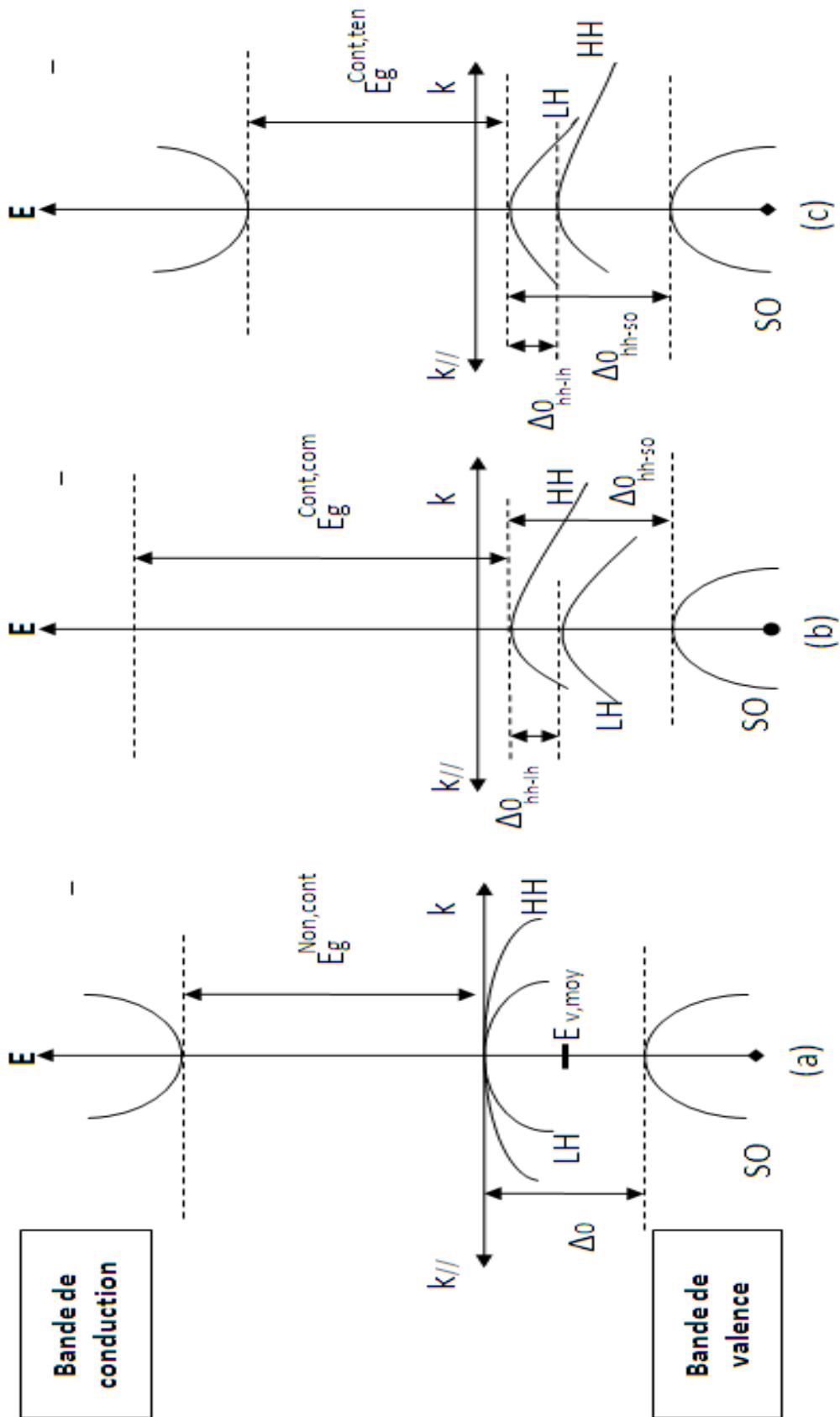


Figure 2.8: Structure de bande d'un semi-conducteur à Gap direct  
a) Non contraint b) Contraint en compression c) Contraint en tension

### 2.5.1 Effet de la contrainte sur le gap

Pour la description de l'effet de la contrainte sur la structure de bande on utilise le modèle de Van et Walle et le formalisme de Krijin [21]. Les deux composantes parallèle et perpendiculaire du tenseur de la déformation peuvent être définies de la manière suivante :

$$\varepsilon_{\parallel} = \frac{a_{\parallel} - a}{a} \quad (2.6)$$

$$\varepsilon_{\perp} = \frac{a_{\perp} - a}{a} \quad (2.7)$$

Pour une structure totalement contrainte:

$$a_{\parallel} = a_{sub} \quad (2.8)$$

$$\varepsilon_{\perp} = -2 \times \frac{C_{12}}{C_{11}} \times \varepsilon_{\parallel} \quad (2.9)$$

L'effet de la contrainte bi-axiale sur la structure de bandes de la couche épitaxiée est illustré sur la (figure 2.8). Cette figure présente la structure de bandes d'un semi-conducteur à Gap direct dans les trois cas possibles, non contraint, contraint en compression et finalement contraint en tension.

En absence de contrainte, les bandes de trous lourds et de trous légers sont isotropes et dégénérées au centre de la zone de Brillouin (ANNEXE1), et la bande de trous spin-splittée est située à une énergie  $\Delta_0$  en dessous de ces deux bandes. Le

centre de gravité de la bande de valence d'énergie moyenne  $E_{V,moy}$  se trouve par conséquent à  $\frac{\Delta_0}{3}$  au dessous du haut de la bande de valence en  $k=0$  (figure 2.8.a).

$$E_{V,moy} = \frac{E_{HH} + E_{LH} + \Delta_0}{3} \quad (2.10)$$

$E_{HH}$ : Energie de la bande de trous lourds.

$E_{LH}$ : Energie de la bande de trous légers.

$\Delta_0$ : Energie de décalage des bandes des trous spin-splittée.

L'effet de la contrainte sur les bandes de valence et de conduction peut être décomposé en deux parties :

La composante hydrostatique, liée à la déformation selon l'axe de croissance, provoque un décalage du centre de gravité de la bande de valence ainsi que le centre de gravité de la bande de conduction.

La contrainte de cisaillement, qui lève la dégénérescence des états énergétiques des trous lourds et des trous légers en  $k = 0$  (typiquement d'une valeur  $\Delta_{hh-lh}$  de l'ordre de 60-80 meV pour un désaccord paramétrique de 1%).

Pour une couche épitaxie soumise à une contrainte bi-axiale de compression, la composante hydrostatique augmente l'écart entre la bande de valence et la bande de conduction, et la contrainte de cisaillement rend les bandes de valence fortement anisotropes [24] ; la bande de plus haute énergie devient lourde selon  $k_{\perp}$  et légère selon  $k_{\parallel}$  (bande HH). La bande d'énergie inférieure devient elle légère selon  $k_{\perp}$  et lourde selon  $k_{\parallel}$  (bande LH)

Si la couche est soumise à une contrainte bi-axiale de tension, le gap moyen diminue et les bandes de valences sont inversées par rapport à celles d'une couche en compression ; la bande de plus haute énergie (bande LH) restant légère selon  $k_{\perp}$  et lourde selon  $k_{\parallel}$ .

Les décalages énergétiques des centres de gravité de la bande de valence et de la bande de conduction en  $K=0$  induits par la contrainte hydrostatique, varient proportionnellement à la contrainte [21]:

$$\Delta E_{V,moy}^{hyd} = a_v(2\varepsilon_{\parallel} + \varepsilon_{\perp}) \quad (2.11)$$

$$\Delta E_c^{hyd} = a_c(2\varepsilon_{\parallel} + \varepsilon_{\perp}) \quad (2.12)$$

Avec  $a_c$  et  $a_v$  les potentiels hydrostatiques de déformation pour la bande de conduction et la bande de valence respectivement.

Les décalages énergétiques induits par la contrainte de cisaillement dans chacune des bandes constituant la bande de valence sont les suivants, dans le cas d'une croissance sur substrat(100) [22].

$$\Delta E_{hh}^{cisa} = -\frac{1}{2} \times \delta E^{cisa} \quad (2.13)$$

$$\Delta E_{lh}^{cisa} = -\frac{1}{2} \Delta_0 + \frac{1}{4} \delta E^{cisa} + \frac{1}{2} \cdot \sqrt{\Delta_0^2 + \Delta_0 \delta E^{cisa} + \frac{9}{4} (\delta E^{cisa})^2} \quad (2.14)$$

$$\Delta E_{so}^{cisa} = -\frac{1}{2} \Delta_0 + \frac{1}{4} \delta E^{cisa} - \frac{1}{2} \cdot \sqrt{\Delta_0^2 + \Delta_0 \delta E^{cisa} + \frac{9}{4} (\delta E^{cisa})^2} \quad (2.15)$$

avec :

$$\delta E^{cisa} = 2 \cdot b \cdot (\varepsilon_{\parallel} + \varepsilon_{\perp}) \quad (2.16)$$

où  $b$  est le potentiel de déformation tétragone.

En prenant comme référence énergétique  $E_{v,moy}$  (équation 2.10), et compte tenu des équations (2.11), (2.12), (2.13), (2.14), on peut définir l'énergie du haut de la bande de valence et l'énergie du bas de la bande de conduction.

$E_v$ : l'énergie du haut de la bande de valence est :

$$E_v = E_{v,moy} + \frac{\Delta_0}{3} + \Delta E_{v,moy}^{hyd} + \max(\Delta E_{hh}^{cisa}, \Delta E_{lh}^{cisa}) \quad (2.17)$$

$E_c$ : l'énergie du bas de la bande de conduction est :

$$E_c = E_{v,moy} + \frac{\Delta_0}{3} + E_g + \Delta E_c^{hyd} \quad (2.18)$$

Dans ces expressions  $E_{v,moy}$ , l'éclatement Spin-orbite  $\Delta_0$  et l'énergie de gap sont relatifs au matériau non contraint. via les équations (2.17) et (2.18) on peut déterminer l'équation du Gap contraint  $E_g^{cont}$  :

$$E_g^{cont} = E_c - E_v = E_g + \Delta E_c^{hyd} - \Delta E_{v,moy}^{hyd} - \max(\Delta E_{hh}^{cisa}, \Delta E_{lh}^{cisa}) \quad (2.19)$$

Pour une couche soumise à une contrainte en compression la bande des trous lourds est au-dessus de la bande des trous légers (figure2.8.b) et l'on a :

$$\max(\Delta E_{hh}^{cisa}, \Delta E_{lh}^{cisa}) = \Delta E_{hh}^{cisa}$$

Dans le cas d'une couche soumise à une contrainte en tension la bande des trous lourds est au-dessous de la bande des trous légers (figure2.8.c) et l'on a :

$$\max(\Delta E_{hh}^{cisa}, \Delta E_{lh}^{cisa}) = \Delta E_{lh}^{cisa}$$

Donc l'équation (2.18) devient pour une couche en compression :

$$E_g^{cont,com} = E_g + \Delta E_c^{hyd} - \Delta E_{v,moy}^{hyd} - \Delta E_{hh}^{cisa} \quad (2.20)$$

Et pour une couche en tension :

$$E_g^{cont,ten} = E_g + \Delta E_c^{hyd} - \Delta E_{v,moy}^{hyd} - \Delta E_{lh}^{cisa} \quad (2.21)$$

La détermination du Gap contraint nécessite la connaissance du Gap non contraint  $E_g$  et l'éclatement spin-orbite  $\Delta_0$  de la couche relaxée, les constantes élastiques  $C_{ij}$  de la couche, les potentiels de déformation hydrostatique  $a_c$  et  $a_v$ , ainsi que le potentiel de déformation tétragone  $b$ . ces paramètres sont répertoriés en ANNEXE pour les composés III-V binaires.

Dans la cas où la couche contrainte est une solution solide ternaire (exemple  $A_{(1-x)}B_xC$ ), ces paramètres peuvent être déterminés par interpolation linéaire, sauf pour les énergies  $E_g$  et  $\Delta_0$  qui sont déterminées par l'expression suivante :

$$E_{A_{(1-x)}B_xC} = (1-x)E_{AC} + xE_{BC} - x(1-x)C_{AC-BC}$$

avec :

$E$  : est  $E_g$  ou  $\Delta_0$ .

$C_{AC-BC}$  : Terme de Boeing.

## 2.5.2 Coefficient d'absorption pour un gap direct

Grace au gap direct qui caractérise les semi-conducteurs III-V, ces derniers prennent une grande partie d'application photovoltaïque car les transition entre bande de valence et de conduction sont directes.

Le model suivant du coefficient d'absorption ne prend en considération que les transitions directes.

$$\alpha = ((5 \cdot 10^5) / E_{Ph}) \cdot (\sqrt{E_{Ph} - E_g})$$

### 2.5.3 Mécanisme de conduction

La densité de courant dans la structure, est donnée par la somme des densités suivantes :

$$\vec{J} = \vec{J}_{PH} + \vec{J}_{TE} + \vec{J}_{dif} + \vec{J}_{dr} + \vec{J}_{ss} \quad (2.22)$$

avec

$j_{TE}$ : Courant thermo-électronique (thermionic emission current).

$j_{dif}$ : Courant de diffusion des porteurs minoritaires.

$j_{PH}$ : Courant photo généré

$j_{dr}$ : Courant de recombinaison dans la région de déplétion du semi-conducteur (déplétion-région-recombination -current).

$j_{ss}$ : Courant de recombinaison dû aux états de surface (surface-state recombination current).

La contribution des courants  $j_{tun}$ ,  $j_{dr}$ ,  $j_{ss}$  est négligeable devant celle de  $j_{TE}$  et  $j_{dif}$ .

$$j = j_{TE} + j_{dif} \quad (2.23)$$

➤ Le courant thermoélectronique est donné par :

$$j_{TE} = j_s \left( e^{\frac{eV}{kT}} - 1 \right) \quad (2.24)$$

avec :

$$j_s = A^* T^2 \times e^{-\left(\frac{eB}{kT}\right)} \quad (2.25)$$

$j_s$ : Courant de saturation.

➤ Le courant de diffusion des porteurs minoritaires est donné par :

$$j_{dif} = j_0 \left( e^{\frac{qV}{KT}} - 1 \right) \quad (2.26)$$

avec :

$$j_0 = \frac{qP_{n_0}D_P}{L_P} \quad (2.27)$$

$D_P$ : Constante de diffusion des trous.

$L_P$ : Longueur de diffusion des trous.

$V$  :Tension de polarisation

On remplace (3.25) et (3.27) dans l'équation (3.28) la caractéristique courant tension à l'obscurité de la structure MIS est exprimée par :

$$j(V) = j_s \left( e^{\frac{eV}{KT}} - 1 \right) + j_0 \left( e^{\frac{qV}{KT}} - 1 \right) \quad (2.28)$$

## 2.6 Conclusion

Il est essentiel de faire l'étude fondamentale des semi-conducteurs III-V et de connaître leurs propriétés, pour bien savoir comment utiliser ces propriétés pour améliorer le rendement des structures à semi-conducteurs dans les dispositifs optoélectroniques.

## Chapitre 3 Simulation de la structure solaire

---

### 3.1 Introduction

La simulation numérique est toujours utilisée pour optimiser des cellules solaires, afin de décrire le comportement des composants électroniques. Cette méthode nous permet de confronter les résultats avec l'expérience, de ce fait la simulation numérique est indispensable avant la réalisation.

Ce chapitre est consacré à la simulation et la détermination des caractéristiques des deux structures  $\text{Ga}_{(1-x)}\text{In}_{(x)}\text{As}_{(1-y)}\text{Sb}_{(y)}/\text{Ga}_{(1-x)}\text{In}_{(x)}\text{Sb}$  et  $\text{Al}_{(x)}\text{Ga}_{(y)}\text{In}_{(1-x-y)}\text{Sb}/\text{Ga}_{(1-x)}\text{In}_{(x)}\text{Sb}$  afin d'avoir les pourcentages adéquats des éléments qui rentre dans la composante. Ces simulations nous permettent aussi de faire une comparaison concluante entre les deux structures afin de choisir la meilleure entre elles pour la réalisation de notre cellule photovoltaïque.

### 3.2 Simulation de la structure $\text{Ga}_{(1-x)}\text{In}_{(x)}\text{Sb}/\text{GaInAsSb}$ :

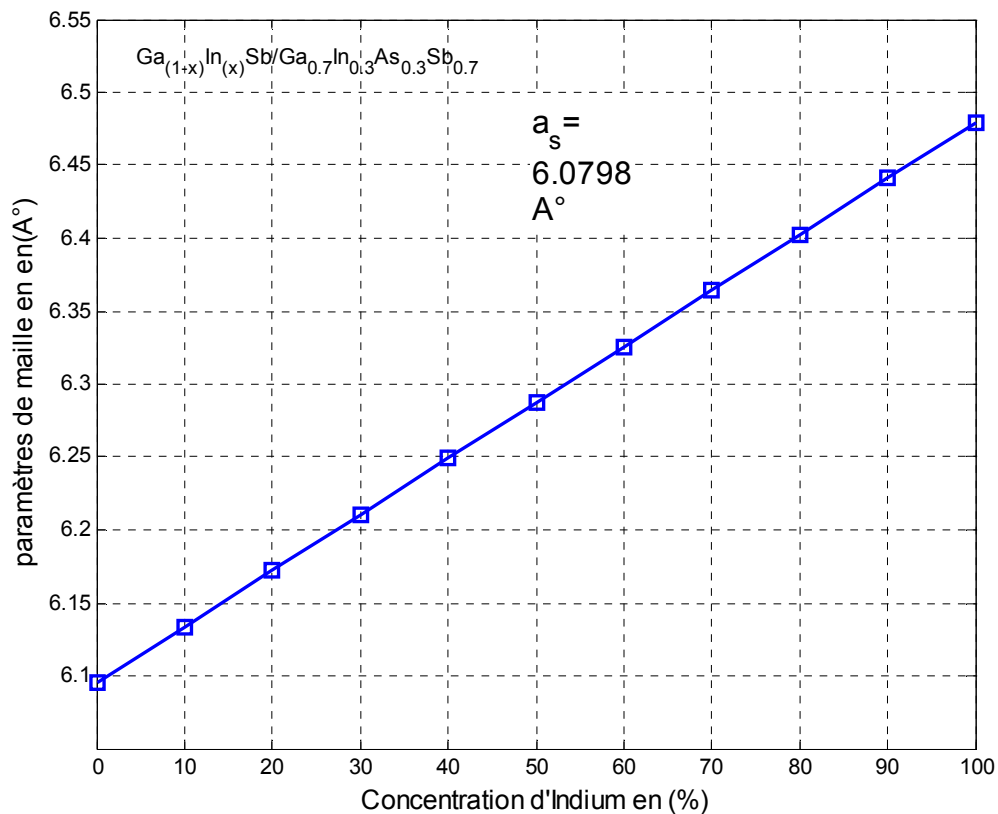
#### 3.2.1 Paramètre de maille du ternaire $\text{Ga}_{(1-x)}\text{In}_{(x)}\text{Sb}$ :

Pour déterminer l'effet de la concentration d'indium sur le paramètre de maille de l'alliage  $\text{In}_{(x)}\text{Ga}_{(1-x)}\text{Sb}$ , on a utilisé la loi de Végard.

On constate que le paramètre de maille de la structure  $\text{Ga}_{(1-x)}\text{In}_{(x)}\text{Sb}$  augmente de 6% sur tout l'intervalle  $[0, 1]$ , cette augmentation est due à la force de torsion appliqué sur le paramètre de maille du GaSb, car on constate, pour  $x=0$ , le paramètre

de maille de la structure est égale au celui du GaSb. En ajoutant l'indium qui est caractérisé par un paramètre de maille plus grand que celui du GaSb dans l'alliage, l'InSb impose sa maille au GaSb, donc ce dernier subi une force de torsion et augmente jusqu'à 6.479 Å, pour x=1.

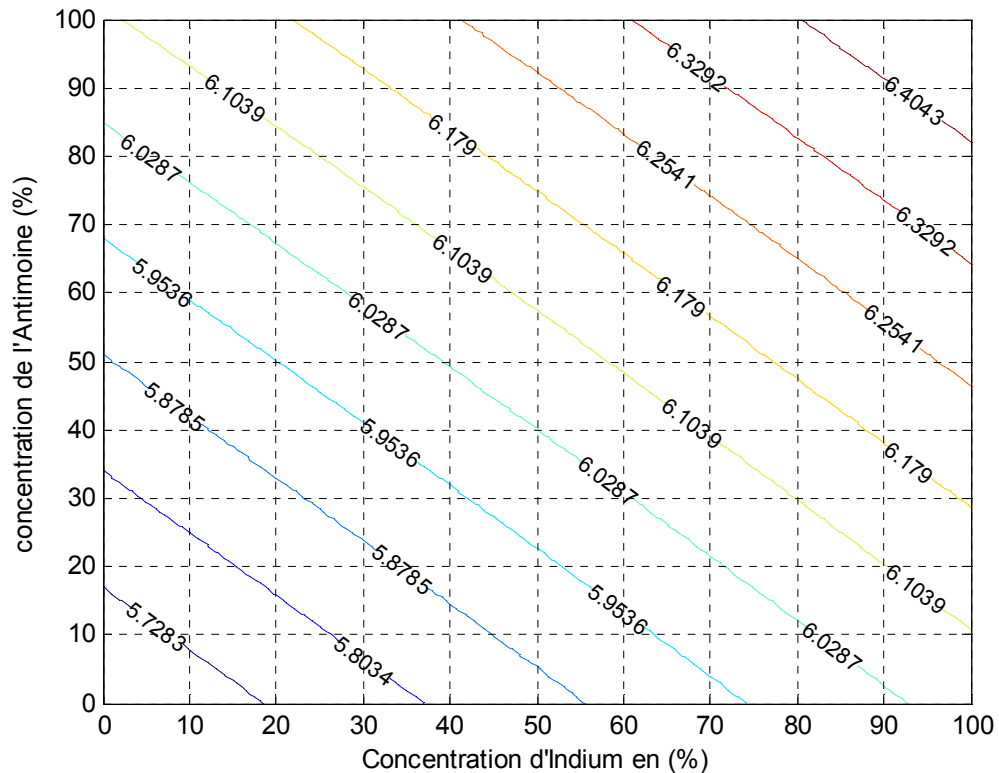
La Figure.3.1 montre la variation du paramètre de maille  $Ga_{(1-x)}In_xSb$  en fonction de la composition x de l'indium.



**Figure.3.1 :** Le paramètre de maille de la structure  $Ga_{(1-x)}In_xSb$  en fonction de la composition x de l'indium.

### 3.2.2 Paramètre de maille du quaternaire :

Nous avons varié les concentrations d'indium et l'antimoine sur l'intervalle [0,1] dans le quaternaire  $Ga_{(1-x)}In_xAs_{(1-y)}Sb_y$ , on constate une augmentation d'environ 0.4 Angström sur tout l'intervalle des concentrations de l'indium, et un accroissement de 0.8 Angström sur tout l'intervalle de l'antimoine. (Figure3.2).

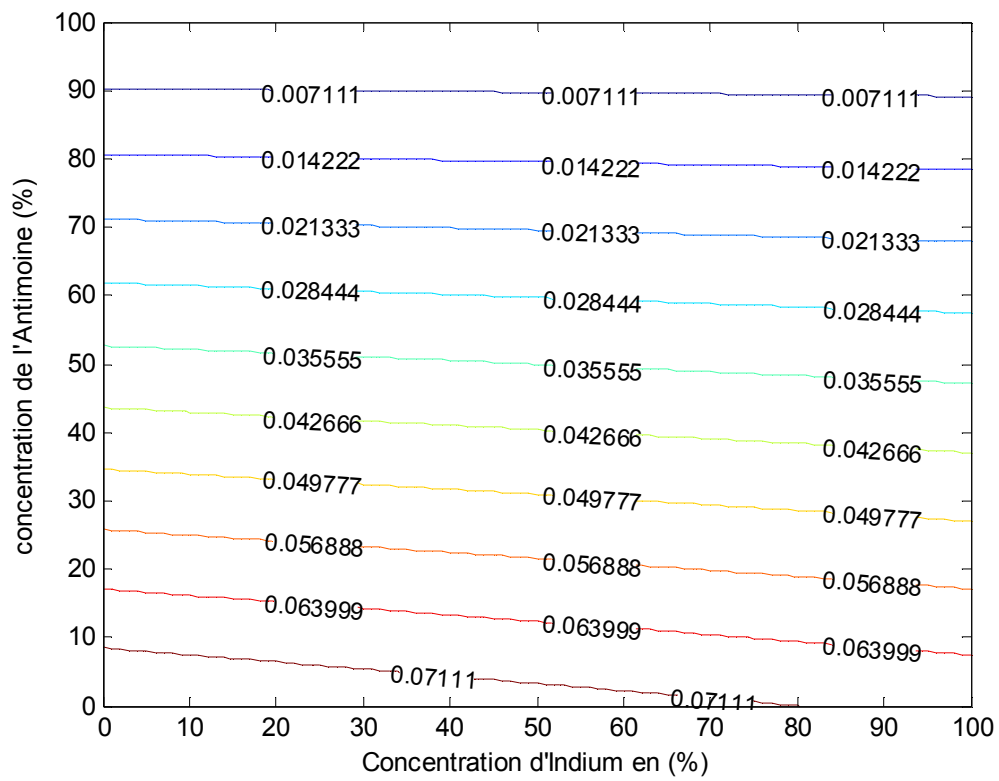


**Figure.3.2** : Les paramètres de maille de la structure GaInAsSb en fonction de la composition x de l'indium et y en antimoine.

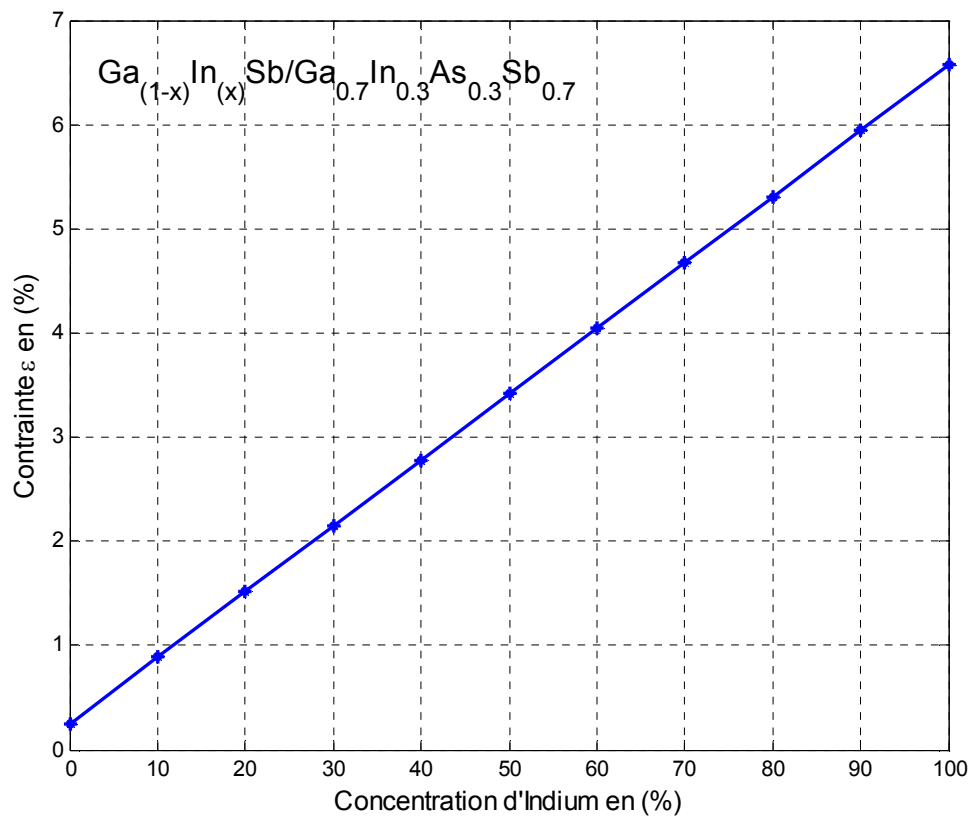
### 3.2.3 Le désaccord de maille

La figure 3.3 nous montre la variation du désaccord de maille entre le quaternaire et le ternaire ( $Ga_{(1-x)}In_{(x)}As_{(1-y)}Sb_{(y)}/Ga_{(1-x)}In_{(x)}Sb$ ) en fonction de la variation des concentrations de l'indium et l'antimoine dans le ternaire et le quaternaire, on remarque un faible désaccord quel que soit la concentration d'indium. Et un meilleur désaccord est obtenu sur l'intervalle [0.65 1] pour les concentrations d'antimoine.

D'après cette simulation, On a fixé la concentration de l'antimoine à 70% qui nous donne un meilleur accord, et le choix de 30% d'indium revient au cout élevé de cet élément.



**Figure 3.3** : Variation du désaccord en fonction des l'indium et de l'antimoine dans le quaternaire.



**Figure 3.4** : Variation du désaccord en fonction de l'indium dans le ternaire.

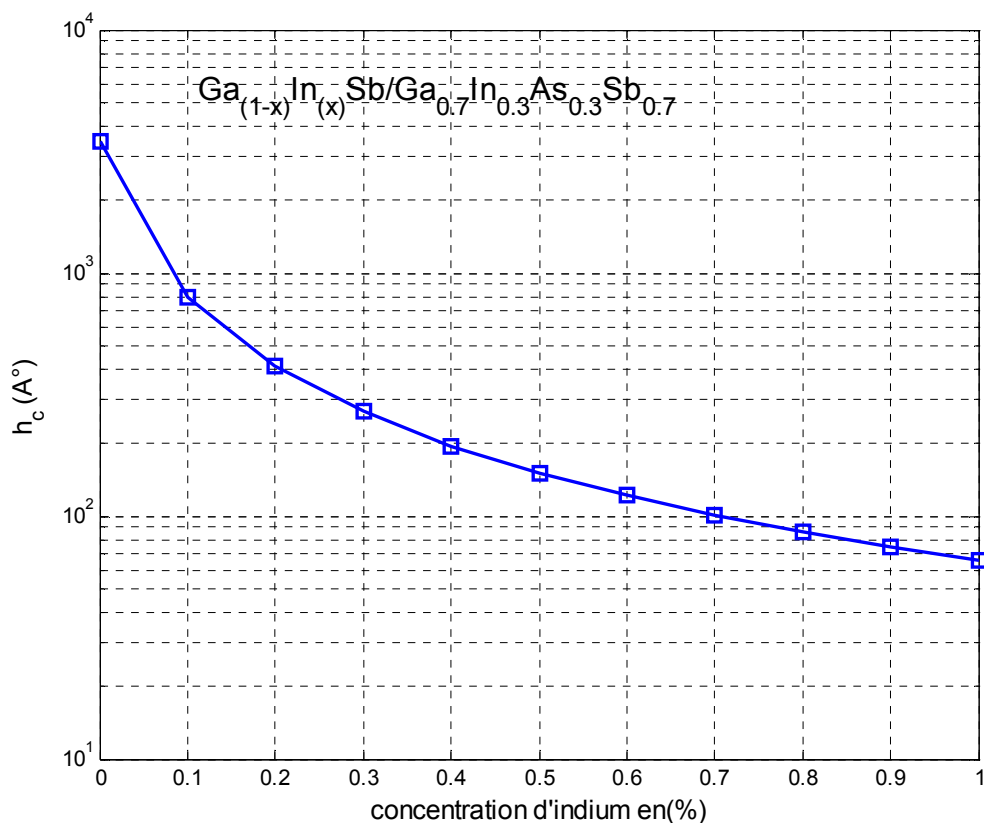
Après le choix des concentrations adéquates, une deuxième simulation du désaccord a été réalisée en 2D (figure3.4) tout en variant la concentration d'indium dans le ternaire sur l'intervalle [0,1].

On note une augmentation de 7% sur tout l'intervalle de x et les meilleurs valeurs de désaccord sont obtenus pour des concentrations inférieures à 30%, on note aussi qu'il y a une seule contrainte (contrainte en compression) quel que soit la concentration d'indium.

### 3.2.4 Epaisseur critique $h_c$

On rappelle, que pour le calcul de l'épaisseur critique de la couche  $Ga_{(1-x)}In_xSb$ , on a utilisé le modèle de K. Koksai et B. Gonul, Qui traite des matériaux faiblement désaccordés ( $\epsilon < 2\%$ ). au faites Il définit l'épaisseur critique comme l'épaisseur à partir de laquelle une dislocation initialement présente à l'interface de contact se propage latéralement sous l'effet du champ de contrainte. La figure suivante montre la variation de l'épaisseur critique en fonction de la concentration de l'indium dans le ternaire.

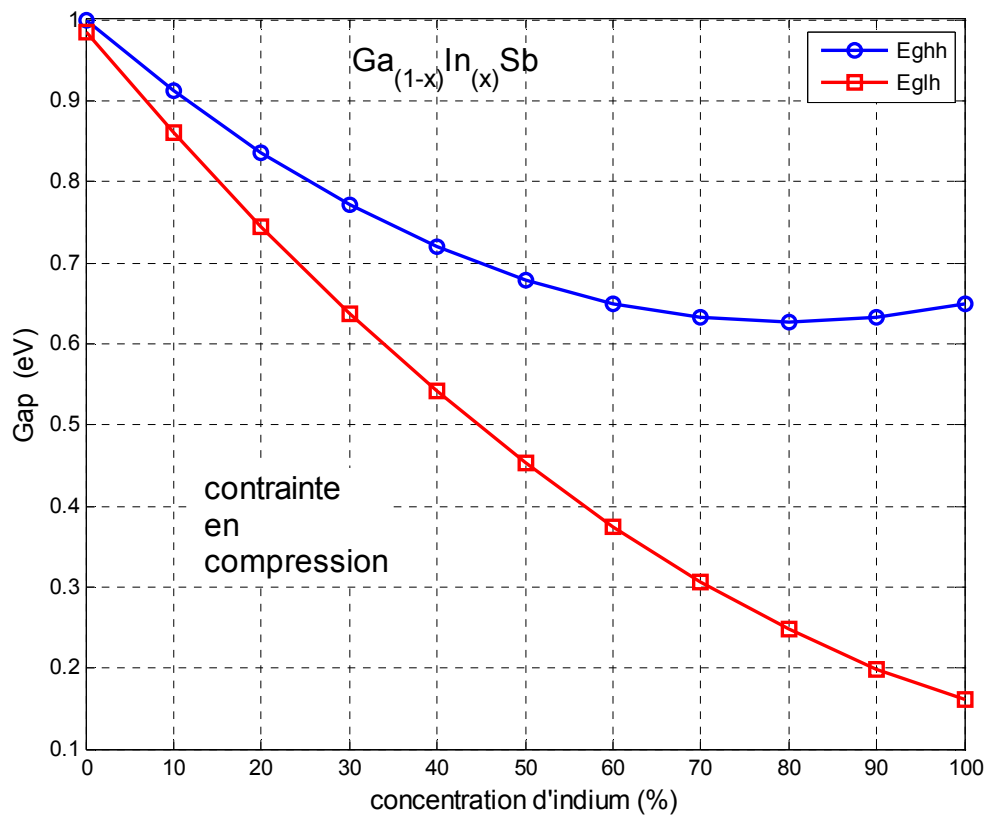
Une diminution de l'épaisseur critique avec l'augmentation de la concentration d'indium a été observé tandis que les meilleurs résultats sont obtenues pour  $x < 30\%$ .



**Figure.3.5** : L'épaisseur critique en fonction de la composition x de l'indium.

### 3.2.5 L'effet de la contrainte sur le gap :

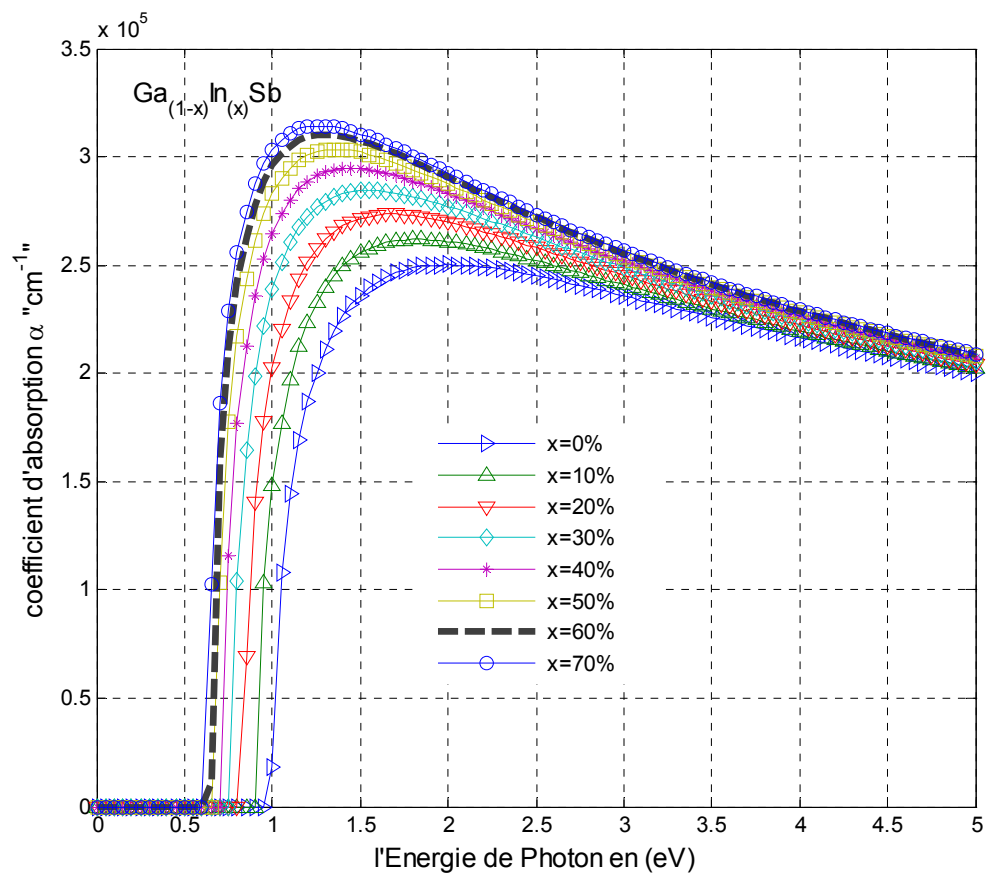
La Figure 3.6 montre la variation du gap de l'alliage  $\text{Ga}_{(1-x)}\text{In}_{(x)}\text{Sb}$  contraint sur le quaternaire  $\text{Ga}_{(1-x)}\text{In}_{(x)}\text{As}_{(1-y)}\text{Sb}_{(y)}$ , on remarque une réduction de la largeur de la bande interdite avec l'augmentation de la concentration d'indium, et comme nous avons une seule contrainte (contrainte en compression), on remarque que le gap des trous lourds ( $E_{\text{gh}}$ ) est toujours supérieur à celui des trous légers ( $E_{\text{lh}}$ ).



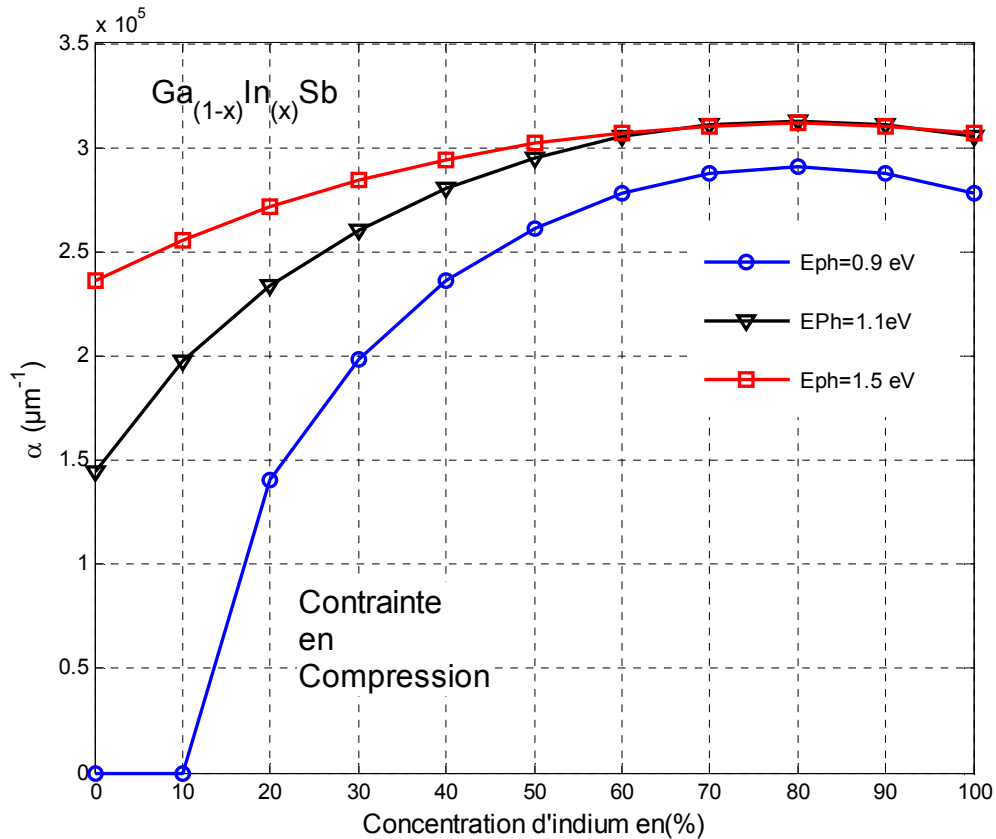
**Figure 3.6:** Variation du gap en fonction de la concentration d'indium.

### 3.2.6 L'effet de la contrainte sur le coefficient d'absorption :

Dans notre travail ,pour le coefficient d'absorption nous avons fait deux simulations, une definit la variation du coefficient d'absorption en fonction de l'énergie du photon incident sur le matériau pour plusieurs concentrations d'indium. Et l'autre représente la variation du coefficient d'absorption en fonction de la concentration de l'indium pour des énergies des photons incidents fixes .



**Figure 3.7:** Variation du coefficient d'absorption en fonction de l'énergie incidente.



**Figure 3.8:** Variation du coefficient d'absorption en fonction de la concentration d'indium.

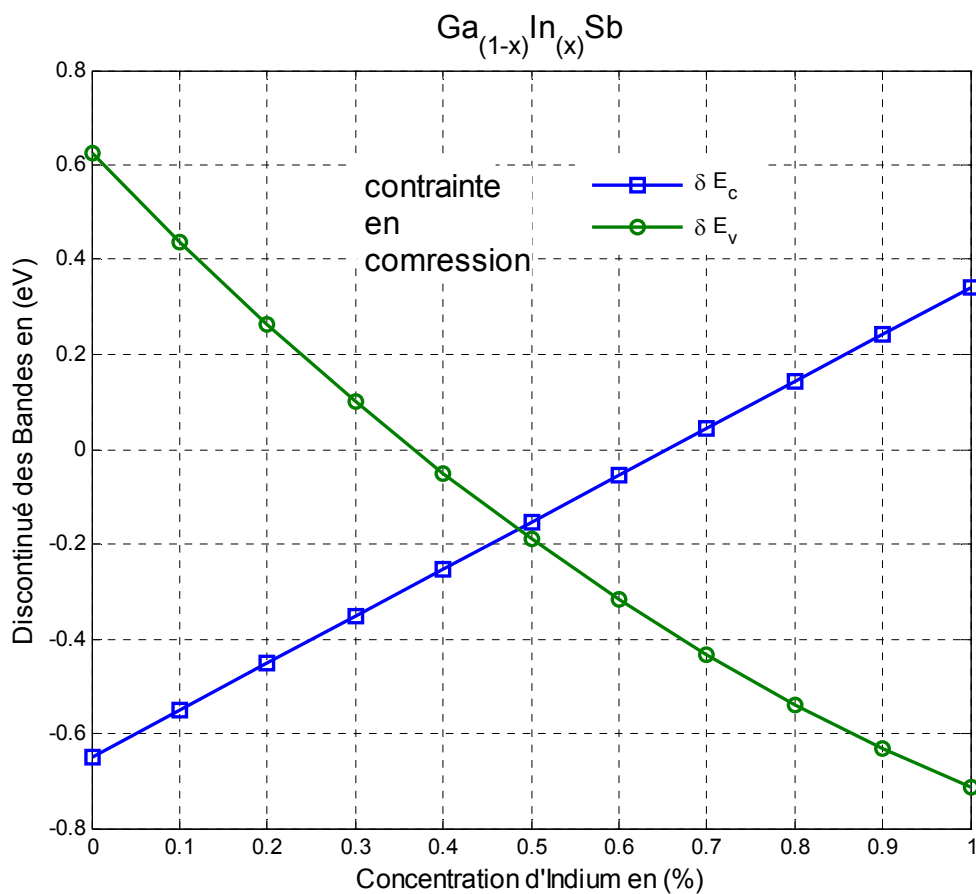
On remarque que pour les énergies inférieures à 0.6 eV le coefficient d'absorption est nul quelle que soit la concentration d'indium car cette énergie est insuffisante pour que les électrons puissent franchir la bande interdite de l'alliage ternaire, dès que l'énergie dépasse cette valeur le coefficient d'absorption augmente d'une manière forte (Figure 3.7).

A cause de la décroissance du gap en fonction de la concentration d'indium, une augmentation du coefficient d'absorption est obtenue (Figure 3.8). On remarque aussi une saturation du coefficient d'absorption avec l'augmentation de l'énergie du photon incident, cette saturation peut être expliquée ; qu'avec une forte énergie incidente l'excitation des électrons devient plus large, c-à-d tous les électrons de la bande de valence ont l'énergie nécessaire pour immigrer vers la bande de conduction.

### 3.2.7 Diagramme des bandes d'énergie :

Pour pouvoir tracer le diagramme des bandes et comprendre de mécanisme de conduction, il est indispensable de savoir les valeurs des discontinuité des bandes de conduction et valences, cette simulation ( figure 3.9) montre la variation de  $\Delta E_c$  et  $\Delta E_v$  en fonction de la concentration d'indium.

Des fortes discontinuités des bandes entre 0.2 a 0.6 eV ont été observés pour des concentrations d'indium inférieurs à 30% et supérieurs à 70% , cette discontinuité joue le rôle d'une barrière qui trouble le passage des porteurs par l'effet thermoélectronique.

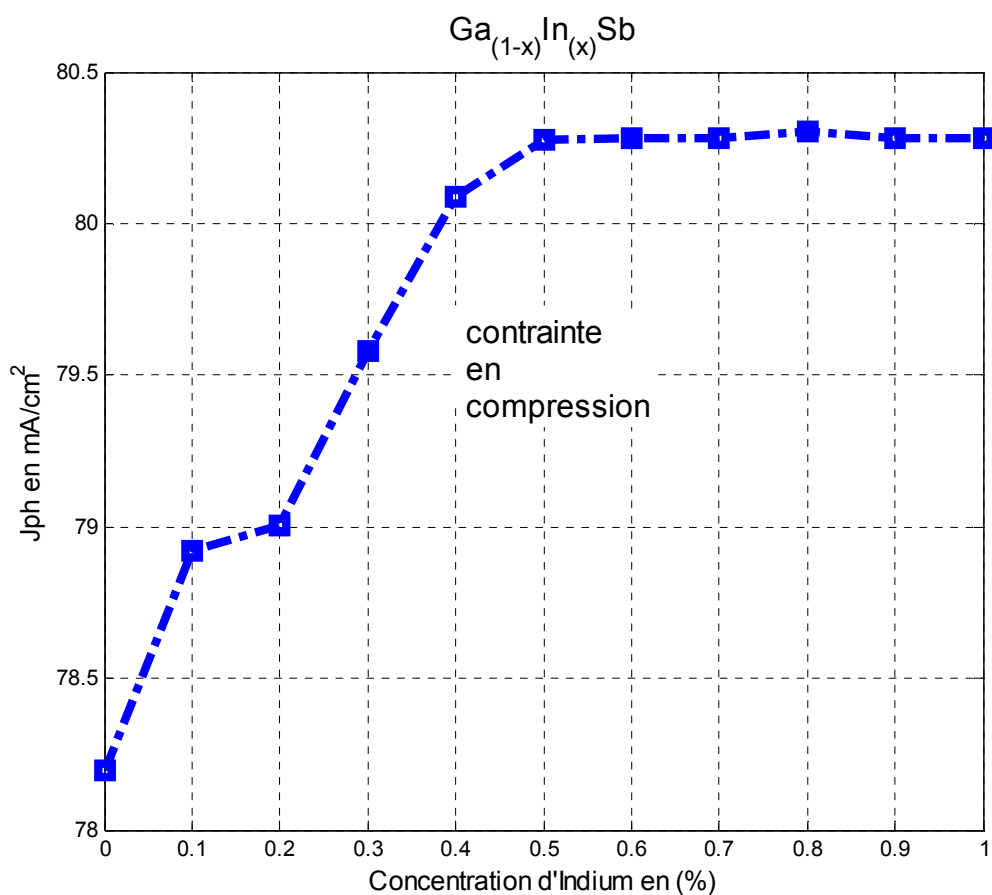


**Figure 3.9** : variation de discontinuité des bandes de valence et conduction en fonction de la concentration d'indium

### 3.2.8 Caractéristiques photovoltaïques :

#### a Courant photo-courant :

La figure 3.10, montre la variation du photo-courant sous le spectre AMG<sub>1.5</sub> qui prend en compte les radiations directes et indirectes du rayonnement solaire, pour cette simulation on a utilisé l'équation fondamentale 3.1 du chapitre1.



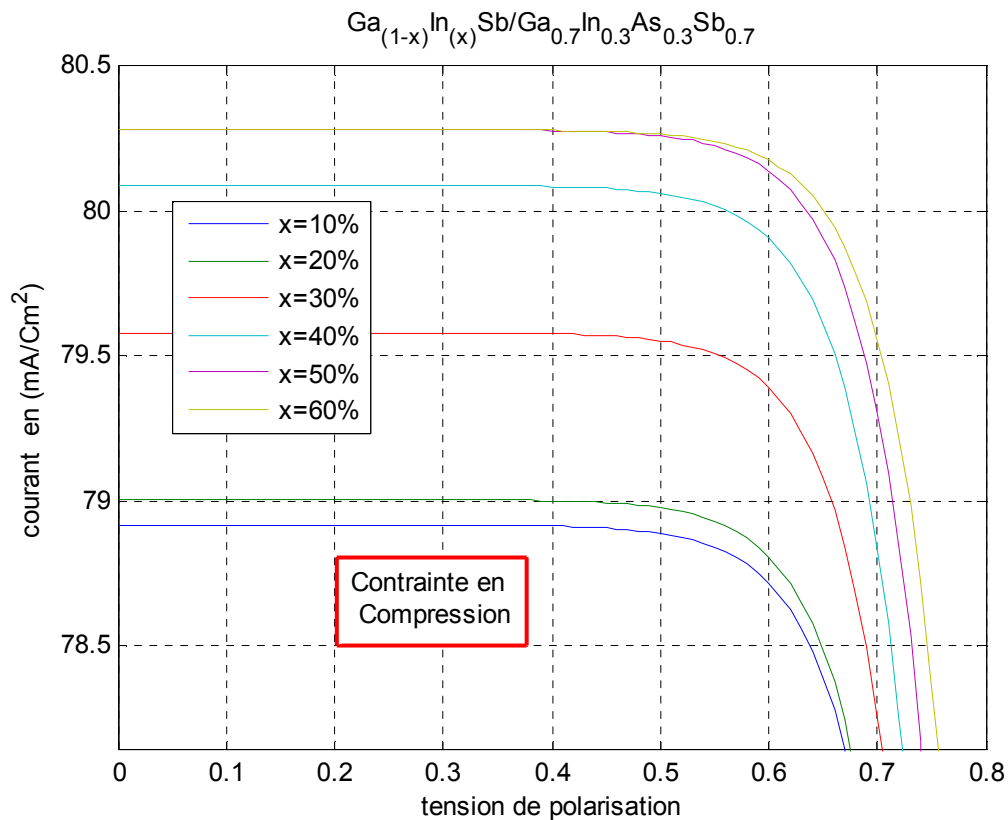
**Figure 3.10** : Variation du photo-courant en fonction de la concentration d'indium dans le ternaire.

On remarque un accroissement du photo-courant avec l'augmentation de la concentration d'indium jusqu'à 50%. On obtient des valeurs entre 80 et 80.5  $\text{mA}/\text{cm}^2$  pour des concentrations supérieures à 50%, cette saturation est due au fort décroissement du Gap pour des concentrations d'indium intéressantes.

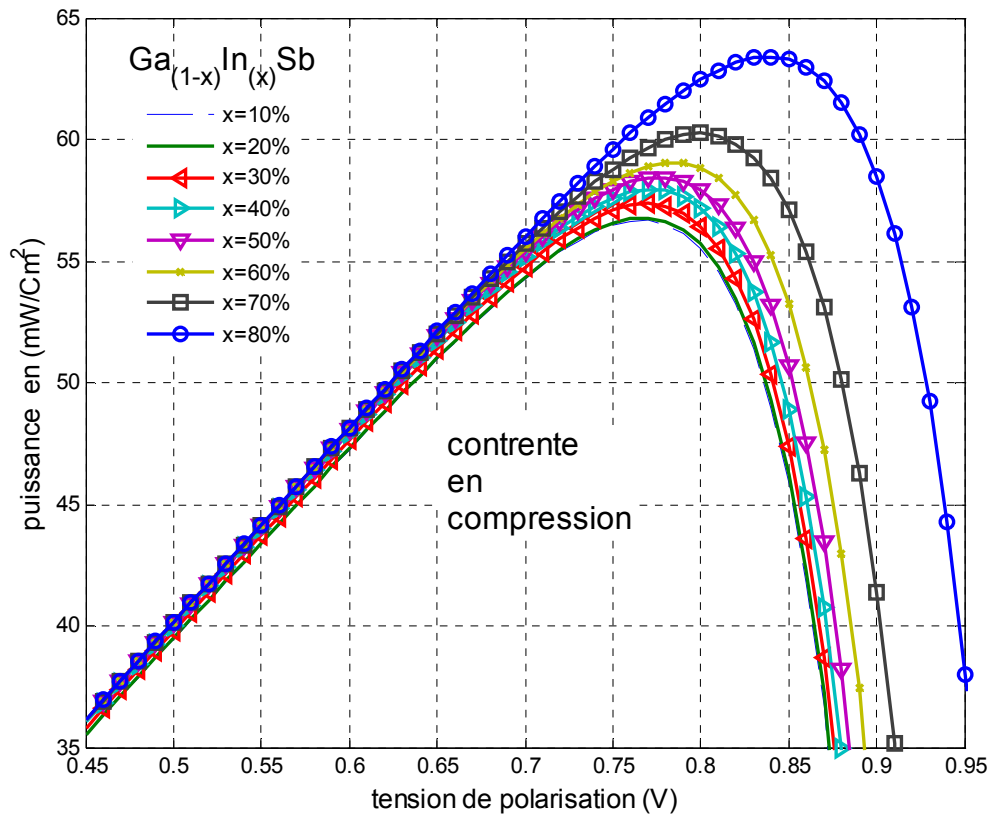
**b Caractéristique courant-tension :**

La simulation représentée par la figure 3.11 illustre la caractéristique courant-tension de la structure étudiée pour plusieurs concentrations d'indium.

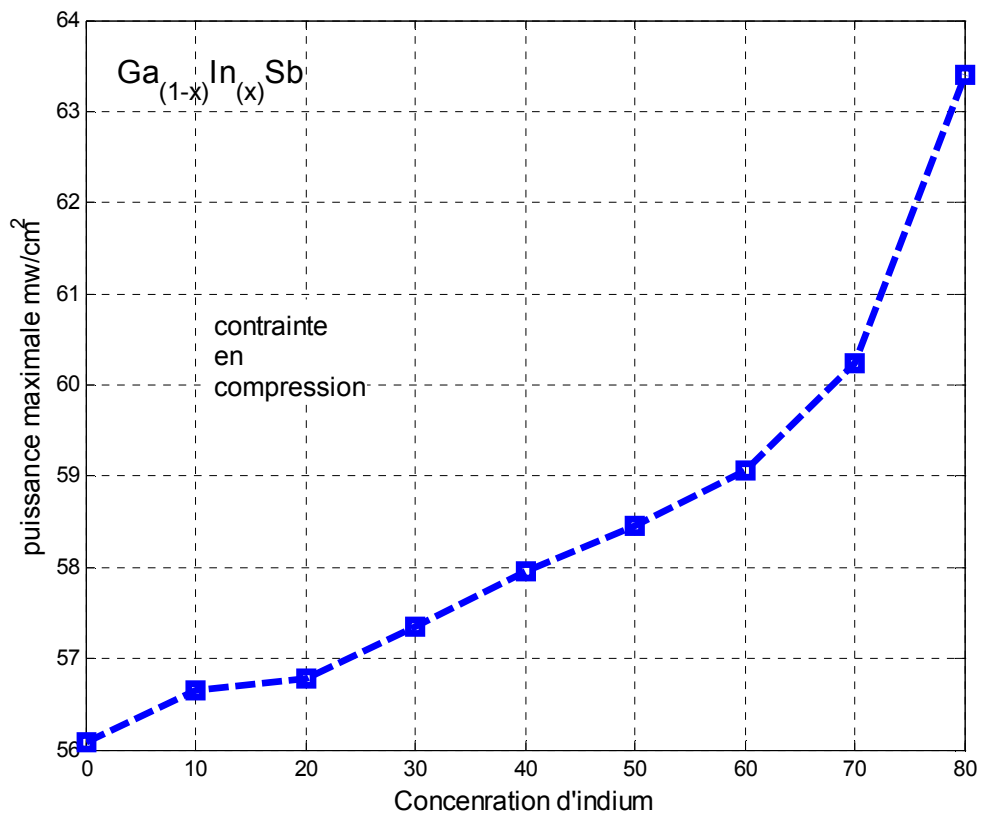
Une amélioration d'amplitude de courant a été observée avec l'augmentation de la concentration d'indium, cette amélioration entraîne un accroissement de la puissance délivré par cette structure figure 3.12 et 3.13.



**Figure 3.11 :** caractéristique courant-tension pour plusieurs concentrations d'indium.



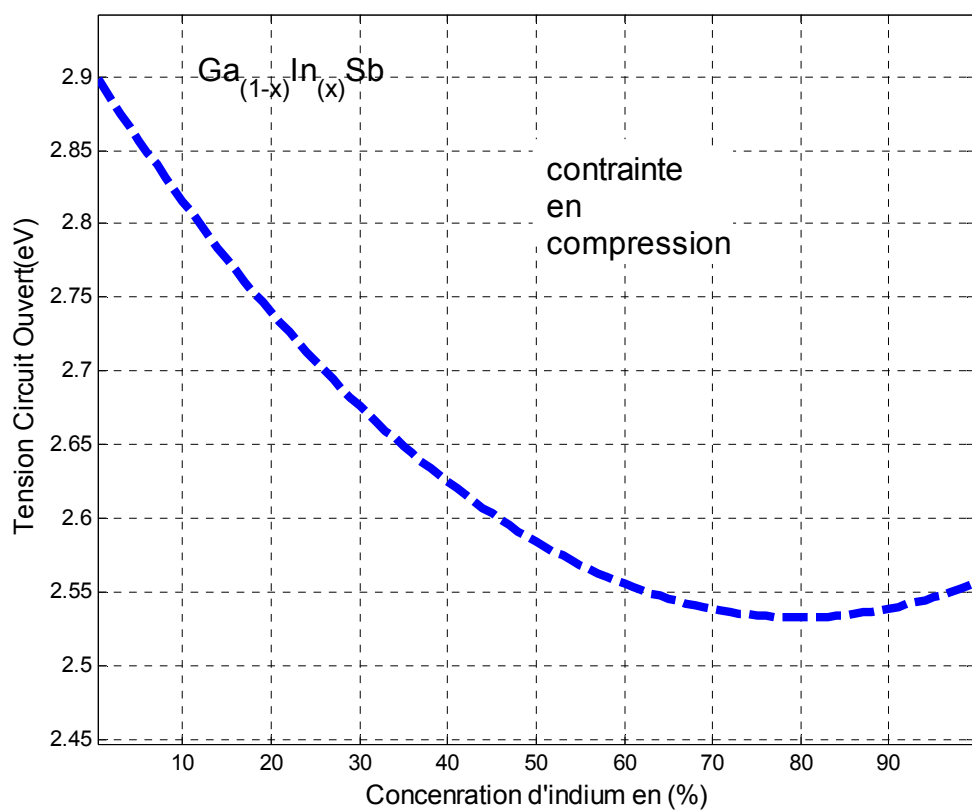
**Figure 3.12** : variation de la puissance pour plusieurs concentrations d'indium.



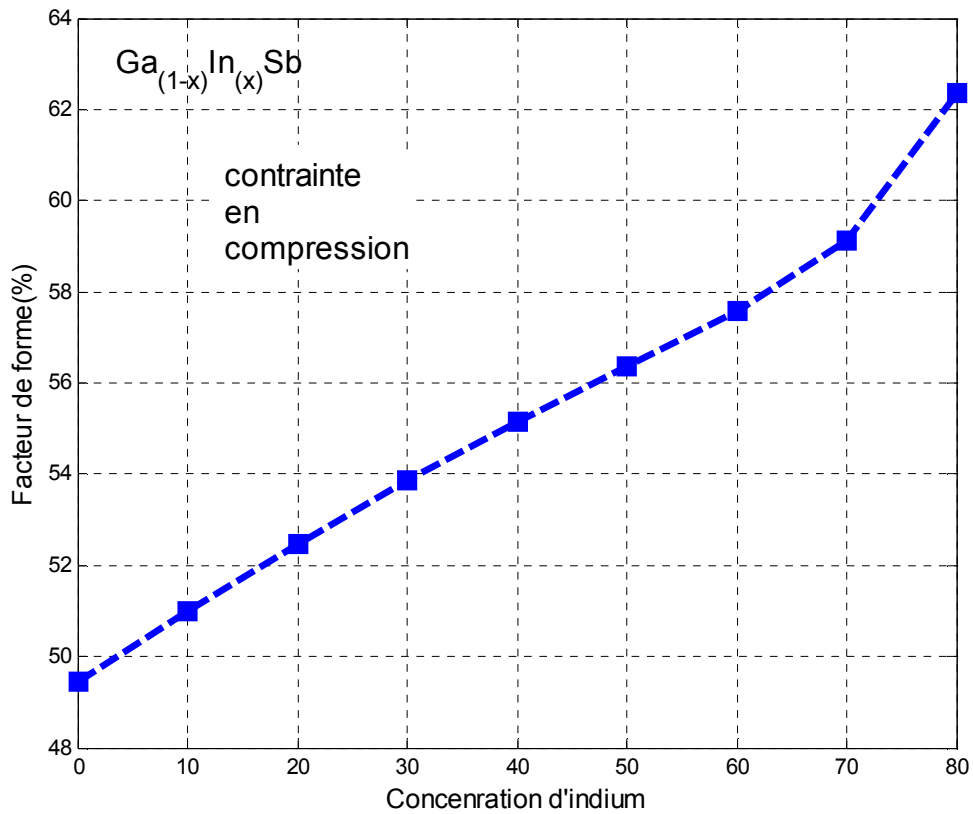
**Figure 3.13** : puissance maximale en fonction de la concentration d'indium.

**c Tension de circuit ouvert et facteur de forme :**

D'après la simulation qu'il a été illustré par la figure 3.14, on remarque que la tension du circuit ouvert décroît avec l'augmentation de la concentration d'indium, et comme FF (facteur de forme) est un rapport entre la puissance délivrée par la cellule et la tension du circuit ouvert, on observe une augmentation qui varie de 49% à 63% de ce dernier en fonction de la concentration d'indium (figure 3.15).



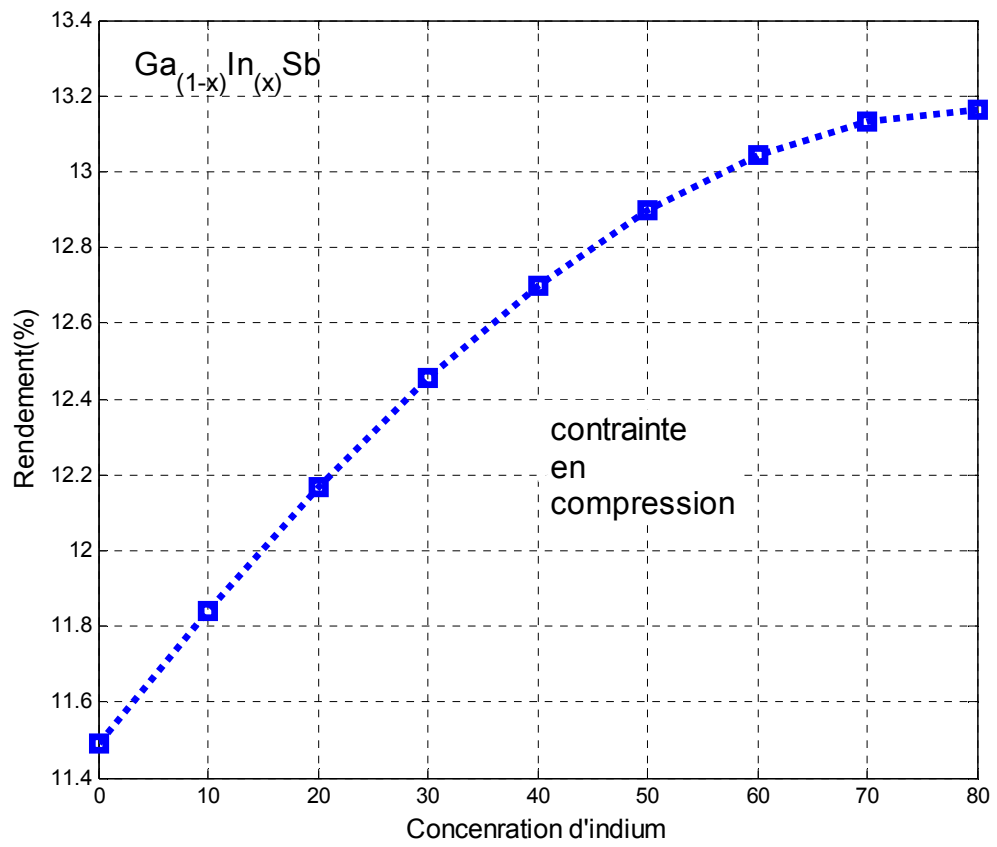
**Figure 3.14:** Variation de  $V_{CO}$  en fonction de la concentration d'indium.



**Figure 3.15:** variation de FF en fonction de la concentration d'indium.

**d Rendement de la structure  $Ga_{(1-x)}In_{(x)}Sb/Ga_{0.7}In_{0.3}As_{0.3}Sb_{0.7}$ :**

La figure 3.16 montre la variation du rendement de la structure étudiée en fonction de la concentration d'indium. Un rendement varie entre 11.5 jusqu'à 13.2 et obtenu. Le rendement augmente avec la concentration d'indium mais le choix adéquat de cette dernière coïncide avec plusieurs contraintes parmi elles le cout élevé d'indium, le cout considérable de la technologie utilisée pour la fabrication de ce type des structures (couches minces), .....

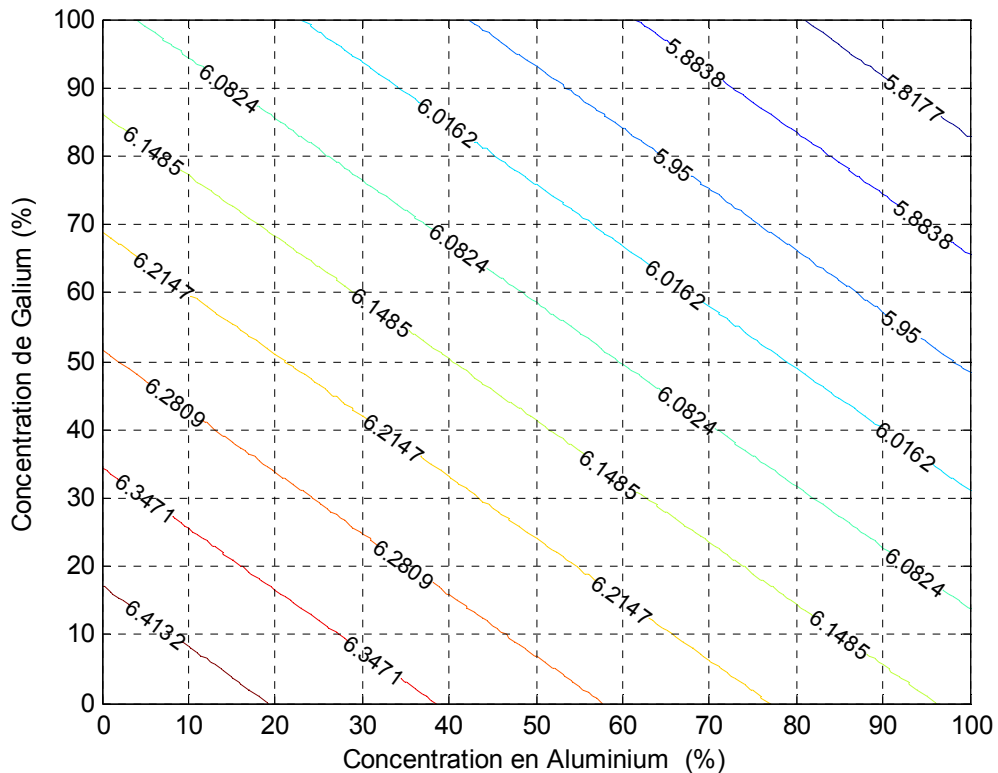


**Figure 3.16** : Rendement en fonction de la concentration d'indium.

### 3.3 Simulation de la structure $\text{Ga}_{(1-x)}\text{In}_{(x)}\text{Sb}/\text{GaInAlSb}$ :

#### 3.3.1 Paramètre de maille du quaternaire :

Nous avons varié les concentrations d'aluminium et du galium sur l'intervalle [0,1] dans le quaternaire  $\text{Ga}_{(y)}\text{In}_{(1-x-y)}\text{Al}_{(x)}\text{Sb}$ , on constate une diminution de 0.3 Angström sur tout l'intervalle des concentrations d'aluminium, et un décroissement d'environ 1 Angström sur tout l'intervalle du galium. (Figure3.17).

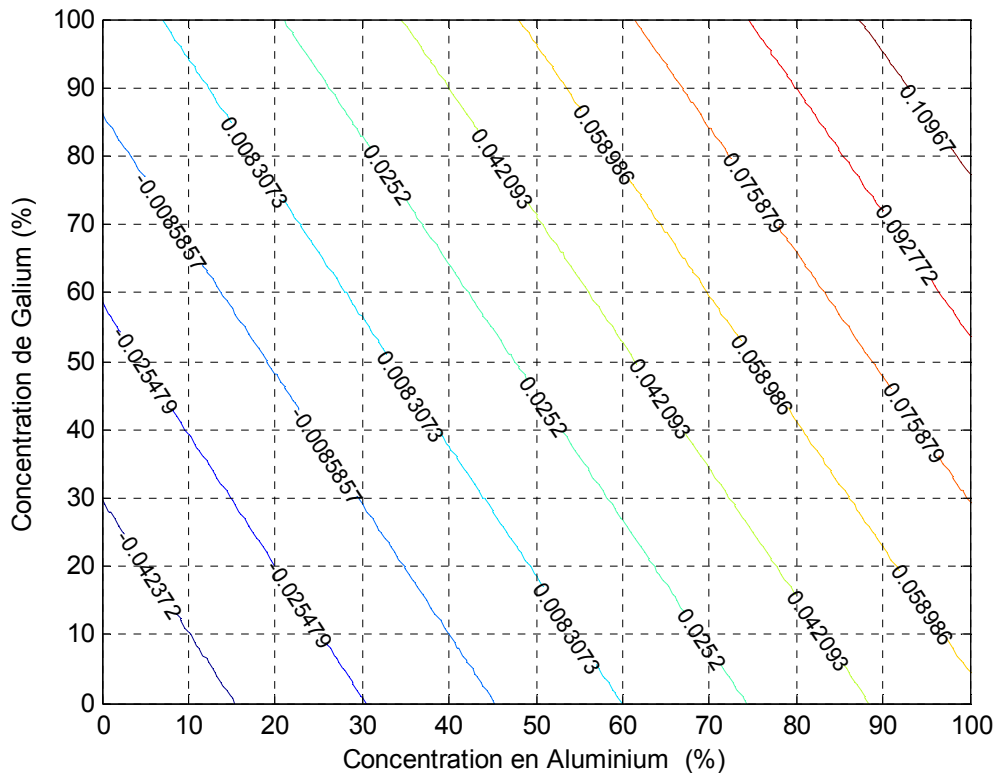


**Figure.3.17:** Les paramètres de maille de la structure GaInAlSb en fonction de la composition x de l'Aluminium et y en Galium.

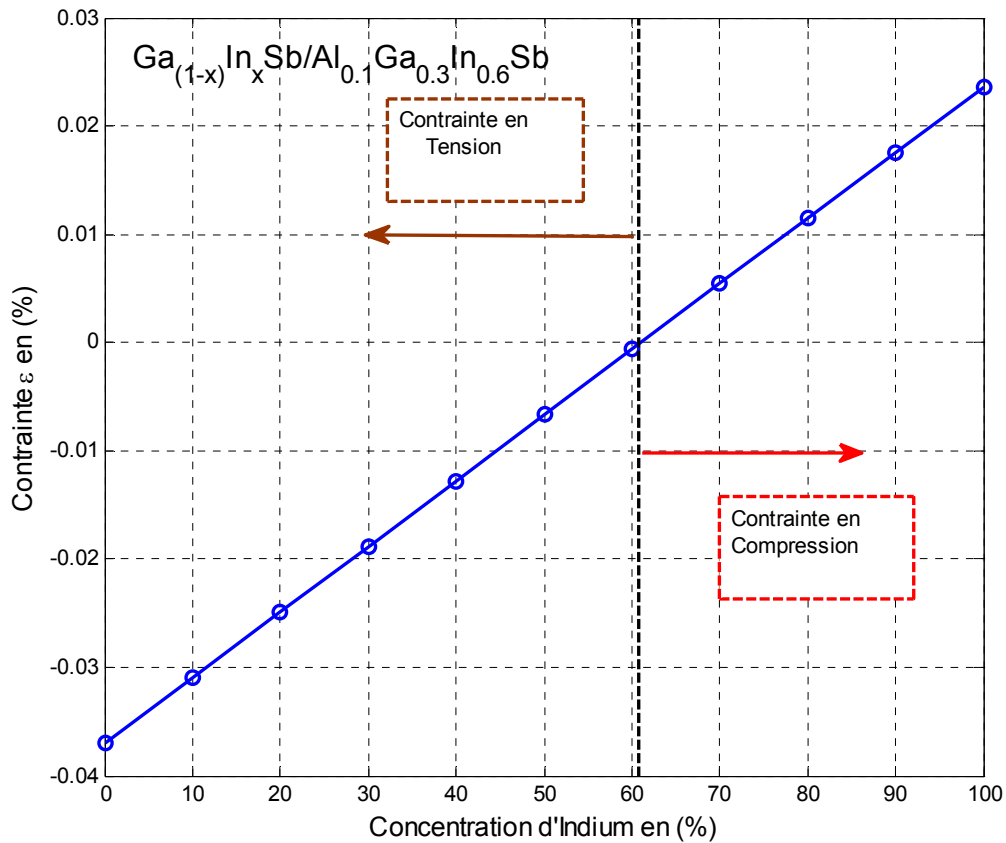
### 3.3.2 Le désaccord de maille

La figure 3.18 nous illustre la variation du désaccord de maille entre le quaternaire et le ternaire ( $Ga_yIn_{(1-x-y)}Al_xSb/Ga_{(1-x)}In_xSb$ ) en fonction de la variation des concentrations de l'indium dans le ternaire, l'aluminium et le galium dans le quaternaire, on remarque un faible désaccord quel que soit la concentration d'indium. Et le plus faible désaccord est obtenu sur l'intervalle [0 0.15] pour les concentrations d'aluminium.

D'après cette simulation, On a fixé la concentration de l'aluminium à 10% qui nous donne un meilleur accord, et le choix de 30% du galium revient au cout élevé de cet élément.



**Figure 3.18** : Variation du désaccord en fonction de l'Aluminium et du Galium dans le quaternaire.



**Figure 3.19** : Variation du désaccord en fonction de l'indium dans le ternaire.

Après le choix des concentrations adéquats, une deuxième simulation du désaccord a été réalisée en 2D (figure3.19) tout en variant la concentration d'indium dans le ternaire sur l'intervalle [0,1].

Avec des faibles concentrations d'indium le désaccord de maille est négatif ce qui implique une contrainte en tension et avec l'augmentation de la concentration d'indium au-dessus d'une valeur optimal, le désaccord de maille est positif ce qui traduit l'apparition d'une contrainte en compression à l'interface de contacte des deux alliages, et une faible contrainte est obtenu pour x varie de 55 à 75%.

### 3.3.3 Epaisseur critique $h_c$

On remarque que la contrainte réduit la valeur de l'épaisseur critique, pour cette structure les meilleurs valeurs de l'épaisseur sont obtenus pour x varie de 55 à 75% là où la contrainte est faible.

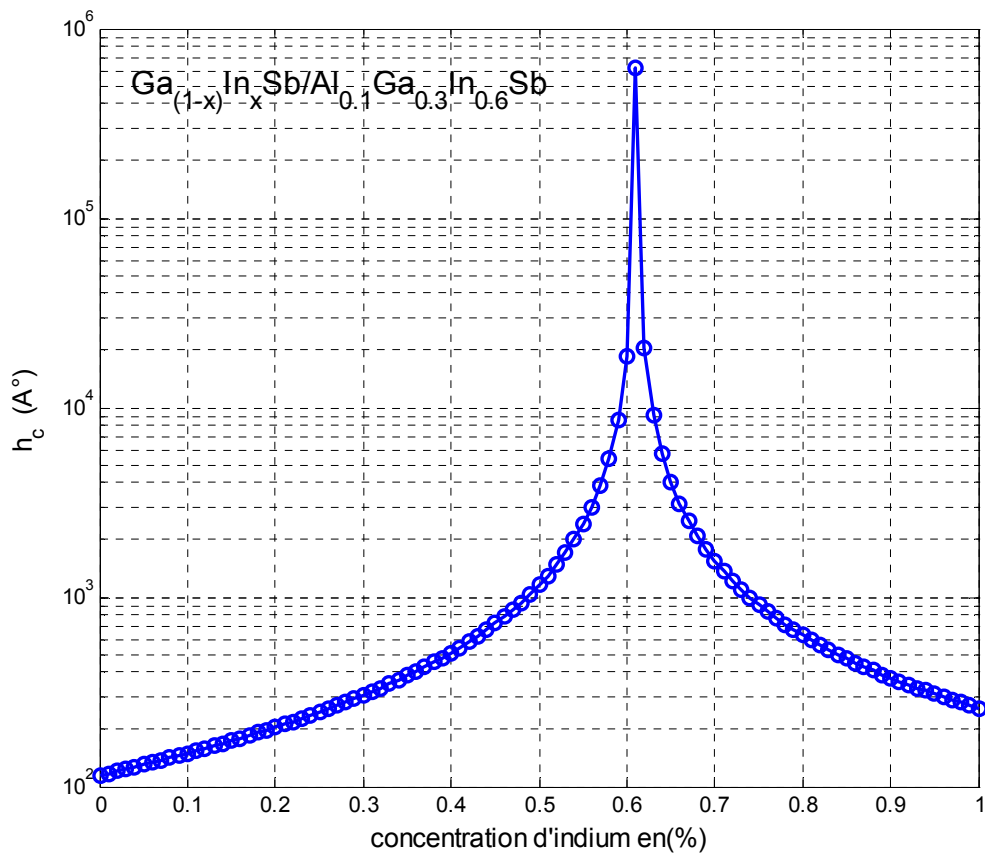


Figure.3.20 : L'épaisseur critique en fonction de la composition x de l'indium.

### 3.3.4 L'effet de la contrainte sur le gap :

La Figure 3.21 montre la variation du gap de l'alliage  $Ga_{(1-x)}In_{(x)}Sb$  contraint sur le quaternaire  $Ga_{(y)}In_{(1-x-y)}Al_{(x)}Sb$ . On remarque une réduction de la largeur de la bande interdite avec l'augmentation de la concentration d'indium et une contrainte en tension sur l'intervalle [0 0.6] est présente, on peut distinguer cette contrainte par les niveaux énergétiques de la bande de valence c.-à-d. trous lourds ( $E_{gh}$ ) est supérieur à celui des trous légers ( $E_{gl}$ ).

On constate sur l'intervalle [0.6 1] qu'il y a une contrainte en compression car on remarque que le niveau énergétique des trous légers ( $E_{gl}$ ) est inférieur à celui des trous lourds ( $E_{gh}$ ).

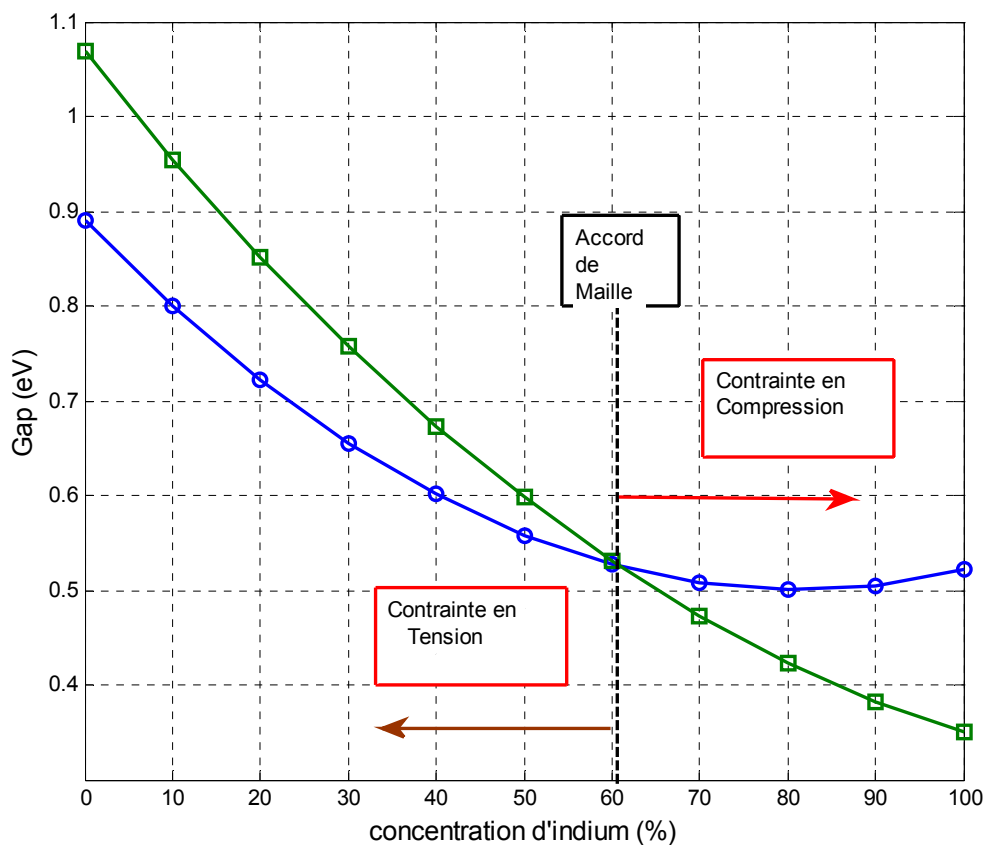


Figure 3.21 : Variation du gap en fonction de la concentration d'indium.

### 3.4 L'effet de la contrainte sur le coefficient d'absorption :

La figure 3.22 définit la variation du coefficient d'absorption en fonction de l'énergie du photon incident sur le matériau de la structure GaInAlSb/GaInSb, pour plusieurs concentrations d'indium. Et la figure 3.23 représente la variation du coefficient d'absorption en fonction de la concentration de l'indium pour des énergies des photons incidents fixes.

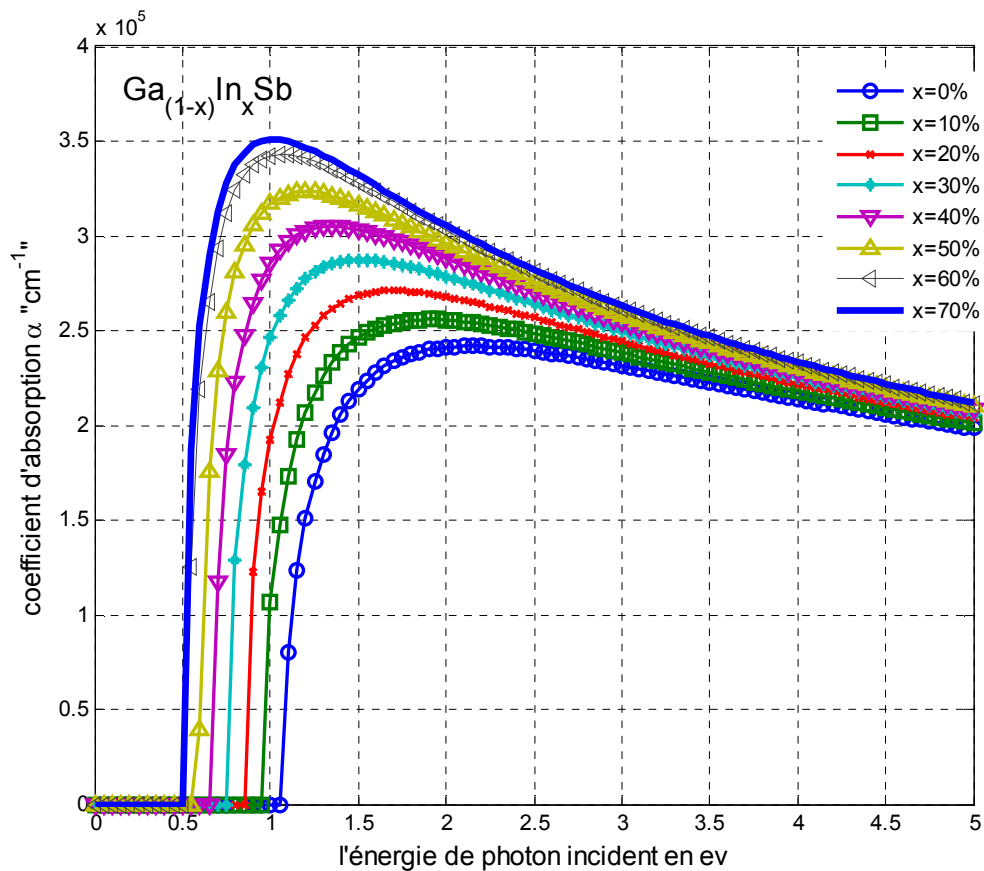
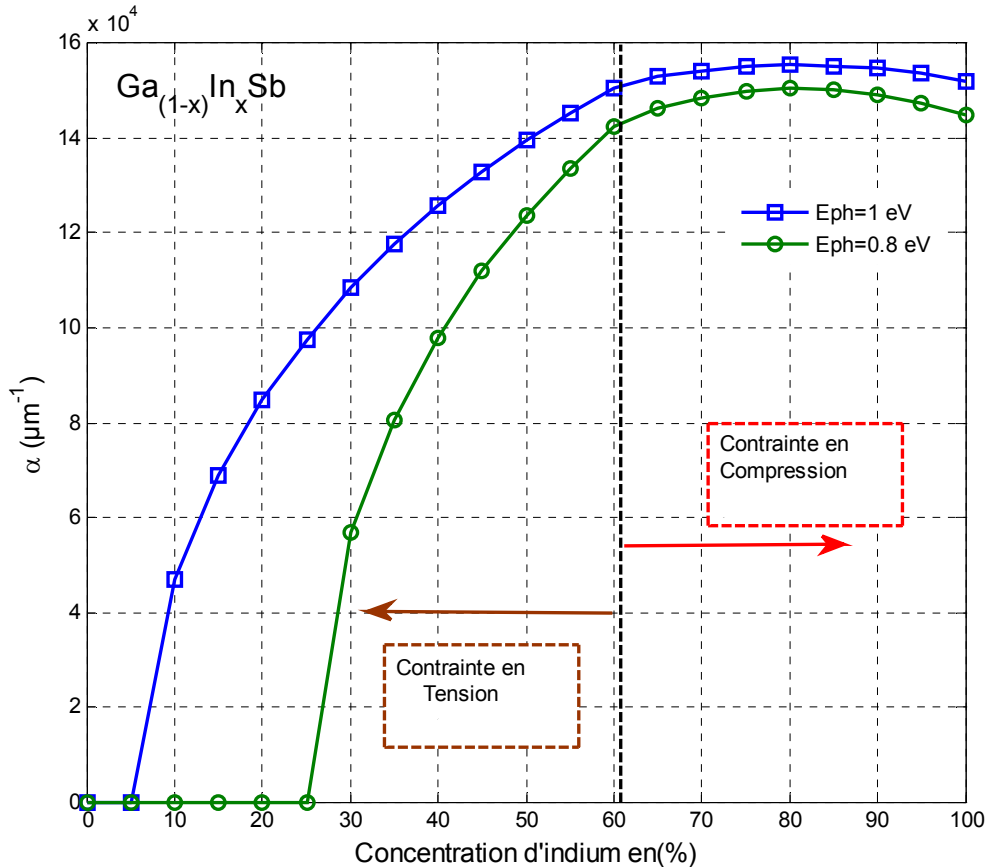


Figure 3.22 : Variation du coefficient d'absorption en fonction de l'énergie incidente.



**Figure 3.23 :** Variation du coefficient d'absorption en fonction de la concentration d'indium.

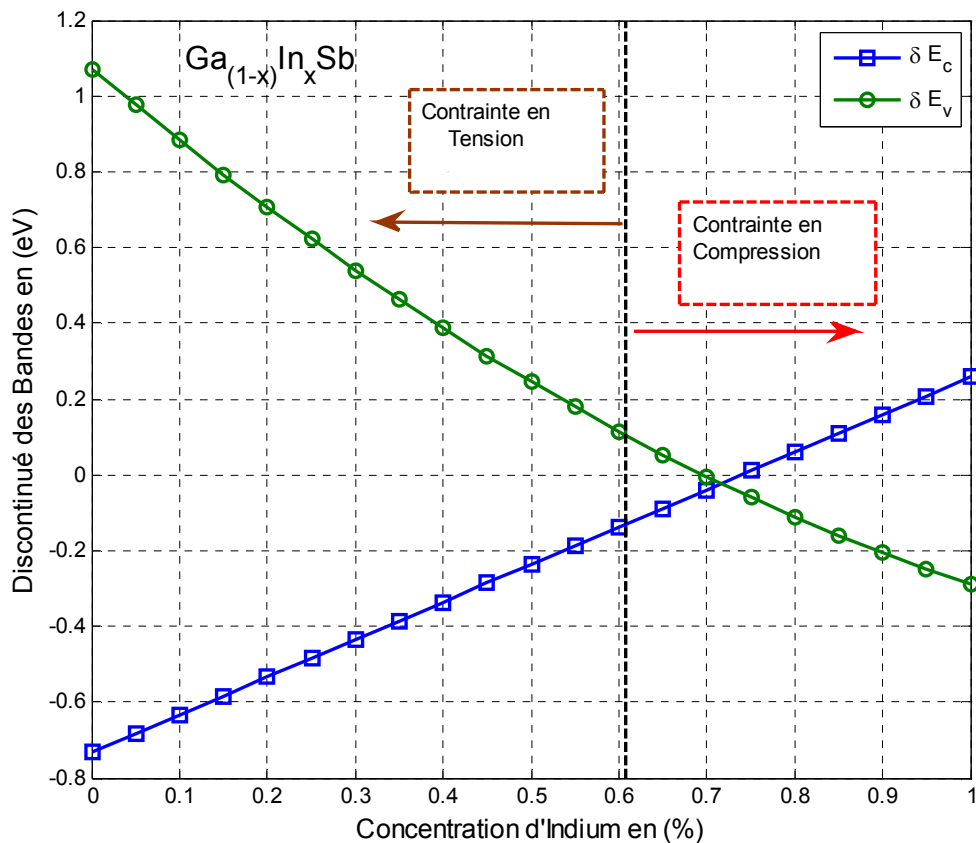
On remarque que pour les énergies inférieures à 0.5 eV le coefficient d'absorption est nul quelle que soit la concentration d'indium car cette énergie est insuffisante pour que les électrons puissent franchir la bande interdite de l'alliage ternaire, dès que l'énergie dépasse cette valeur le coefficient d'absorption augmente d'une manière forte (Figure 3.22).

A cause de la décroissance du gap en fonction de la concentration d'indium, une augmentation du coefficient d'absorption est obtenue (Figure 3.23). On remarque aussi une saturation du coefficient d'absorption avec l'augmentation de l'énergie du photon incident, cette saturation peut être expliquée ; qu'avec une forte énergie incidente l'excitation des électrons devient plus large, c-à-d tous les électrons de la bande de valence ont l'énergie nécessaire pour immigrer vers la bande de conduction.

### 3.5 Diagramme des bandes d'énergie :

Afin qu'on puisse tracer le diagramme des bandes et d'élaborer le mécanisme de conduction, il est indispensable de savoir les valeurs des discontinuités des bandes de conduction et valences, cette simulation ( figure 3.24) montre la variation de  $\Delta E_c$  et  $\Delta E_v$  en fonction de la concentration d'indium.

Des fortes discontinuités des bandes entre 0.2 à 0.6 eV ont été observés pour des concentrations d'indium inférieures à 30% et supérieures à 40%, cette discontinuité joue le rôle d'une barrière qui trouble le passage des porteurs par l'effet thermoélectronique.

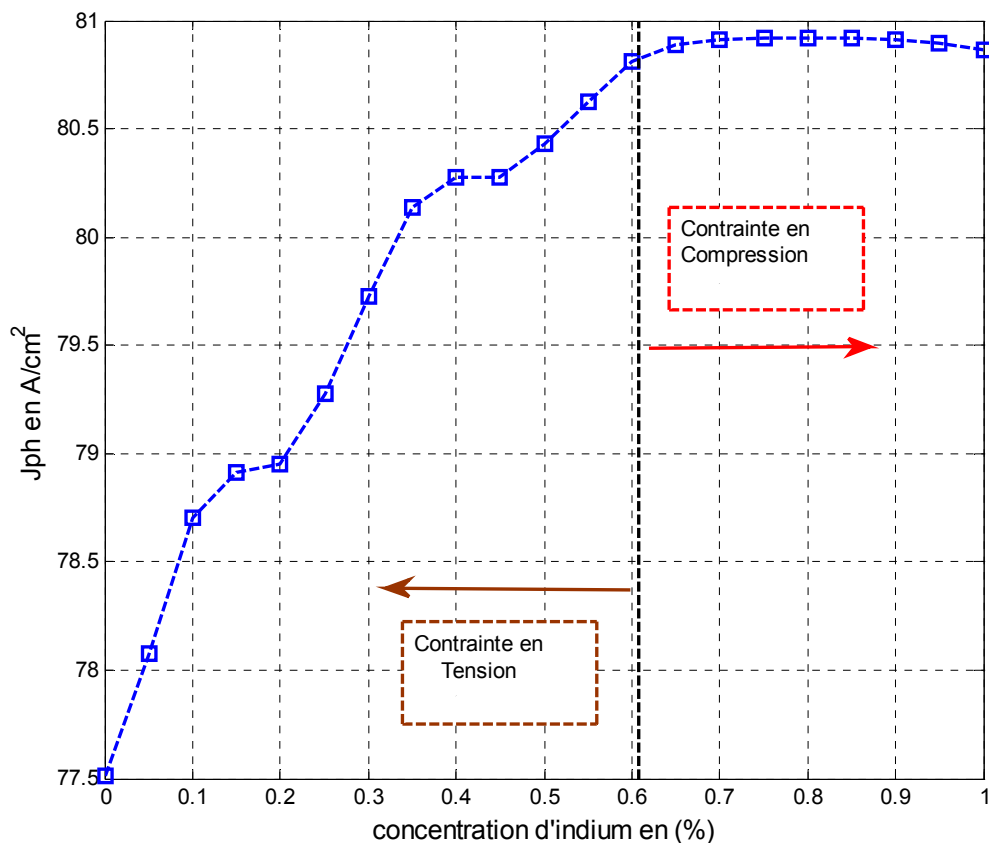


**Figure 3.24** : variation de discontinuité des bandes de valence et conduction en fonction de la concentration d'indium

### 3.6 Caractéristiques photovoltaïques :

#### a Courant photo-courant :

La figure 3.25, montre la variation du photo-courant sous le spectre AMG1.5 qui prend en compte les radiations directes et indirectes du rayonnement solaire, pour cette simulation on a utilisé l'équation fondamentale 3.1 du chapitre1.



**Figure 3.25 :** Variation du photo-courant en fonction de la concentration d'indium dans le ternaire.

On remarque une augmentation du photo-courant avec l'augmentation de la concentration d'indium jusqu'à 60%. On obtient des valeurs entre 80.5 et 81  $mA/Cm^2$  pour des concentrations supérieures à 60%, cette saturation est expliquée par l'excitation de tous les électrons de la bande de valence par de faibles énergies de photons car le gap est très faible.

### b Caractéristique courant-tension :

La figure 3.26 nous montre la caractéristique courant-tension de la structure étudiée pour plusieurs concentrations d'indium.

On constate une amélioration d'amplitude de courant qui a été observée avec l'augmentation de la concentration d'indium. Avec cette augmentation, on observe une amélioration importante de la caractéristique de la cellule. Ce qui implique une amélioration de la puissance délivrée par la cellule, comme il est montré par (figure 3.27 et figure 3.28).

cette amélioration entraîne un accroissement de la puissance délivré par cette structure figure 3.27 et 3.28.

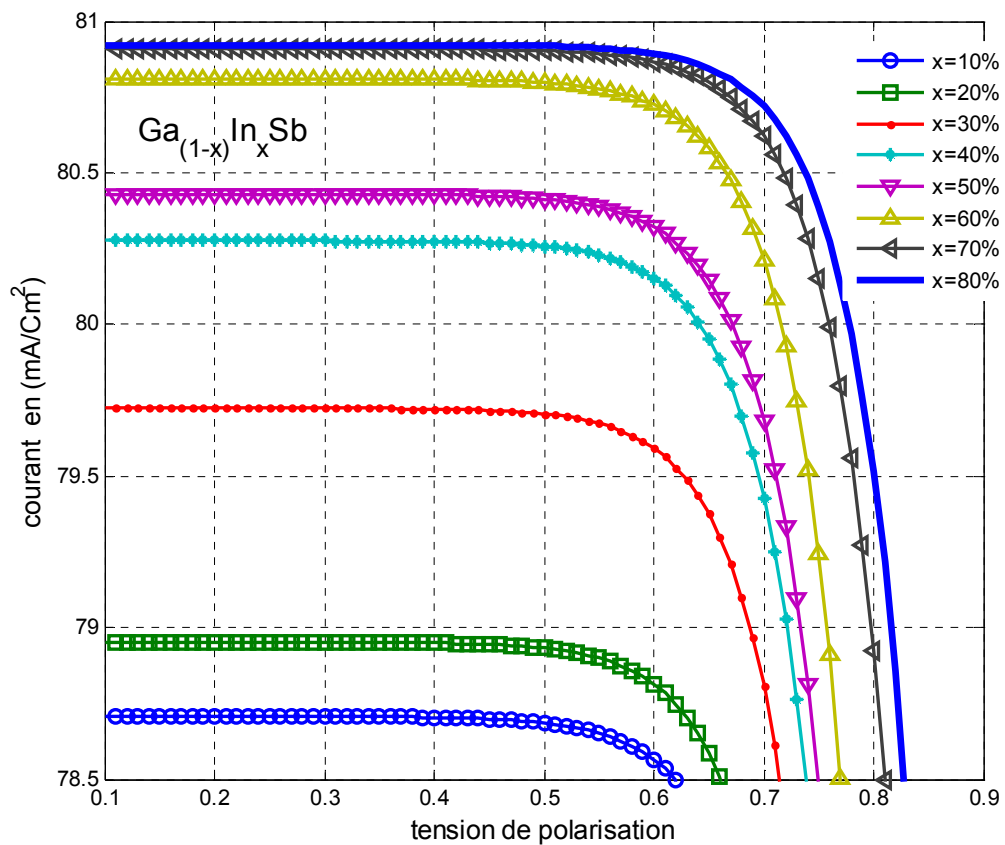
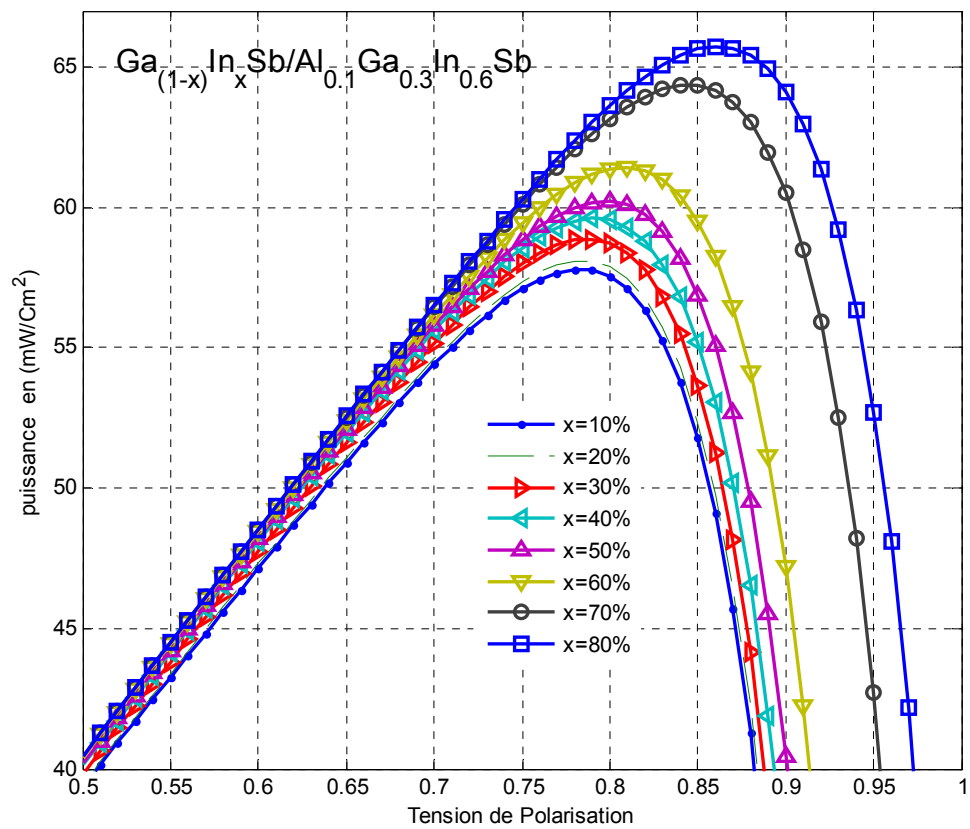
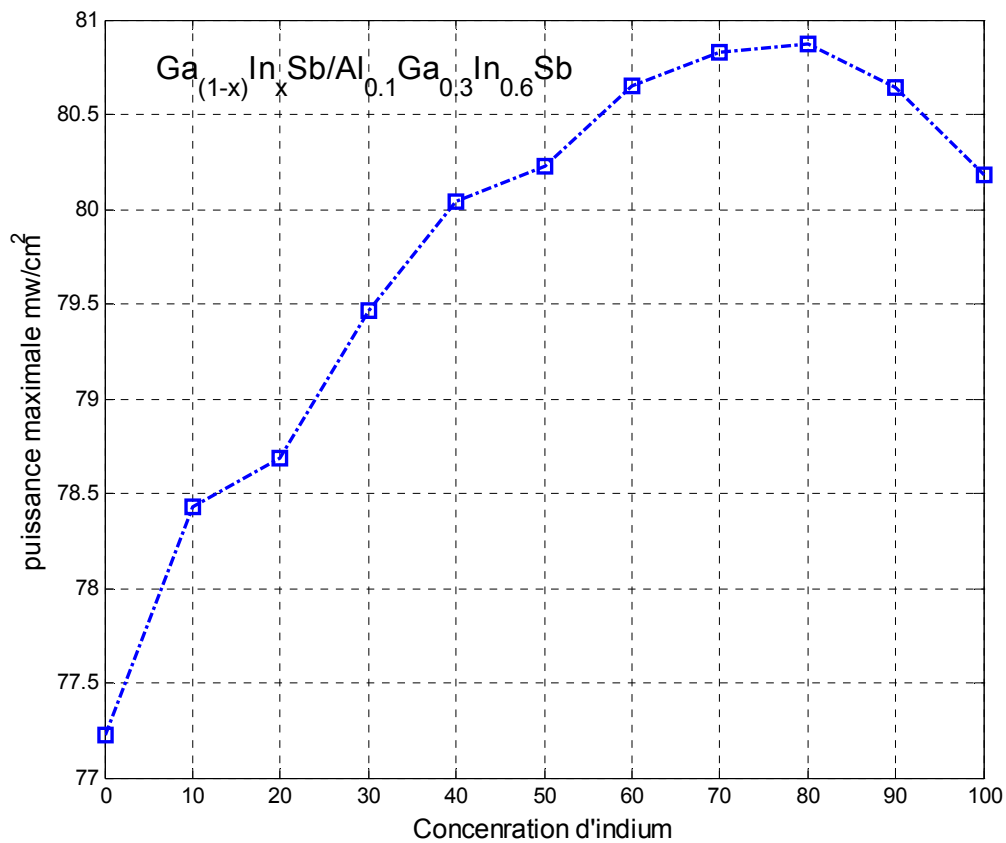


Figure 3.26 : caractéristique courant-tension pour plusieurs concentrations d'indium.



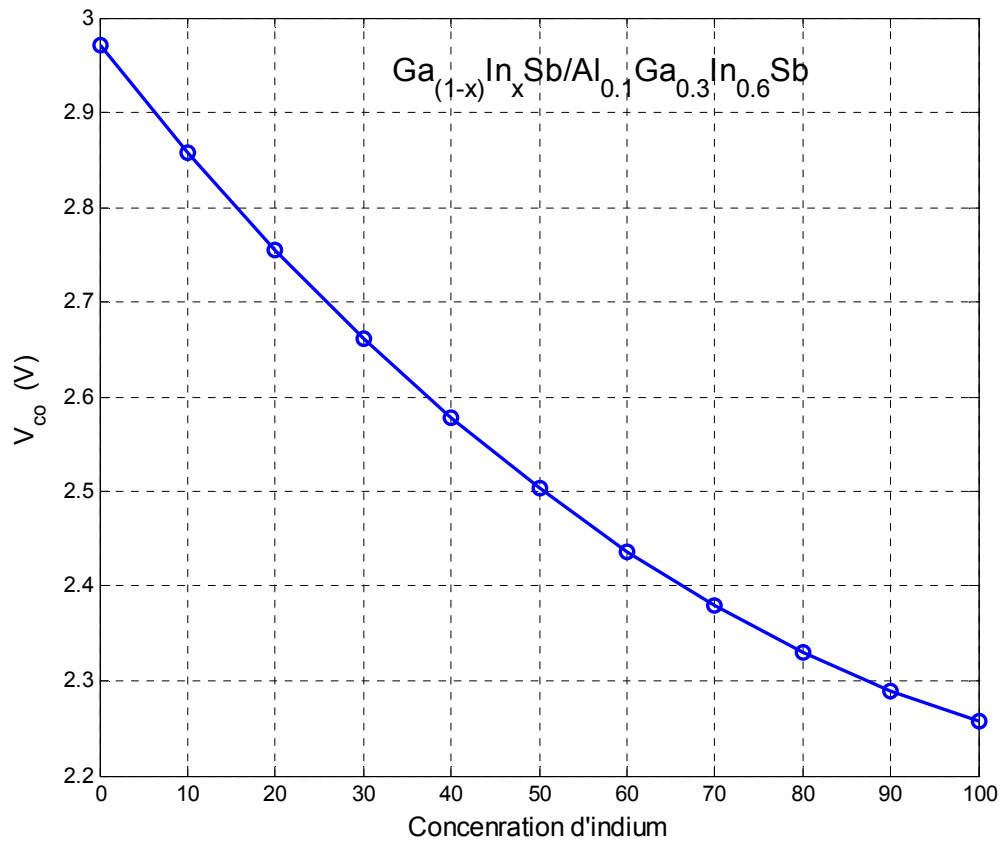
**Figure 3.27** : variation de la puissance pour plusieurs concentrations d'indium.



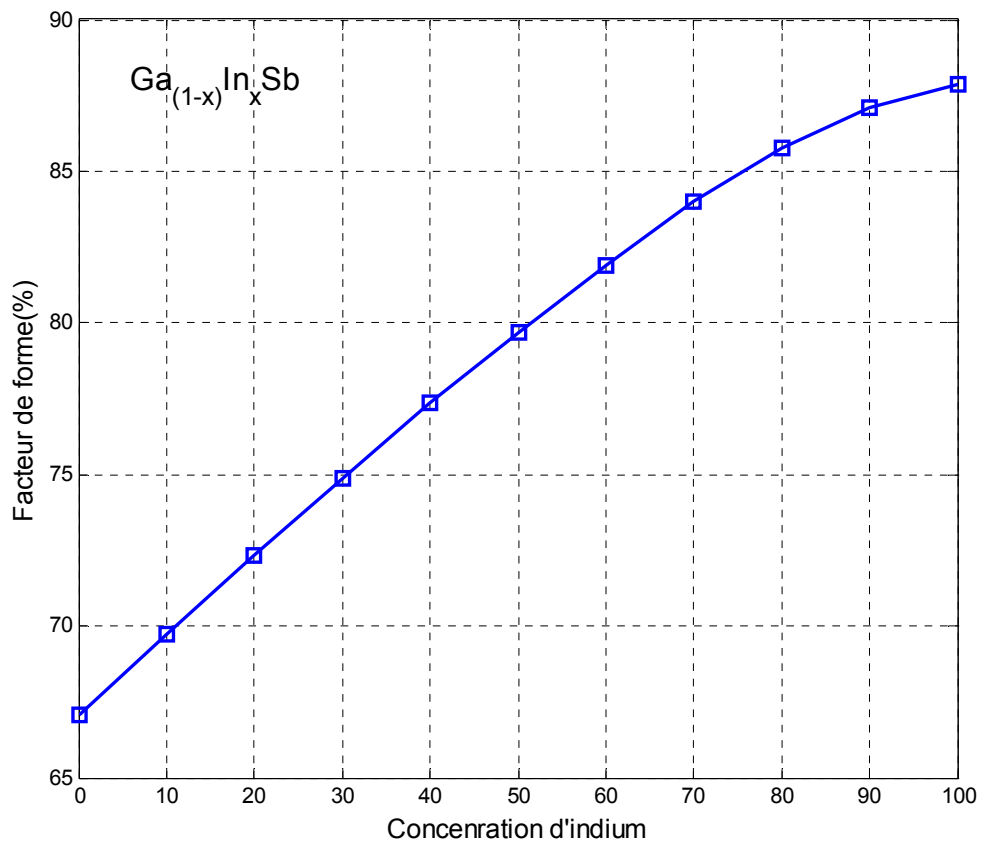
**Figure 3.28:** puissance maximale en fonction de la concentration d'indium.

**c Tension de circuit ouvert et facteur de forme :**

On remarque une augmentation du facteur de forme FF (figure 3.30) qui varie de 67% à 87%, car le FF (facteur de forme) représente le rapport entre la puissance délivrée par la cellule et la tension du circuit ouvert. et on a constaté que la tension du circuit ouvert décroît avec l'augmentation de la concentration d'indium (figure 3.29),



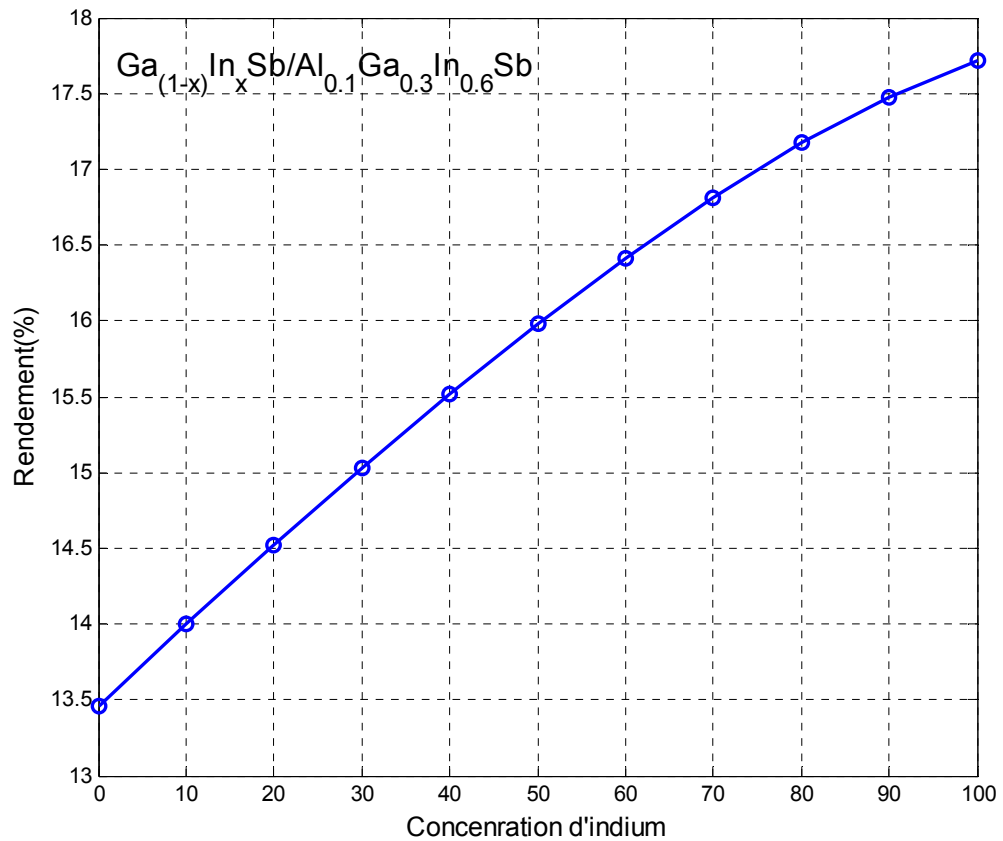
**Figure 3.29** : Variation de  $V_{co}$  en fonction de la concentration d'indium.



**Figure 3.30** : variation de FF en fonction de la concentration d'indium.

**d Rendement de la structure  $Ga_{(1-x)}In_{(x)}Sb/Ga_{0.7}In_{0.3}As_{0.3}Sb_{0.7}$ :**

On peut voir que le rendement de la structure varie entre 13.4 jusqu'à 17.7. La figure 3.28 montre la variation du rendement de la structure étudiée en fonction de la concentration d'indium



**Figure 3.31** : Rendement en fonction de la concentration d'indium.

### 3.7 Comparaison entre les deux structures étudiées :

#### 3.7.1 Tableau récapitulatif des résultats des simulations :

Le tableau suivant résume les résultats des deux structures obtenus par simulation pour trois concentrations d'indium différentes (contrainte  $\epsilon$ ,  $H_c$  : l'épaisseur critique, gap trous lourd, gap trous léger, coefficient d'absorption, photo courant, puissance maximale,  $V_{co}$ , FF et finalement le rendement)

	X(%)	$\epsilon$ (%)	Hc(A°)	E <sub>gh</sub> (eV)	E <sub>ghh</sub> (eV)	$\alpha$ ( $\mu\text{m}^{-1}$ )	J <sub>ph</sub> (mA/cm <sup>2</sup> )	VCO (V)	FF(%)	R (%)	
<b>Structure I</b>	10	0.88	795	0.86	0.91	0	78.92	2.81	51.01	11.84	
	20	1.51	413	0.74	0.84	1.44 <sup>e5</sup>	79.01	2.74	52.47	12.17	
	<b>GaInSb/</b>	40	2.78	194	0.54	0.72	2.35 <sup>e5</sup>	80.09	2.62	55.14	12.7
	<b>GaInAsSb</b>	70	4.67	101	0.30	0.63	2.87 <sup>e5</sup>	80.2	2.54	59.13	13.13
	80	5.3	86	0.25	0.62	2.9 <sup>e5</sup>	80.3	2.53	62.36	13.16	
<b>Structure II</b>	10	-3	149.9	0.95	0.80	4.67 <sup>e4</sup>	78.71	2.85	69.73	14	
	20	-2.5	205.6	0.85	0.72	8.48 <sup>e4</sup>	78.95	2.75	72.35	14.52	
	<b>GaInSb/</b>	40	-1.2	509	0.67	0.6	1.26 <sup>e5</sup>	80.28	2.58	77.35	15.52
	<b>GaInAlSb</b>	70	0.5	1547	0.47	0.51	1.54 <sup>e5</sup>	80.91	2.38	83.99	16.81
	80	1.15	628	0.42	0.5	1.56 <sup>e5</sup>	80.92	2.33	85.79	17.17	

**Tableau 3.1** : Tableau récapitulatif des résultats des simulations

### 3.7.2 Interprétation du tableau

Lorsqu'on a étudié le paramètre de maille de la structure GaInSb/GaInAsSb on a constaté une augmentation d'environ 0.4 Angström sur tout l'intervalle des concentrations de l'indium, et un accroissement de 0.8 Angström sur tout l'intervalle de l'antimoine, alors quand nous avons varié les concentrations d'aluminium et du galium sur l'intervalle [0,1] dans le quaternaire Ga<sub>(y)</sub>In<sub>(1-x-y)</sub>Al<sub>(x)</sub>Sb, on constate une diminution de 0.3 Angström sur tout l'intervalle des concentrations d'aluminium, et un décroissement d'environ 1 Angström sur tout l'intervalle du galium.

En l'occurrence un meilleur désaccord est obtenu sur l'intervalle [0.65 1] pour les concentrations d'antimoine pour la structure GaInSb/GaInAsSb. Alors qu'on remarque sur la structure GaInSb/GaInAlSb un faible désaccord quel que soit la concentration d'indium. Et le plus faible désaccord est obtenu sur l'intervalle [0 0.15] pour les concentrations d'aluminium.

Pour l'épaisseur critique Une diminution de l'épaisseur critique avec l'augmentation de la concentration d'indium a été observée dans la structure GaInSb/GaInAsSb tandis que les meilleurs résultats sont obtenues pour  $x < 30\%$  en Indium, tandis que pour la structure GaInSb/GaInAlSb On remarque que la contrainte réduit la valeur de l'épaisseur critique, pour cette structure les meilleurs valeurs de l'épaisseur sont obtenus pour  $x$  en Indium varie de 55 à 75% là où la contrainte est faible.

On peut aussi constater une réduction de la largeur de la bande interdite avec l'augmentation de la concentration d'indium lors de la variation du gap de l'alliage  $Ga_{(1-x)}In_{(x)}Sb$  contraint sur le quaternaire  $Ga_{(1-x)}In_{(x)}As_{(1-y)}Sb_{(y)}$ , car nous avons une seule contrainte (contrainte en compression), car le gap des trous lourds ( $E_{g_{hh}}$ ) est toujours supérieur à celui des trous légers ( $E_{g_{lh}}$ ). Alors que dans la structure GaInSb/GaInAlSb On remarque une réduction de la largeur de la bande interdite avec l'augmentation de la concentration d'indium et une contrainte en tension sur l'intervalle [0 0.6] est présente, on peut distinguer cette contrainte par les niveaux énergétiques de la bande de valence c.-à-d. trous lourds ( $E_{g_{hh}}$ ) est supérieur à celui des trous légers ( $E_{g_{lh}}$ ). Tandis que pour la structure GaInSb/GaInAlSb on a décroissance du gap en fonction de la concentration d'indium, une augmentation du coefficient d'absorption est obtenue. Il y a une saturation du coefficient d'absorption avec l'augmentation de l'énergie du photon incident, cette saturation peut être expliquée ; qu'avec une forte énergie incidente l'excitation des électrons devient plus large, c.-à-d. tous les électrons de la bande de valence ont l'énergie nécessaire pour immigrer vers la bande de conduction

On constate sur l'intervalle [0.6 1] qu'il y a une contrainte en compression car on remarque que le niveau énergétique des trous légers ( $E_{gl}$ ) est inférieur à celui des trous lourds ( $E_{gh}$ ).

Pour l'absorption on peut dire que dans la structure GaInSb/GaInAsSb qu'à cause de la décroissance du gap en fonction de la concentration d'indium, une augmentation du coefficient d'absorption est obtenue. On peut dire aussi qu'il y a une saturation du coefficient d'absorption avec l'augmentation de l'énergie du photon incident, cette saturation peut être expliquée ; qu'avec une forte énergie incidente l'excitation des électrons devient plus large. Alors que pour la structure GaInAlSb on peut dire qu'il y a une saturation du coefficient d'absorption avec l'augmentation de l'énergie du photon incident, cette saturation peut être expliquée ; qu'avec une forte énergie incidente l'excitation des électrons devient plus large, c-à-d tous les électrons de la bande de valence ont l'énergie nécessaire pour immigrer vers la bande de conduction.

Pour le courant photo-courant de la structure GaInSb/GaInAsSb on peut dire qu'il y a une saturation qui est due au fort décroissement du Gap pour des concentrations d'indium intéressantes, alors que pour la structure GaInSb/GaInAlSb on peut dire qu'il y a une amélioration entraîne un accroissement de la puissance délivrée par cette structure. On obtient des valeurs entre 80.5 et 81 mA/Cm<sup>2</sup> pour des concentrations supérieures à 60%, cette saturation est expliquée par l'excitation de tous les électrons de la bande de valence par de faibles énergies de photons car le gap est très faible.

On peut dire que le facteur de forme de la structure GaInSb/GaInAsSb varie entre 49% et 63% alors que celui de la structure GaInSb/GaInAlSb croît de 67% à 87%

Et comme le rendement de la structure GaInSb/GaInAsSb varie entre 11.5% et 13.2%, alors que celui de la structure GaInSb/GaInAlSb augmente de 13.4% à 17.7% .

Donc au détriment de tous ces paramètres, on peut dire à l'issue de notre étude que la structure la plus appropriée pour un meilleur emploi dans le domaine du photovoltaïque est la structure du GaInSb/GaInAlSb.

### 3.8 Conclusion

Dans ce chapitre, nous nous sommes intéressés à l'étude et aux simulations des deux structures afin de faire une comparaison concluante entre elles et de choisir la meilleure entre elles pour la réalisation de notre cellule photovoltaïque :

- Pour la structure GaInSb/GaInAsSb on constate qu'on a une seule contrainte en compression, le facteur de forme varie entre 49% et 63% et un rendement qui varie entre 11.5% et 13.2%.
- Pour la structure GaInSb/GaInAlSb on a deux contraintes, une en tension et une autre en compression, le facteur de forme varie entre 67% et 87% et un rendement qui varie de 13.4% à 17.7%.
- Donc la structure la plus appropriée à l'utilisation des cellules photovoltaïques est la cellule GaInSb/GaInAlSb.

# Conclusion Générale

---

Dans le cadre de ce travail, nous avons étudié deux structures de cellules photovoltaïques GaInSb/GaInAsSb et GaInAlSb .

Dans un premier temps, nous avons présenté le principe de fonctionnement des cellules solaires et les différents facteurs de perte limitant le rendement de conversion.

Dans le deuxième chapitre nous avons fait l'étude fondamentale des semi-conducteurs III-V afin de connaître leurs propriétés, pour bien savoir comment utiliser ces propriétés et d'améliorer le rendement des structures à semi-conducteurs dans les dispositifs optoélectroniques.

Dans le troisième chapitre nous avons simulé les deux structures afin de pouvoir les comparer, on a trouvé que la structure GaInSb/GaInAsSb possède une seule contrainte en compression, son facteur de forme varie entre 49% et 63% et son rendement qui varie entre 11.5% et 13.2%.

Tandis que la structure GaInSb/GaInAlSb on a deux contrainte une en tension et une autre en compression, le facteur de forme varie entre 67% et 87% et un rendement qui varie de 13.4% à 17.7%

Donc la structure la plus appropriée à l'utilisation des cellules photovoltaïques est la cellule GaInSb/GaInAlSb.

## Bibliographie

---

- [1] Jani, J. K., "Development of Wide-Band gap Ingan Solar Cells for high-efficiency Photovoltaics", Georgia institute of technology, (august, 2008).
- [2] Brousse, B., "Réalisation et Caractérisation de Cellules Photovoltaïques Organiques Obtenues par Dépôt Physique", Université de Limoges, (15 décembre 2004).
- [3] Hakim, C., "Optimisation des Procéde Technologique de Réalisation d'une Cellule Solair par la Technique de Diffusion", Université de Batna, (15 décembre 2004).
- [4] Bettignies, B., "Cellules Photovoltaïques Organiques Dérivées de Nouveaux Systèmes Conjugués", université d'Angers, (23 septembre 2003).
- [5] Oi, A., "Design and Simulation of Photovoltaic Water Pumping System", California Polytechnic State University, (september).
- [6] Piprek, J., "Optoelectronic Devices Advanced Simulation and Analysis", Springer, California,(2005).
- [7] singh, j., "Electronic and Optoelectronic Properties of Semiconductor Structures". University of Michigan, Cambridge University Press, (2003).
- [8] Coutaz, j.-l., "Optoélectronique TéraHertz", Avenue du Hoggar Parc d'Activités de Courtaboeuf, Bp 11291944 les Ulis Cedex, France: Edp 17, (2008).
- [9] Soga, T., "Nanostructured Materials for Solar Energy Conversion", Elsevier, . Nagoya, Japan,(First Edition 2006).
- [10] Lelievre, J.-F., "Elaboration de SiNx:H par PECVD: Optemisation des Propriétés Optiques, Passivantes et Structurales pour Applications Photovoltaïques", Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, (24 avril 2007).
- [11] Abdo, F., "Croissance des Couches minces de Silicium par Epitaxie en Phase Liquide a basse Temperature pour Applications Photovoltaïques", Institut National des Science Appliquées de Lyon, (8 mars 2007).

- [12] Damon-Lacoste, J., "Vers une Ingénierie de Bandes des Cellules Solaires à Hétérojonctions a-Si:h/c-Si. Role Prépondérant de l'Hydrogène", Ecole Polytechnique, Paris, (05/07/2007).
- [13] Silvestre, I. C., "Modelling Photovoltaic Systems Using Pspice" Universidad Politecnica de Catalonia, Barcelona, John Wiley & Sons, Ltd, Spain, (2002).
- [14] Foundation, W. (2010, octobre 12). "Fichier: Mendeleïev.jpg". Consulté le mai 15, 2011, sur [www.wikipedia.org: www.wikipedia.org/wiki/fichier:Mendeleïev.jpg](http://www.wikipedia.org/wiki/fichier:Mendeleïev.jpg)
- [15] Hamamatsu Photonics K. K. Editorial Committee 1999 Photomultiplier Tubes— Basics and Applications 2nd edn (Hamamatsu Japan)
- [16] Dereniak E L 1984 Optical Radiation Detectors (New York: Wiley)
- [17] Hector Cotal, C. F., "III–V Multijunction Solar Cells for Concentrating Photovoltaics". Energy & Environmental Science , 174–192, (september 2008).
- [18] Neudeck, W. R. F., "Advanced Semiconductor Fundamentals", Prentice Hall, New Jersey, (Secod Edition).
- [19] Renard, C., "Hétérostructures Antimoniures/Arséniures pour les Applications Optoélectroniques dans le Moyen Infrarouge ", universite paris VII, (30 septembre 2005).
- [20] Bethoux, J.-M., "Relaxation des Contraintes dans les Hétérostructures Epaises (Al,Ga)<sub>n</sub> : une Piste Originale pour la Réalisation de Diodes Electroluminescentes à Cavité Résonante", Université de Nice Sophia-Antipolis, (24 septembre 2004).
- [21] K. Koksal, B. G., "Critical Layer Thickness of GaIn(n)As(sb) qws on GaAs and InP Substrates for (001) and (111) Orientations". the European Physical Journal( 5 may 2009), 211–218.
- [22] Ghione, G., "Semiconductor Devices for High-Speed Optoelectronics", Politecnico Ditorino, Italy, Cambridge University Press, (2009).