

UNIVERSITE DE BLIDA 1
Faculté de Technologie
Département d'électronique
THESE DE DOCTORAT EN SCIENCES
Spécialité : Electronique

Amélioration des cellules solaires à base des matériaux III-V-N : Si.

Par
BAHI AZZOUOUM Ahmed

Devant le jury composé de :

Prof. DJEBARI	Mustapha	Président
Prof. Aissat	Abdelkader	Directeur de thèse
Prof. NACER	Saïd	Examineur
Prof. RAHMOUN	Khadîdja	Examinatrice

BLIDA, 21/05/2025

REMERCIEMENTS

Tout d'abord, je rends grâce à Allah, le Tout-Puissant, de m'avoir accordé le courage, la patience et la volonté nécessaires pour atteindre cet objectif.

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude à Monsieur **Abdelkader Aissat**, professeur à l'université d'Adrar, pour m'avoir encadré au cours de ces années. Mes remerciements vont à lui pour ses conseils précieux, son intérêt soutenu pour mon travail, sa disponibilité, sa patience, et surtout sa confiance en moi, ainsi que pour ses encouragements constants tout au long de ces années d'études doctorales. Que soient également remerciés tous les membres du jury, le **Prof. DJEBARI Mustapha**, le **Prof. NACER Saïd**, et le **Prof. RAHMOUN Khadîdja**, pour l'honneur et l'intérêt qu'ils m'ont accordé, en acceptant d'examiner mon manuscrit.

Je tiens à remercier tous mes collègues de l'université de Chlef pour leurs encouragements et leurs contributions à ce travail.

Enfin, il m'est extrêmement agréable de remercier particulièrement tous ma famille pour leur présence, leur soutien, et leurs encouragements permanents.

الملخص

تطورت مصادر الطاقة الفضائية من البطاريات والطاقة النووية إلى خلايا شمسية من غالسيوم أرسينيد، ثم إلى خلايا متعددة الوصلات الحالية. توفر خلايا التانديم الهجينة III-V-N//Si حلاً واعدًا لقطاع الفضاء الجديد، مع غالسيوم أرسينيد الفوسفيدي (GaAsPN) كمادة مثالية للخلايا الفرعية العليا بفضل توافقها مع السيليكون. بالنسبة للخلايا ثنائية الوصلة، فإن إدخال النيتروجين يحقق توازنًا بين الخصائص الكهربائية والبصرية، مما يحسن الاستجابة الطيفية في نطاق الأشعة تحت الحمراء القريبة على الرغم من انخفاض طفيف في الكفاءة. تؤكد النتائج أن فجوة الطاقة البالغة 1.7 إلكترون فولت للخلايا الفرعية العليا و 1.1 إلكترون فولت للسيليكون تعزز الأداء. تصل خلايا $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x/\text{SiGe}/\text{Ge}$ إلى كفاءة تبلغ 38.45% بسماكة 4.5 ميكرومتر و $P=47\%$. في المستقبل، نهدف إلى توسيع أبحاثنا لتشمل خلايا شمسية قائمة على سبائك جديدة، لنمذجة وتحسين خلايا شمسية ذات 4 و 5 وصلات.

الكلمات الرئيسية: خلية متعددة الوصلات، 2J، 3J، III-V، سيليكون، نيتروجين، كفاءة، GaAsPN.

Resumé

L'évolution des sources d'énergie satellitaires a progressé des batteries et du nucléaire vers les cellules solaires GaAs, puis vers les cellules multi-jonctions actuelles. Les cellules tandem hybrides III-V-N//Si offrent une solution prometteuse pour le NewSpace, avec le GaAsPN comme matériau optimal pour les sous-cellules supérieures grâce à sa compatibilité avec le silicium. Pour les cellules 2J, l'incorporation d'azote établit un équilibre entre les propriétés électriques et optiques, améliorant la réponse spectrale dans le proche infrarouge malgré une légère baisse de rendement. Les résultats confirment qu'une énergie de bande interdite de 1,7 eV en tant que sous-cellule supérieure avec 1,1 eV de Silicium optimise les performances. Les cellules 3J $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x/\text{SiGe}/\text{Ge}$ atteignent une efficacité de 38,45% à une épaisseur de 4,5 μm et un $P=47\%$. Dans l'avenir, nous visons à étendre nos recherches aux cellules solaires basées sur de nouveaux alliages, pour modéliser et optimiser des cellules solaires à 4 et 5 jonctions.

Mots-clés : Cellule multijonctions, 2J, 3J, III-V, Si, N, rendement, GaAsPN.

ABSTRACT

Satellite power sources have evolved from batteries and nuclear power to GaAs solar cells, then to current multi-junction cells. III-V//Si hybrid tandem cells offer a promising solution for NewSpace, with GaAsPN as an optimal material for top sub-cells due to its silicon compatibility. For 2J cells, nitrogen incorporation achieves a balance between electrical and optical properties, improving spectral response in the near-infrared despite a slight efficiency decrease. Results confirm that a 1.7 eV gap us a top sub-cell and 1.1 eV of silicon optimizes performance. 3J $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x/\text{SiGe}/\text{Ge}$ cells achieve 38.45% efficiency with 4.5 μm thickness and $P=47\%$. In the future, we aim to extend our research to solar cells based on new alloys, mainly quaternary and quinary, to model and optimize 4- and 5-junction solar cells.

Keywords: Multijunction cell, 2J, 3 J, III-V, Si, N, efficiency, GaAsPN.

TABLE DES MATIERES

Remerciements	II
Résumé	III
Table des matières	IV
Liste des figures	VIII
Liste des tableaux	XI
Liste des abréviations	XII
Liste des symboles	XIII
Introduction générale.....	2
Références	8

Chapitre I : Notions générales sur les cellules solaires

I.1 Introduction.....	11
I.2 Histoire et motivation	11
I.3 Spectre solaire	13
I.4 Cellules photovoltaïques	15
I.4.1 Définition	15
I.4.2 Structure et principe de fonctionnement	16
I.5 Caractéristiques électriques d'une cellule solaire	17
I.5.1 Courant de court-circuit (J_{CC}).....	18
I.5.2 Tension de circuit ouvert (V_{co})	19
I.5.3 Facteur de forme (FF)	19
I.5.4 Rendement de conversion (η)	20
I.5.5 Réponse spectrale (RS)	20
I.5.6 Rendement quantique (QE).....	22
I.5.6.1 Rendement quantique externe (EQE)	22
I.5.6.2 Rendement quantique interne (IQE).....	22
I.6 État de l'art des technologies de cellules solaires.....	22
I.6.1 Première Génération à base de silicium cristallin	23
1.6.1.1 Cellules monocristallin	25
1.6.1.2 Cellules poly-cristallines	25

I.6.2 Deuxième génération à base des couches minces	26
I.6.3 Troisième génération.....	27
I.6.3.1 Cellules hétérostructures.....	27
I.6.3.2 Cellules multijonctions	27
I.6.3.3 Cellules organiques.....	28
I.6.3.4 Cellules hybrides	28
I.6.3.5 Cellules solaires à bande intermédiaire	29
I.6.3.6 Cellules nano-structurées.....	30
I.7 Conclusion	32
Références	33

Chapitre II : Etat de l’art des cellules tandem III-V-N/Si

II.1 Introduction	39
II.2 Limites des cellules solaires à jonction unique.....	39
II.2.1 Limitation par la Largeur de Bande	40
II.2.2.1 Pertes de Thermalisation	40
II.2.2.2 Pertes de Transmission (Photons Non Absorbés)	40
II.2.2 Limite de Shockley-Queisser (SQ)	41
II.3 Principe d'une cellule solaire à jonction multiple (MJ)	42
II.4 Outils de modélisation de l’effet tunnel des cellules tandem	44
II.4.1 Transition directe de bande à bande (BTB)	45
II.5 Architectures possibles et exigences associées	48
II.5.1 Configuration à deux terminaux (2T)	48
II.5.2 Configuration à quatre terminaux (4T)	49
II.5.3 Configuration à trois terminaux (3T)	50
II.6 Cellules Multijonctions CPV : Du spatial vers terrestre.....	50
II.7 Etat de l’art des cellules Tandem à base matériaux III-V.....	51
II.7.1 Première partie : Cellules à double jonction III-V/ Si	51
II.7.2 Deuxième partie : Cellules à double jonction III-V/ GaAs.....	52
II.7.3 Troisième partie : Évolution des cellules triple et quatre jonctions.....	52
II.8 Défis liés à la croissance de matériaux III-V/Si et solution proposée	54
II.8.1 Défi du désaccord de maille.....	54

II.8.2 Défi de la différence de dilatation thermique	55
II.8.3 Solution 1 : Croissance directe des matériaux III-V sur Si.....	55
II.8.4 Solution 2 : Croissance à distance et collage	57
II.9 Etat de l'art des cellules Tandem à base matériaux III-V-N	58
II.9.1 Exemple de l'alliage GaInAsN.....	59
II.10 Conclusion	60
Références	61

Chapitre III : Résultats de simulations des cellules 2J III- V-N : Si

III.1 Introduction	68
III.2 Aperçu sur le logiciel Atlas Silvaco	69
III.3 Optimisation des cellules solaire 2J $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x$ /GaAs : Si	71
III.3.1 Justification du choix des matériaux	72
III.3.2 Effets de la contrainte de Phosphore P	73
III.3.3 Effets de l'éclairement.....	75
III.3.4 Effets de la température	77
III.3.5 Effets de la jonction tunnel (TJ)	78
III.3.6 Comparaison entre J-V de cellule 2J et ces deux cellules individuelles	78
III.4 Optimisation de la cellule tandem III-V-N-Si.....	79
III.4.1 Pour quoi les matériaux III-V-N.....	79
III.4.2 Pour quoi le choix de GaAsPN.....	80
III.4.3 Modèle théorique	81
III.4.4 Effet de l'incorporation d'Azote sur EQE	83
III.4.5 L'effet de l'incorporation de l'azote sur les caractéristiques J-V	84
III.5 Etude comparative entre les deux structures	85
III.5.1 Caractéristiques optiques	85
III.5.1 Caractéristiques électriques	86
III.6 Conclusion.....	87
Références	88

Chapitre IV : Résultats de simulations des cellules 3J III- V-N

IV.1 Introduction	92
IV.2 Justification du choix de structure 3J	92
IV.3 Modèle théorique	94
IV.4 Etude physique	96
IV.4.1 Cas des matériaux $\text{Si}_{1-z}\text{Ge}_z / \text{Ge}$	97
IV.4.2 Cas des matériaux $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x/\text{Si}_{0.12}\text{Ge}_{0.88}$	98
IV.5 Résultat de la cellule 3J à base de matériau III V	99
IV.5.1 Effet de la concentration du phosphore	99
IV.5.2 Effet de l'épaisseur de l'absorbeur $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x$	101
IV.5.3 Comparaison entre J-V de cellule 3J et de ses sous cellules individuelles	102
IV.6 Comparaison avec des cellules expérimentales 2J	103
IV.6.1 Caractéristiques EQE	103
IV.6.2 Caractéristiques JV	104
IV.7 L'effet de l'incorporation de l'azote dans la cellule 3J	105
IV.8 Conclusion	108
Références	109
Conclusion générale	112

Liste des figures

Chapitre I

Figure (I.1) : Spectre électromagnétique.	13
Figure (I.2) : Applications spatiales AM0 et terrestres AM1.5 du spectre solaire.	14
Figure (I.3) : Coupe longitudinale d'une cellule solaire.	15
Figure (I.4) : Caractéristiques I(V) à l'obscurité et sous éclairage d'une cellule photovoltaïque.	17
Figure (I.5) : Circuit électrique équivalent d'une cellule solaire non idéale.	18
Figure (I.6) : Caractéristiques I(V) d'une cellule solaire.	20
Figure (I.7) : Différents types de cellules solaires : (a) : Si monocristallin; (b) : Si polycristallin; (c) : Si amorphe; (d) : CdTe; (e) : CuInSe ₂ ; (f) : multijonctions.	23
Figure (I.8) : Schéma simplifié d'une cellule solaire CIGS.	26
Figure (I.9) : Présentation schématique d'une cellule DSSC.	28
Figure (I.10) : Processus d'absorption de photons à basse énergie dans les cellules solaires à bande intermédiaire.	29
Figure (I.11) : Circuit équivalente d'une cellule solaire à bande intermédiaire.	30

Chapitre II

Figure (II.1) : Limitations des cellules solaires à jonction unique.	40
Figure (II.2) : L'efficacité idéale d'une cellule solaire en fonction des gaps des semiconducteurs, avec les pertes correspondantes.	41
Figure (II.3) : Structure d'une cellule solaire à trois jonctions.	42
Figure (II.4) : Illustration des concepts physiques de modèle de tunneling BTB. (a) BTB locaux. (b) BTB non locaux.	46
Figure (II.5) : Configuration à deux terminaux.	48
Figure (II.6) : Configuration à quatre terminaux.	49
Figure (II.7) : Configuration à trois terminaux.	50
Figure (II.8) : L'efficacité (AM0) pour les cellules tandem Al _x Ga _{1-x} As/Si .	51

Figure (II.9) : a) Réduction de la densité de dislocations avant la croissance du couche tampon par l'utilisation des filtres et le TCA. b) Croissance d'une cellule GaAs sur Si en utilisant une couche tampon SiGe .	55
Figure (II.10) : a) Image MET haute définition de l'interface de la cellule III-V collée sur une cellule en silicium. b) Image de Microscopie Acoustique à Balayage de la cellule III-V collée sur le Si. Les zones noires sont correctement collées, les zones blanches sont des vides dus à la contamination de surface.	57
Chapitre III	
Figure (III.1) : Entrées et sortie fournis par Atlas.	69
Figure (III.2) : Une aperçue sur les étapes à suivre lors de la rédaction d'un code dans Atlas Silvaco.	70
Figure (III.3) : Structure de la cellule tandem à base de matériau III-V-Si.	71
Figure (III.4) : Caractéristiques J-V en fonction de de la variation de phosphore.	74
Figure (III.5) : Paramètres caractéristiques de cellule 2J en fonction de phosphore.	75
Figure (III.6) : Caractéristiques J-V en fonction de l'éclairement.	76
Figure (III.7) : Caractéristiques J-V en fonction de température.	77
Figure (III.8) : Comparaison entre J-V de la cellule 2J et ces deux cellules individuelles.	79
Figure (III.9) : Evolution de l'énergie de la bande interdite pour le GaAsPN pour différentes compositions de N.	81
Figure (III.10) : Structure de la cellule tandem à base de matériau III-V-N-Si.	82
Figure (III.11) : Variations de contrainte entre $\text{GaAs}_{1-x-\gamma}\text{P}_x\text{N}_\gamma/\text{GaAs}$ en fonction de la composition de phosphore et azote.	83
Figure (III.12) : Variation de l'EQE pour différentes compositions de N.	83
Figure (III.13) : Caractéristiques J-V en fonction de N.	84
Figure (III.14) : Variation de l'EQE pour les deux structures avec et sans azote.	85
Figure (III.15) : Caractéristiques J-V pour les deux structures avec et sans azote.	86

Chapitre IV

Figure (IV.1) : Structure de la cellule solaire proposée $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x/\text{Si}_{0.12}\text{Ge}_{0.88}/\text{Ge}$.	93
Figure (IV.2) : Variations de contrainte entre $\text{Si}_{1-z}\text{Ge}_z/\text{Ge}$ et énergie de bande interdite du SiGe en fonction de la composition de germanium.	97
Figure (IV.3) : Variations de contrainte entre de $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x/\text{Si}_{0.12}\text{Ge}_{0.88}$ et énergie de bande interdite du GaAsP en fonction de la composition de phosphore.	99
Figure (IV.4) : J-V de la cellule 3J pour différentes concentrations en P.	100
Figure (IV.5) : P-V de la cellule 3J pour différentes concentrations de P.	100
Figure (IV.6) : Variations des paramètres de la cellule proposée en fonction de l'épaisseur (d) de la couche absorbante GaAsP, a) Effet de d sur le Jsc et le Voc, b) Effet de d sur le FF et η .	101
Figure (IV.7) : Comparaison entre J-V de la cellule solaire 3J et de ces trois cellules solaires individuelles.	102
Figure (IV.8) : Comparaison entre EQE de notre structure avec deux cellules expérimentales.	104
Figure (IV.9) : Comparaison entre les propriétés électriques de notre structure avec deux cellules expérimentales.	105
Figure (IV.10) : Variations de contrainte entre $\text{GaAs}_{1-x-y}\text{P}_x\text{N}_y / \text{Si}_{0.12}\text{Ge}_{0.88}$ en fonction de la composition de phosphore et azote.	106
Figure (IV.11) : Caractéristiques P-V en fonction de N.	107
Figure (IV.12) : Comparaison entre J-V de la cellule solaire 3J et de ces trois cellules solaires individuelles.	108

Liste des tableaux

Chapitre I

Tableau (I.1) : Différents types du paramètre « Air Mass ». 14

Tableau (I.2) : Avantages et les inconvénients du silicium dans les applications photovoltaïques. 24

Tableau (I.3) : Quelques propriétés du silicium. 25

Chapitre II

Tableau (II.1) : Etat de l'art de Cellule solaire multi-jonction AM1.5. 43

Chapitre III

Tableau (III.1) : Commande utilisée pour la spécification de la solution dans Atlas Silvaco . 71

Tableau (III.2) : Variation de rendement et FF en fonction de l'éclairement. 76

Tableau (III.3) : L'évolution de rendement et FF en fonction de température. 77

Tableau (III.4) : L'évolution de rendement et FF en fonction de différentes jonctions TJ. 78

Tableau (III.5) : Paramètres physiques et optiques de GaAsPN pour x égale à 47%. 82

Tableau (III.6) : Paramètres caractéristiques de nouvelle cellule 2J pour x égale à 47%. 85

Chapitre IV

Tableau (IV.1) : Paramètres caractéristiques de nouvelle cellule 3J pour x égale à 47%. 106

Tableau (IV.2) : J-V de la cellule 3J pour différentes concentrations en P à N égale à 1%. 107

ABREVIATIONS

2J	Double Jonctions.
3J	Triple Jonctions.
AFORS-HET	Automat FOR Simulation of HETerojunction solar cells
AM1.5G	Air Mass Global.
ASA	Advanced Semiconductor Analysis
ASPIN3	Analysis and Simulation Program for Photovoltaic Inhomogeneities - 3D
Atlas	Utilisé dans Silvaco pour la simulation avancée de dispositifs à semi-conducteurs
BSF	Back Surface Field.
CAD	Computer-Aided Design
CBE	Chemical Beam Epitaxy.
EDA	Electronic Design Automation
EQE	Efficacité Quantique Externe.
EQI	Efficacité Quantique Interne.
FF	Facteur de Forme.
HOMO	Highest Occupied Molecular Orbital
III-V	Eléments des groupes III et V du tableau périodique.
LUMO	Lowest Unoccupied Molecular Orbital
MBE	Molecular Beam Epitaxy.
MC	Mono Couche.
MEB	Microscope Electronique à Balayage.
MJSC	Multi-Junction Solar Cell
MOCVD	Metalorganic Chemical Vapor Deposition.
MPP	Maximum Power Point.
PC1D	Personal Computer One-Dimensional
SCAPS	Solar Cell Capacitance Simulator
SETFOS	Semiconductor Thin-Film Optics Simulator
TCAD	Technology Computer-Aided Design
ZCE	Zone de Charge Espace.

SYMBOLES

As	Arsenic.
P	Phosphore.
N	Nitrure (Azote).
Si	Silicium.
Ge	Germanium.
Ga	Gallium.
λ	Longueur d'onde de la lumière incidente.
N_D	Densité des atomes donneurs.
N_A	Densité des atomes accepteurs.
n_0	Densité des électrons à l'équilibre thermodynamique.
n	Densité des électrons hors équilibre.
p	Densité des trous hors équilibre.
D_n	Coefficient de diffusion des électrons.
D_p	Coefficient de diffusion des trous.
τ_n	Durée de vie des électrons.
τ_p	Durée de vie des trous.
L_p	Longueur de diffusion des trous.
L_n	Longueur de diffusion des électrons.
α	Coefficient d'absorption.
G	Taux de génération optique.
R	Coefficient de réflexion.
ϕ_0	Flux de photons incidents.
S_n	Vitesse de recombinaison des électrons.
S_p	Vitesse de recombinaison des trous.
I_{obs}	Courant d'obscurité.
I_{ph}	Photo courant.
J_e	Densité de photo courant de l'émetteur.
J_b	Densité de photo courant de la base.
J_{ZCE}	Densité de photo courant de la ZCE.
x_j	Profondeur de jonction.
W	Largeur de la ZCE.
n_i	Concentration intrinsèque.
I_0	Courant de saturation de la diode.
R_s	Résistance série.

R_p	Résistance de shunt.
J_{cc}	Densité de courant de court-circuit.
V_{co}	Tension de circuit ouvert.
FF	Facteur de forme.
η	Rendement ou l'efficacité de conversion d'une cellule solaire.
P	Puissance délivrée par une cellule.
E_{ph}	Energie des photons incidents.
h	Constante de Planck.
$\hbar$	Constante de Planck réduite.
E	Energie de l'électron.
m_e^*	Masse effective de l'électron.
m_h^*	Masse effective du trou.
E_g	Energie de la bande interdite.
a_s	Paramètre de maille du substrat.
E_c	Bande de conduction.
E_v	Bande de valence.
x	Fraction molaire d'un élément chimique dans un composé.
y	Fraction molaire d'un élément chimique dans un composé.
k_B	Constante de Boltzmann.
T	Température.
E	Champ électrique.
E_F	Energie de niveau de Fermi.
N_c	Densité effective des électrons.
N_v	Densité effective des trous.
ν	Fréquence de photon.
I	Courant total de la cellule solaire.
I_m	Courant maximale.
V_m	Tension maximale.
P_m	Puissance maximale.
I_{cc}	Courant de court-circuit.
c	Vitesse de la lumière.
m_0	Masse d'électron.

INTRODUCTION

GENERALE

Introduction générale

L'exploration et la découverte de l'espace ont considérablement évolué au fil du temps, depuis l'utilisation du premier télescope en 1609 jusqu'aux nombreux engins spatiaux et satellites opérationnels dans l'espace aujourd'hui. Ces véhicules sont conçus pour voler et fonctionner en dehors de notre planète afin d'accomplir une vaste gamme de missions. Mais pourquoi l'espace ?

La course à l'espace a débuté pendant la période de Guerre Froide entre les États-Unis et l'URSS, durant laquelle chaque gouvernement cherchait à démontrer sa supériorité technologique. En 1957, 'Spoutnik-1' et 'Spoutnik-2' furent les premiers satellites lancés dans l'espace en basse orbite terrestre (LEO) pour mesurer la densité des couches atmosphériques. En 1958, les États-Unis lancèrent leur premier satellite, 'Explorer-1', qui découvrit pour la première fois l'existence de la magnétosphère autour de la Terre. Par la suite, les missions se sont succédé, promues par divers acteurs à travers le monde [1].

La large gamme de missions effectuées dans l'espace se répartit en trois secteurs principaux : militaire, économique et scientifique. Néanmoins, elles ont toutes en commun le besoin d'énergie électrique. La question se pose alors : d'où ces engins spatiaux tirent-ils leur énergie ? En effet, l'approvisionnement énergétique est essentiel pour envoyer et recevoir des signaux vers et depuis le sol, ainsi que pour assurer le positionnement et l'orientation de l'engin tout au long de sa mission (viabilité).

Divers types de générateurs d'énergie ont été utilisés pour les satellites, notamment : les batteries, l'énergie nucléaire et les cellules solaires. Chaque technologie présente ses propres avantages et défis en termes de coût du système, de masse, de limites d'utilisation et de viabilité.

Historiquement, les cellules solaires en silicium cristallin (c-Si) ont été développées par le laboratoire 'Bell' et rapidement adaptées aux applications spatiales. Leur première utilisation a eu lieu à bord de 'Vanguard I', lancé en 1958. Le générateur solaire utilisé était basé sur la technologie des cellules solaires en Si avec une efficacité de 8 à 10% [1].

Depuis lors, les cellules solaires sont devenues la source d'énergie dominante dans l'espace en raison du faible coût de lancement de ce type de système. Cependant, à l'époque les points critiques pour les cellules solaires en Si étaient leur efficacité relativement faible et leur dégradation face aux irradiations. De plus, l'énergie solaire a des limites d'utilisation en termes de distance par rapport au Soleil, qui est la source d'énergie.

Introduction générale

Des recherches ont été menées d'une part pour améliorer leur efficacité de conversion initiale en optimisant l'architecture (par exemple, l'utilisation de champs de surface arrière), et d'autre part, pour augmenter leur résistance aux radiations (par exemple, passage des cellules solaires de type n vers des cellules de type p). Compte tenu de l'expansion significative des missions spatiales et des avancées technologiques dans les opérations des engins spatiaux, le besoin en énergie a également augmenté. Dans les années 1980, la technologie des cellules Si a été abandonnée progressivement et remplacée par des matériaux III-V (principalement GaAs) offrant de meilleures performances et une plus grande résistance aux radiations.

Cependant, les performances de ces cellules à jonction unique étaient encore limitées. Une nouvelle génération de cellules à double jonction (2J) a été proposée et adoptée, offrant une meilleure absorption et conversion du spectre solaire, avec des efficacités initiales atteignant 21,8% à l'époque. Cette technologie à double jonction a été lancée pour la première fois en 1984 [2]. Toutefois, elle est également devenue obsolète à un certain moment, et a été supplantée à partir de 2000 par des cellules à triple jonction (3J) dont l'efficacité dépasse 25%, devenant la technologie de pointe pour les applications spatiales. En 2021, l'efficacité de cette technologie atteint 37,9 % [3]. Le coût de ces cellules est très élevé par rapport aux autres technologies de cellules solaires en raison de la rareté de certains matériaux III-V et du processus de fabrication relativement complexe.

Le comportement des cellules solaires peut varier d'un environnement à l'autre, en fonction de la fluence totale de la mission spatiale, des caractéristiques d'irradiation, de la température de fonctionnement et de l'intensité de l'irradiante. Par exemple, les recherches ont montré que la dégradation des cellules solaires triple-jonction III-V/Ge dans des conditions d'irradiance normale et de température ambiante est principalement due à la dégradation de la cellule médiane en GaAs [4]. En revanche, dans des conditions de faible intensité et basse température, la sous-cellule en germanium devient le facteur limitant [5].

Le principal inconvénient des cellules multi-jonctions III-V reste leur coût élevé, qui peut être 2 à 3 fois supérieur à celui du photovoltaïque terrestre en silicium. Aujourd'hui, L'industrie PV terrestre en silicium a atteint un haut degré de maturité industrielle (marché annuel > 100 GW) et des prix très bas (module 2018 ~ 0,2€/W) [3]. Actuellement, le marché PV annuel spatiales est estimé à environ 1 MW. Compte tenu des futures applications telles que le lancement de milliers de satellites pour la couverture Internet mondiale (constellations LEO), le tourisme spatial et la création de bases lunaires et martiennes, ce marché PV pourrait croître de deux ordres de grandeur chaque décennie à venir.

Introduction générale

Dans ce contexte de croissance du marché, de diversification des applications et de défi de réduction des coûts auxquels les technologies spatiales sont confrontées (la révolution "NewSpace"), il est intéressant d'étudier le potentiel de la technologie des cellules solaires hybrides III-V//Si pour l'espace.

Le silicium est un candidat intéressant comme alternative de cellule inférieure pour les cellules solaires multi-jonctions III-V pour plusieurs raisons. En 2020, le record des cellules III-V//Si atteignent des performances similaires ($> 34\%$ AM1.5g) à celles des cellules solaires III-V/Ge conventionnelles [6]. Le matériau de Si a un coût significativement inférieur à celui du Ge et sa densité est plus de deux fois plus faible (économie de masse) que Ge [7]. Bien que sa longueur de diffusion élevée le rende plus sensible à l'irradiation par rapport au Ge, il est possible d'atténuer cette faible résistance aux radiations par des choix appropriés ; d'épaisseur, de dopage, d'impuretés et d'architecture [8].

De plus, en tant que substrat, le silicium, est plus léger, mécaniquement plus résistant, et possède des conductivités thermique et électrique relativement élevées, ce qui est très souhaitable pour les applications photovoltaïques à concentration terrestre (CPV) où les conditions d'exploitation incluent des courants élevés et des flux thermiques importants [9]. Une étude récente a estimé que le passage d'un substrat en Ge de 100 mm à un substrat en Si de 200 mm pourrait réduire le coût des cellules solaires multijonctions de 60 % [10].

L'intégration monolithique des semi-conducteurs composés III-V sur des substrats en silicium revêt une importance majeure pour les dispositifs électroniques, optoélectroniques et photovoltaïques de nouvelle génération [9-13]. Dans le domaine de la conversion d'énergie, grâce à la possibilité d'utiliser des substrats en silicium de grand diamètre allant jusqu'à 450 mm et la réussite de réduction du désaccord de maille entre les matériaux III-V et le Si, le coût des cellules solaires multijonctions pourrait entraîner une réduction significative. Une efficacité de 25,9% est atteinte par M. Feifel et *al* [14].

Bien que, il existe plusieurs problèmes fondamentaux qui rencontrés lors de la croissance des semi-conducteurs III-V/Si, par exemple, un désaccord de maille d'environ 4 % reste un obstacle majeur à la croissance de couches de GaAs de haute qualité sur substrat Si [10]. Plusieurs groupes de chercheurs ont proposé diverses approches pour réduire la densité de dislocations (TDD) en dessous de la valeur nominale de 10^9 cm^{-2} . Ces approches incluent, les couches tampons graduées, les cycles thermiques, les substrats structurés.

Bien que certaines aient réussi à réduire la TDD jusqu'à $2 \times 10^8 \text{ cm}^{-2}$ ou moins, ce qui permet leurs utilisation pour des applications optoélectroniques telles que les cellules solaires, ces solutions souffrent de processus complexes et coûteux [10].

Les alliages III-V-N (nitrures dilués) apparaissent comme une solution prometteuse aux défis de l'épitaxie III-V/Si dans la conception des cellules tandems. Ces matériaux présentent l'avantage d'avoir une compatibilité de paramètre de maille avec le silicium et une large bande interdite, assurant leur transparence par rapport au silicium [15-17].

Cette thèse étudie les cellules solaires tandems III-V-N/Si pour développer des dispositifs photovoltaïques alliant performance et économie, dans le contexte de la transition énergétique. Utilisant le GaAsPN comme matériau III-V-N représentatif, la seconde partie examine une nouvelle configuration via des simulations numériques Silvaco-Atlas pour optimiser les performances selon la composition en azote. Notre recherche examine l'optimisation des cellules solaires 2J et 3J utilisant des matériaux III-V/Si, en étudiant :

- L'influence des paramètres clés sur les performances :
 - Épaisseur de l'absorbeur supérieur.
 - Concentration en phosphore.
 - Teneur en azote.
 - Température.
- La détermination des configurations optimales via Silvaco-Atlas pour maximiser l'efficacité.
- L'impact de l'azote dans les matériaux III-V sur les performances des cellules multi-jonctions.
- L'amélioration potentielle du rendement en passant d'une configuration 2J à 3J.

Notre travail est structuré en quatre chapitres :

Le premier chapitre de cette étude offre une introduction exhaustive aux technologies photovoltaïques, couvrant à la fois leurs fondements historiques et leurs récentes avancées. Il débute par un examen approfondi de l'évolution des technologies électroniques et optoélectroniques des cellules solaires, mettant en lumière les motivations qui ont conduit au développement des technologies énergétiques modernes. L'accent est mis sur la compréhension des interactions entre la lumière et la matière, l'analyse du rayonnement électromagnétique solaire et l'étude des propriétés des semi-conducteurs essentielles au photovoltaïque.

Introduction générale

Ce chapitre explicite ensuite les mécanismes fondamentaux de la conversion photovoltaïque, en détaillant les paramètres clés tels que le courant de court-circuit, la tension de circuit ouvert et le facteur de remplissage, qui influencent directement l'efficacité des cellules solaires. Il se conclut par un panorama des principales technologies photovoltaïques, allant des cellules à base de silicium aux technologies à couches minces, en passant par les innovations de troisième génération comme les cellules tandem et organiques. Cette vue d'ensemble souligne les améliorations potentielles en termes d'efficacité et de flexibilité d'application, préparant ainsi le terrain pour une analyse plus approfondie des développements récents dans les chapitres suivants.

Le deuxième chapitre aborde les cellules solaires multijonctions, ou tandem, comme solution aux limitations inhérentes des cellules conventionnelles à jonction unique. Il met en lumière la superposition de plusieurs couches de semi-conducteurs dans ces dispositifs avancés, chacune ciblant une portion spécifique du spectre solaire. Le chapitre explore les principes fondamentaux des cellules tandem et les outils de modélisation nécessaires à l'analyse des phénomènes de tunnel, en particulier la transition directe inter-bandes. Une attention particulière est portée à l'apport des nitrures dans l'amélioration des performances des matériaux III-V/Si pour les cellules multijonctions, soulignant leur capacité unique d'ajustement de la bande interdite et d'optimisation des interfaces. L'analyse s'étend aux diverses configurations de cellules multijonctions et aux défis liés à la croissance des matériaux III-V sur substrats de silicium, en intégrant le rôle crucial des nitrures. Ce chapitre vise ainsi à présenter un état de l'art complet des cellules tandem III-V-N/Si, mettant en exergue les avancées récentes et les défis technologiques qui façonnent l'avenir de cette technologie prometteuse dans le domaine photovoltaïque.

Le troisième chapitre se concentre sur l'étude des cellules tandem à base de couches minces III-V-N-Si, combinant les avantages des deuxième et troisième générations de cellules solaires. Ces cellules à double jonction utilisent deux jonctions PN ou NP avec des bandes interdites différentes pour absorber la lumière sur une plus large gamme de longueurs d'onde, offrant ainsi un meilleur rendement énergétique que les cellules conventionnelles. La structure étudiée comprend une sous-cellule supérieure en matériaux III-V-(N) (avec et sans azote) et une sous-cellule inférieure hybride, combinant une couche de matériaux III-V à base de GaAs et une couche de silicium. Le chapitre présente des simulations numériques réalisées avec le logiciel Silvaco-Atlas, visant à optimiser les performances de deux configurations distinctes : $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x/\text{GaAs:Si}$ et $\text{GaAsPN}/\text{GaAs:Si}$.

Introduction générale

La première partie examine l'influence de paramètres tels que l'éclairement, la fraction de phosphore et la température sur les cellules $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x/\text{GaAs:Si}$, tandis que la seconde partie se concentre sur l'optimisation des performances de la configuration $\text{GaAsPN}/\text{GaAs:Si}$ en fonction de la composition de l'azote. Cette approche permet d'explorer en profondeur le potentiel de ces structures innovantes pour améliorer l'efficacité des cellules solaires.

Le dernier chapitre présente deux approches alternatives visant à améliorer les résultats du chapitre précédent et à explorer l'impact de l'azote dans les cellules solaires multi-jonctions avancées. La première option étudie une cellule tandem à triple jonction (3J), qui exploite trois jonctions pour optimiser le rendement énergétique en ciblant différentes bandes spectrales, augmentant ainsi l'efficacité de conversion de l'énergie solaire. La seconde alternative maintient la structure de base mais remplace le matériau III-V par un composé III-V-N, introduisant l'azote dans la structure cristalline. Cette modification vise à influencer significativement les propriétés électroniques de la cellule, notamment le gap énergétique, la mobilité des porteurs de charge et la réponse spectrale. Ces deux approches offrent des perspectives prometteuses pour repousser les limites actuelles de l'efficacité des cellules solaires, en explorant des configurations innovantes et des modifications de composition des matériaux semi-conducteurs utilisés.

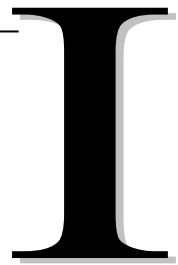
Références

- [1] R. Verduci, V. Romano, G. Brunetti, et N.Y Nia, « Solar Energy in Space Applications: Review and Technology Perspectives », *Adv. Energy Mater.*, vol. 12, n° 29, p. 2200125, août 2022, doi: 10.1002/aenm.202200125.
- [2] C.-S. Jiang, D. J. Friedman, J. F. Geisz, H. R. Moutinho, M. J. Romero, et M. M. Al-Jassim, « Distribution of built-in electrical potential in GaInP₂/GaAs tandem-junction solar cells », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 83, n° 8, p. 1572-1574, août 2003, doi: 10.1063/1.1602575.
- [3] K. Medjoubi, « Investigation of new solar cell technology III-V//Si behavior under irradiations for space applications », Thèse de doctorat, Institut Polytechnique de Paris, 2021, <https://theses.hal.science/tel-03220969>.
- [4] G. Yan, J. Wang, J. Liu, Y. Liu, R. Wu, et R. Wang, « Electroluminescence analysis of V_{OC} degradation of individual subcell in GaInP/GaAs/Ge space solar cells irradiated by 1.0 MeV electrons », *J. Lumin.*, vol. 219, p. 116905, mars 2020, doi: 10.1016/j.jlumin.2019.116905.
- [5] S. Park, J.C. Bourgoin, O. Cavani, V. Khorenko, et C. Baur, « origin of the degradation of triple junction solar cells at low temperature » *E3S Web of Conferences*, vol. 16, p. 04004, 2017.
- [6] D. Lackner., O. Höhn, R. Müller, P. Beutel, P. Schygulla, et H; Hauser, « Two-Terminal Direct Wafer-Bonded GaInP/AlGaAs//Si Triple-Junction Solar Cell with AM1.5g Efficiency of 34.1% », *Sol. RRL*, vol. 4, n° 9, sept. 2020, doi: 10.1002/solr.202000210.
- [7] E. M. Gaddy, « Cost trade between multijunction, gallium arsenide and silicon solar cells », *Prog. Photovolt. Res. Appl.*, vol. 4, n° 2, p. 155-161, mars 1996, doi: 10.1002/(sici)1099-159x(199603/04)4:2<155::aid-pip128>3.3.co;2-r.
- [8] A. U. Rehman, S. H. Lee, et S. H. Lee, « Silicon space solar cells: progression and radiation-resistance analysis », *J. Korean Phys. Soc.*, vol. 68, n° 4, p. 593-598, févr. 2016, doi: 10.3938/jkps.68.593.
- [9] N. Jain et M. K. Hudait, « III–V Multijunction Solar Cell Integration with Silicon: Present Status, Challenges and Future Outlook », *Energy Harvest. Syst.*, vol. 1, n° 3-4, janv. 2014, doi: 10.1515/ehs-2014-0012.
- [10] A. B. P. Mbeunmi, R. Arvinte, et A. Jaouad, « Direct growth of GaAs solar cells on Si substrate via mesoporous Si buffer », *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, vol. 217, p. 110641, nov. 2020, doi: 10.1016/j.solmat.2020.110641.

- [11] Z. Wang, B. Tian, M. Pantouvaki, W. Guo³, et P. Absil, « Room-temperature InP distributed feedback laser array directly grown on silicon », *Nat. Photonics*, vol. 9, n° 12, p. 837-842, déc. 2015, doi: 10.1038/nphoton.2015.199.
- [12] J. Justice, C. Bower, M. Meitl, M. B. Mooney, M. A. Gubbins, et B. Corbett, « Wafer-scale integration of group III–V lasers on silicon using transfer printing of epitaxial layers », *Nat. Photonics*, vol. 6, n° 9, p. 610-614, sept. 2012, doi: 10.1038/nphoton.2012.204.
- [13] M. Paladugu, C. Merckling, R. Loo, O. Richard, et H. Bender, « Site Selective Integration of III–V Materials on Si for Nanoscale Logic and Photonic Devices », *Cryst. Growth Des.*, vol. 12, n° 10, p. 4696-4702, oct. 2012, doi: 10.1021/cg300779v.
- [14] M. Feifel, J. Ohlmann, J. Benick, M. Hermle, J. Belz, A. Beyer, et K. Volz, « Direct Growth of III–V/Silicon Triple-Junction Solar Cells With 19.7% Efficiency », *IEEE J. Photovolt.*, vol. 8, n° 6, p. 1590-1595, nov. 2018, doi: 10.1109/JPHOTOV.2018.2868015.
- [15] K. Yamane, K. Sato, H. Sekiguchi, H. Okada, et A. Wakahara, « Doping control of GaAsPN alloys by molecular beam epitaxy for monolithic III-V/Si tandem solar cells », *J. Cryst. Growth*, vol. 473, p. 55-59, sept. 2017, doi: 10.1016/j.jcrysgro.2017.05.025.
- [16] K. Yamane, M. Goto, K. Takahashi, K. Sato, « Growth of a lattice-matched GaAsPN p–i–n junction on a Si substrate for monolithic III–V/Si tandem solar cells », *Appl. Phys. Express*, vol. 10, n° 7, p. 075504, juill. 2017, doi: 10.7567/apex.10.075504.
- [17] K. Yamane, S. Mugikura, S. Tanaka, M. Goto, et H. Sekiguchi, « Impact of temperature and nitrogen composition on the growth of GaAsPN alloys », *J. Cryst. Growth*, vol. 486, p. 24-29, mars 2018, doi: 10.1016/j.jcrysgro.2018.01.006.

Chapitre

Notions générales sur les cellules solaires



I.1 Introduction

La maîtrise des technologies électroniques et optoélectroniques des cellules solaires nécessite une compréhension approfondie des interactions entre la lumière et la matière, du rayonnement électromagnétique du soleil, ainsi que des structures de bande et des propriétés des semi-conducteurs. À partir de cette base, notre exploration commence par retracer l'histoire et les motivations qui ont façonné le développement des technologies énergétiques modernes. Ensuite, nous élargissons notre perspective en étudiant la diversité du spectre solaire, un élément essentiel pour saisir les innovations au-delà du silicium traditionnel dans les matériaux photovoltaïques.

Dans notre exploration de compréhension, nous explorons les principes fondamentaux qui sous-tendent le fonctionnement des cellules solaires, détaillant les mécanismes de conversion de la lumière en électricité. Nous abordons ensuite les caractéristiques clés telles que le courant de court-circuit, la tension de circuit ouvert, et le facteur de remplissage, qui définissent l'efficacité des cellules solaires. Enfin, nous explorons les différentes technologies, en commençant par celles à base de silicium, largement utilisées aujourd'hui, puis en nous tournant vers les technologies à couches minces et les innovations de troisième génération, telles que les tandems et les cellules organiques, qui promettent des avancées significatives en termes d'efficacité et de flexibilité dans les applications photovoltaïques modernes.

I.2 Histoire et motivation

En 1839, Edmond Becquerel a observé des tensions induites par la lumière, ce qui marque le début de la photovoltaïque [1]. Il a réalisé cette expérience avec une disposition conventionnelle à deux électrodes et un électrolyte liquide, remarquant une tension entre ces électrodes lorsque la lumière frappait cet agencement. Près de 40 ans plus tard, un effet similaire a été observé pour des solides par Adams et Day en 1877 [2]. Ils ont noté des variations dans les caractéristiques électriques du sélénium soumis à l'irradiation par la lumière visible. En 1883, un dispositif photovoltaïque a été conçu à l'aide de sélénium et d'une feuille d'or [3]. L'efficacité de cette cellule primitive était inférieure à 1 %. Plusieurs chercheurs ont continué à travailler sur les cellules Se et Cu_2O , jetant ainsi les bases de la conversion photovoltaïque de l'énergie solaire. Pendant presque un siècle, ces types de dispositifs sont restés des choix privilégiés pour la conversion de la lumière en électricité. Plus tard, Audobert et Stora ont observé la conversion photovoltaïque dans le semi-conducteur CdSe en 1932.

Les photovoltaïques modernes ont leurs racines dans la cellule solaire à jonction p-n en silicium cristallin (c-Si) fabriquée en 1954 au « Bell Telephone Laboratories » par Chapin et al [4]. Cette cellule avait une efficacité de 6 %. Vers la même époque, une cellule prototype à hétérojonction basée sur $\text{Cu}_2\text{S}/\text{CdS}$ a été rapportée [5], avec une efficacité équivalente. En 1956, Jenny et al. [6] ont rapporté la première cellule photovoltaïque en GaAs basée sur un semi-conducteur III-V, avec une efficacité de plus de 6 %. Le scientifique russe Zhores Alferov [7], en 1970, a construit des cellules solaires basées sur le même matériau avec des performances nettement améliorées. Contrairement à ces cellules monocristallines, une cellule basée sur un film mince avec une efficacité supérieure à 10 % a été fabriquée une décennie plus tard à "l'Institute of Energy Conversion, University of Delaware". Celle-ci était basée sur une sulfure d'hétérojonction, similaire à celle utilisée en 1954.

Aujourd'hui, des milliers de brevets ont été délivrés aux États-Unis et dans le monde entier pour diverses technologies de cellules solaires. Cette explosion dans l'innovation technologique verte a été accompagnée par une augmentation considérable de la capacité photovoltaïque installée dans le monde, grâce à une amélioration de l'efficacité de conversion et à une réduction des coûts de production. Par exemple, la capacité photovoltaïque mondiale avait atteint 512 gigawatts à la fin de 2018 (représentant une croissance de 27% par rapport à 2017), accompagnée d'une diminution constante des coûts des systèmes et de l'installation. En plus des technologies à cristal unique, la recherche s'est également concentrée sur le silicium polycristallin, les couches minces et les technologies organiques.

Bien que moins chères, ces technologies n'offrent pas la haute efficacité de conversion des technologies à cristal unique. Par exemple, en plus du silicium, qui appartient au groupe IV de la table périodique, les chercheurs ont développé des cellules solaires à partir de matériaux des groupes III, V. Dès 1972, IBM avait développé une cellule solaire à base d'aluminium-gallium-arséniure avec une efficacité de conversion entre 18% et 20% [8]. D'autres ont depuis démontré une efficacité de conversion supérieure à 35% pour de telles cellules [9]. L'innovation continue, encouragée par des régimes solides de protection de la propriété intellectuelle, ne fera qu'apporter d'autres améliorations en termes d'efficacité et de coûts, rendant la technologie solaire verte plus accessible aux consommateurs du monde entier. Un concept entièrement nouveau a été introduit par Graetzl en 1988, où la lumière était absorbée par un colorant et les porteurs de charge étaient injectés dans le semi-conducteur [10].

I.3 Spectre solaire

Le soleil, en fonctionnement depuis 5 milliards d'années, est un réacteur de fusion nucléaire qui transforme l'hydrogène en hélium, libérant ainsi d'énormes quantités d'énergie dans l'espace (évaluée à 63 500 kW/m²). Ces émissions se dispersent dans toutes les directions et se propagent à une vitesse constante de 300 000 km par seconde, connue sous le nom de vitesse de la lumière. Après un trajet d'environ 150 millions de kilomètres, le rayonnement solaire atteint la surface extérieure de l'atmosphère terrestre avec une puissance d'environ 1 367 W/m² [11].

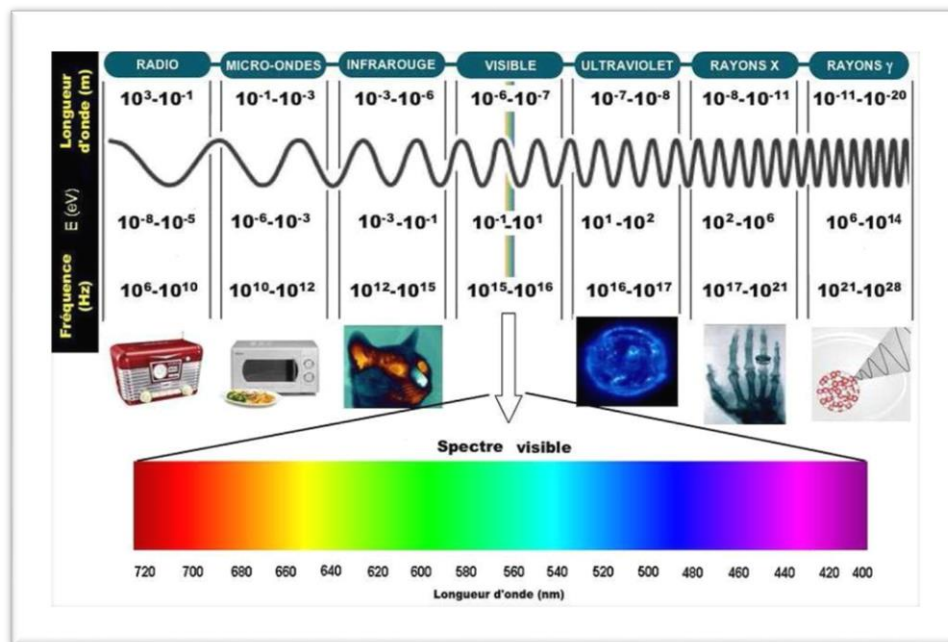


Figure (I.1) : Spectre électromagnétique [11].

Les théories contemporaines décrivent le rayonnement solaire comme une émission de particules appelées photons, figure (I.1). Ces particules atteignent la Terre avec différentes longueurs d'onde, chacune correspondant à une énergie spécifique définie par une relation donnée [12].

$$E = h \nu = h \frac{c}{\lambda} \quad (\text{I.1})$$

À une température d'émission de 5800°C, le soleil émet principalement son énergie sous forme de courtes longueurs d'onde (hautes fréquences). La distribution d'énergie sur les différentes longueurs d'onde du rayonnement électromagnétique solaire est désignée sous le terme de spectre solaire [13].

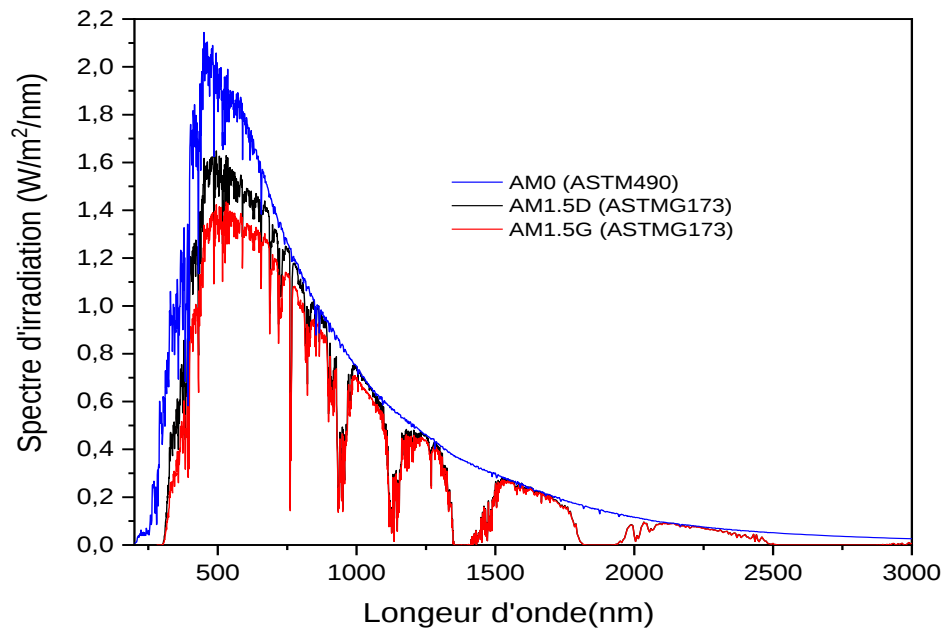


Figure (I.2) : Applications spatiales AM0 et terrestres AM1.5 du spectre solaire [12].

avec :

- θ : Angle que fait le soleil avec son zénith ;
- G : Faisceau lumineux global prend en compte les faisceaux lumineux réfléchis par le sol ou diffus par les nuages ou autres particules dans l'air ;
- D : Faisceau direct qui arrive directement au travers l'atmosphère.

Tableau (I.1) : Différents types du paramètre « Air Mass ».

AM0	Représente une intensité de rayonnement de 1367 W/m ² .
AM1	Correspond au spectre au niveau de l'équateur où le rayonnement traverse une épaisseur d'atmosphère.
AM1.5	Correspond à une intensité de rayonnement de 827 W/m ² W/m ² (Un facteur de normalisation est donc appliqué pour l'amener à 1000 W/m ²) incliné à un angle de 41,8° par rapport à l'équateur, traversant ainsi 1,5 fois l'épaisseur atmosphérique.
AM2	Correspond au spectre lorsque le rayonnement fait un angle de 60° par rapport à l'équateur.

La quantité de rayonnement solaire peut fluctuer en raison de divers éléments tels que l'altitude, la présence de nuages et l'angle sous lequel le rayonnement solaire frappe la surface. On mesure cette quantité en joules par mètre carré (J/m^2) ou en kilowattheures par mètre carré (kWh/m^2). L'épaisseur d'atmosphère est définie par le paramètre « Air Mass » (AM), tableau (I.1). Les spectres AM0 et AM1.5, présentés dans la figure (I.2), servent désormais de références pour les tests standardisés des cellules solaires, qu'elles soient destinées à des applications spatiales ou terrestres.

I.4 Cellules photovoltaïques

I.4.1 Description

Une cellule solaire, figure (I.3), (ou photopile, ou dite encore cellule photovoltaïque) est un dispositif électronique qui permet de transformer l'énergie lumineuse du solaire en énergie électrique [14]. Elle se comporte comme l'unité de base d'un panneau solaire photovoltaïque. Cette transformation est basée sur les quatre mécanismes suivants [15]:

- Absorption de photons par le matériau constituant le dispositif lorsque l'énergie des photons est supérieure à la largeur de la bande interdite;
- Création de paires électron/trou dans le matériau semiconducteur ;
- Séparation des porteurs de charge ;
- Collecte les particules générées dans le dispositif.

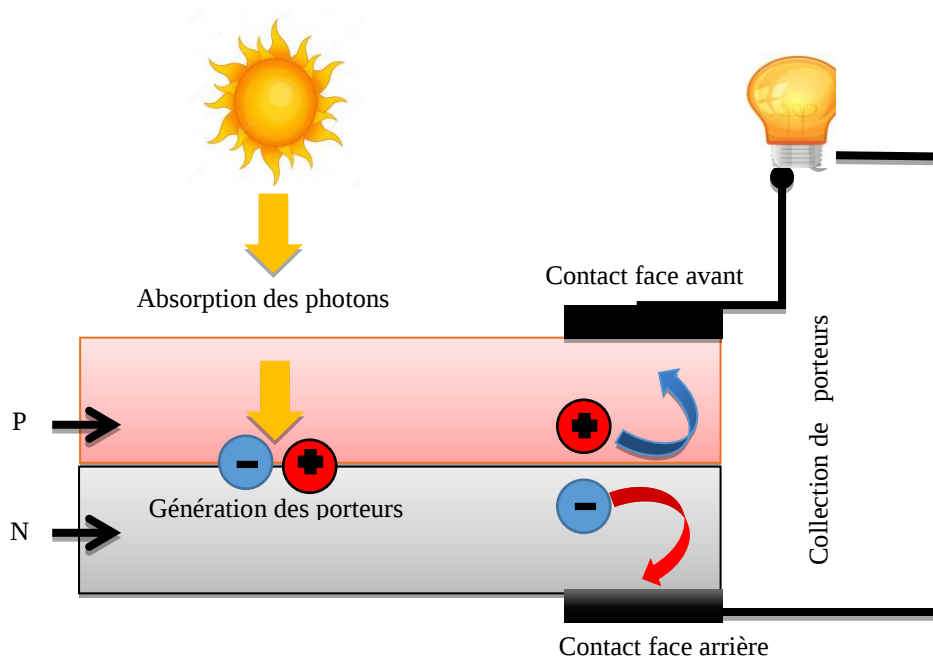


Figure (I.3) : Coupe longitudinale d'une cellule solaire.

Une seule cellule ne génère généralement qu'une tension d'environ 0,5 V et ne produit qu'une puissance électrique très faible, allant de 1 à 3 W. Pour augmenter la puissance de sortie, les cellules sont regroupées et assemblées pour former un module [16].

I.4.2 Structure et principe de fonctionnement

Le processus de conversion de l'énergie solaire en électricité dans une cellule photovoltaïque repose sur les propriétés uniques des matériaux semi-conducteurs. Lorsqu'un photon de lumière solaire possède une énergie suffisante, il peut libérer un électron de sa liaison atomique dans le semi-conducteur. Ce phénomène crée une paire électron-trou, où le trou représente l'absence de l'électron arraché. Ainsi, l'exposition d'un semi-conducteur à la lumière solaire entraîne la formation continue de ces paires électron-trou au sein du matériau.

Pour exploiter ce phénomène et générer de l'électricité, les cellules solaires utilisent une structure appelée jonction P-N. Cette jonction est formée par la mise en contact de deux couches de semi-conducteurs dopés différemment. La couche N est enrichie en éléments donneurs d'électrons, tandis que la couche P est dopée avec des éléments accepteurs d'électrons, créant ainsi des trous. À l'interface de ces deux couches, une zone de transition se forme, caractérisée par un mouvement de particules chargées.

Dans cette zone de transition, les électrons de la couche N diffusent naturellement vers la couche P, où ils comblent les trous disponibles. Cependant, ce processus crée une région particulière appelée zone de charge d'espace. Dans cette zone, un champ électrique interne se développe, empêchant la recombinaison libre des électrons et des trous. Ce champ électrique force les électrons à se diriger vers la couche N et les trous vers la couche P, établissant ainsi une différence de potentiel entre les deux couches.

Cette séparation des charges est le principe fondamental qui permet la génération d'électricité dans une cellule solaire. En connectant les couches N et P à un circuit électrique externe, les électrons circulent de la couche N vers la couche P, produisant ainsi un courant électrique utilisable. Ce mécanisme permet de convertir efficacement l'énergie lumineuse du soleil en énergie électrique, ouvrant la voie à de nombreuses applications dans le domaine des énergies renouvelables [17-19].

I.5 Caractéristiques électriques d'une cellule solaire

La courbe caractéristique électrique, aussi appelée I-V (courant-tension), est un outil essentiel pour comprendre et optimiser le fonctionnement d'une cellule photovoltaïque. Elle représente la variation du courant généré par la cellule en fonction de la tension aux bornes de cette cellule.

Les deux caractéristiques courant-tension d'une cellule photovoltaïque idéale sont représentées sur la figure (I.4), à l'obscurité en noir et sous illumination en rouge. On remarque que [20]:

- La courbe sous illumination est simplement décalée par rapport à la première d'une valeur, qui traduit la génération constante du courant par la lumière ;
- Cette valeur est appelée courant de court-circuit, puisque c'est le courant que génère la cellule sous lumière à tension nulle ;
- La valeur V_{co} , à l'inverse, est la tension de circuit ouvert. Il représente en fait l'égalité du courant de génération par la lumière et du courant à l'obscurité.

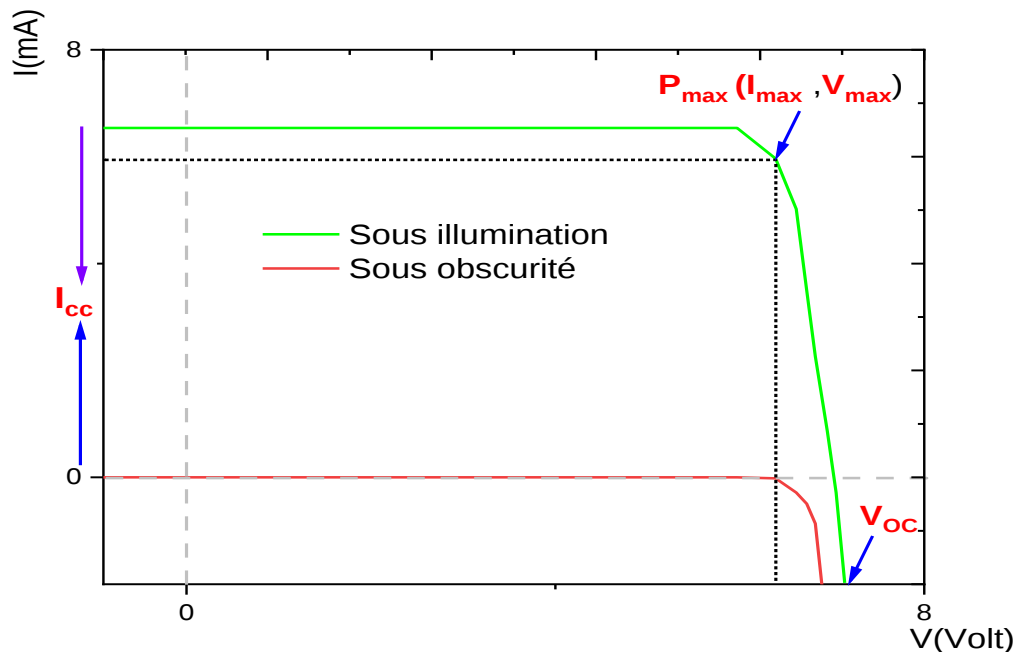


Figure (I.4) : Caractéristiques $I(V)$ à l'obscurité et sous éclairage d'une cellule photovoltaïque.

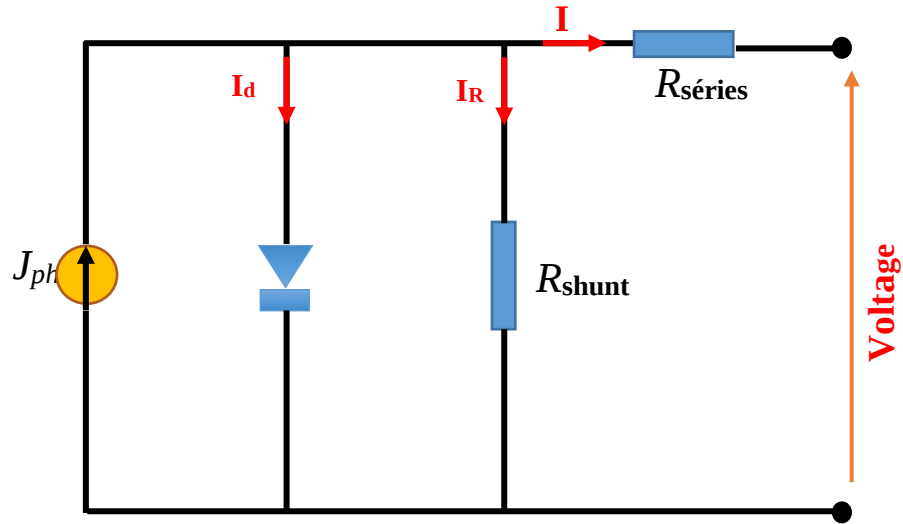


Figure (I.5) : Circuit électrique équivalent d'une cellule solaire non idéale.

Pour comprendre le comportement courant-tension d'une cellule solaire, il est utile de créer un modèle électriquement équivalent. Une cellule solaire idéale peut être modélisée par une source de courant en parallèle avec une diode.

Cependant, en réalité, des composants de résistance série et de résistance de shunt (R_{series} et R_{shunt} , respectivement) doivent également être pris en compte, comme illustré dans la figure (I.5). A partir de la caractéristique $I(V)$ de la cellule photovoltaïque, on déduit les paramètres électriques propres à la cellule [17,20].

$$I(V) = I_{PH} - I_{obs}(V) = I_{PH} - I_s(e^{\frac{qV}{kT}} - 1) \quad (I.2)$$

avec :

- I_{PH} : Courant photogénéré en Ampères ;
- I_{obs} : Courant d'obscurité en Ampères ;
- V : Tension aux bornes de cellule en Volts ;
- I_s : Courant de saturation de la diode en Ampères ;
- q : Charge élémentaire d'un électron ($q = 1,602 \cdot 10^{-19}$ C) ;
- K : Constante de Boltzmann ($K = 8,62 \cdot 10^{-5}$ eV.K⁻¹) ;
- T : Température en Kelvin.

I.5.1 Courant de court-circuit (J_{cc})

Il correspond au courant maximal que la cellule peut produire lorsqu'elle est exposée à un éclairage solaire et que ses bornes sont court-circuitées, c'est-à-dire qu'aucune charge n'est connectée.

Il croît linéairement avec l'intensité d'illumination de la cellule et il dépend de la surface éclairée, de la longueur d'onde du rayonnement, de la mobilité des porteurs de charges et de la température. Le courant de court-circuit est influencé par des facteurs tels que l'absorption incomplète, la génération et la collecte des porteurs photogénérés, les recombinaisons nuisibles et la résistance en série [21].

Les paramètres matériels les plus critiques pour comparer le J_{sc} de cellules solaires du même type de matériau sont les vitesses de recombinaison de surface et la longueur de diffusion. La longueur de diffusion des porteurs est définie comme la distance dans le matériau qu'un porteur parcourra depuis le point où il est généré jusqu'au point où il se recombine. Si nous supposons une cellule solaire parfaitement passivée en surface avec un taux de génération uniforme, le J_{sc} peut être approximé par [22]:

$$J_{cc} = q \cdot G(L_n + L_p) \quad (I.3)$$

où :

- G : Taux de génération ;
- L_n : Longueur de diffusion des électrons ;
- L_p : Longueur de diffusion des trous.

I.5.2 Tension de circuit ouvert (V_{co})

Elle correspond à la tension maximale que la cellule peut atteindre lorsqu'elle parvient à un équilibre entre la génération des porteurs de charge par la lumière et leur recombinaison [21]. La tension en circuit ouvert de toute cellule solaire est limitée par la bande interdite (E_g) du semi-conducteur dans la couche active et est en outre réduite par la recombinaison radiative et non radiative des électrons et des trous qui sont générés après l'absorption de photons [23].

$$V_{co} = \frac{KT}{q} \ln\left(\frac{I_{CC}}{I_s} + 1\right) \quad (I.4)$$

I.5.3 Facteur de forme (FF)

La puissance fournie par une cellule photovoltaïque à un circuit externe dépend de la résistance de charge connectée à ses bornes. Cette puissance atteint son maximum P_m ($I_m = I_{max}$, $V_m = V_{max}$), figure (I.6), pour une valeur spécifique de la résistance de charge, appelée résistance de charge optimale (R_{opt}).

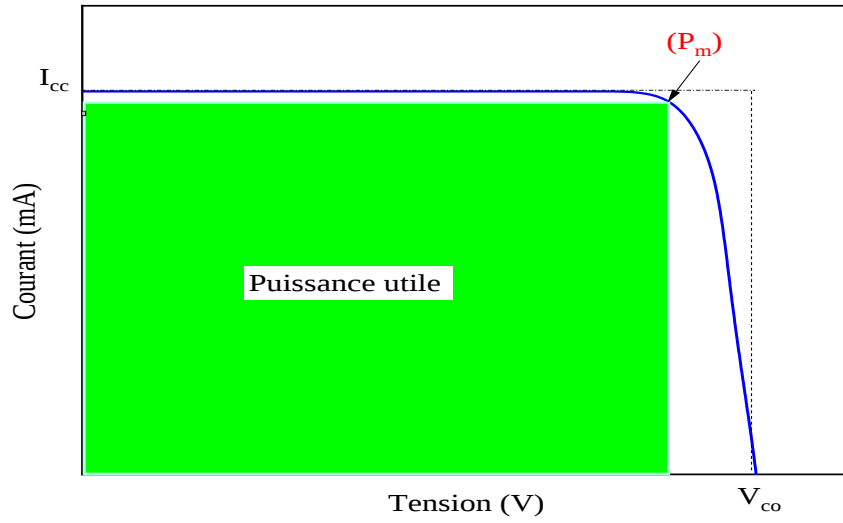


Figure (I.6) : Caractéristiques I(V) d'une cellule solaire.

Le facteur de forme est un indicateur de la qualité de la cellule photovoltaïque. Il est défini par le rapport entre la puissance maximale (P_m) et le produit de la tension V_{co} et du courant I_{cc} [24] :

$$FF = \frac{P_m}{V_{co}I_{co}} = \frac{V_m I_m}{V_{co}I_{cc}} \quad (I.5)$$

Graphiquement, le FF correspond au rapport entre les surfaces des rectangles, interne (en verre) et externe (en pointillés) dans la figure (I.3).

I.5.4 Rendement de conversion (η)

Il représente l'efficacité de la conversion de l'énergie lumineuse incidente en énergie électrique. Il est défini comme le rapport entre la puissance maximale délivrée par la cellule et la puissance lumineuse incidente P_{inc} [25].

$$\eta = \frac{P_{max}}{P_{inc}} = \frac{FFV_{co}I_{cc}}{P_{inc}} \quad (I.6)$$

I.5.5 Réponse spectrale (RS)

Elle représente le rapport entre le courant de court-circuit généré par la cellule et la puissance lumineuse incidente, en fonction de la longueur d'onde de la lumière. En d'autres termes, la RS nous donne une indication de l'efficacité de la cellule à convertir la lumière en électricité pour chaque longueur d'onde.

Elle est donnée par la relation suivante [26]:

$$RS(\lambda) = \frac{I_{CC}(\lambda)}{P_{inc}(\lambda)} = \frac{I_{CC}(\lambda)}{\Phi(\lambda).S} \quad (I.7)$$

avec:

- $RS(\lambda)$: Réponse spectrale (A/W) ;
- $I_{CC}(\lambda)$: Courant mesurée (A) ;
- $P_{inc}(\lambda)$: Puissance incidente(W),
- $\Phi(\lambda)$: Intensité lumineuse incidente (W.m⁻²) ;
- S: Surface de la cellule (m²).

La RS est représentée généralement par une courbe avec un pic à une longueur d'onde particulière, qui correspond à la longueur d'onde à laquelle la cellule est la plus sensible. Elle La RS est utilisée pour modéliser le comportement des cellules photovoltaïques (quantité d'électricité que peut produire) dans différentes conditions météorologiques et de l'heure de la journée [27].

La vitesse de recombinaison a un impact significatif sur la réponse spectrale des cellules solaires, particulièrement aux courtes longueurs d'onde. Pour améliorer cette réponse spectrale, il est généralement nécessaire d'augmenter la longueur de diffusion des électrons et des trous, notée L_n et L_p respectivement, tout en réduisant la vitesse de recombinaison en surface des électrons et des trous, notée S_n et S_p respectivement. Les cellules solaires ont la capacité d'absorber différentes longueurs d'onde en fonction de leur composition [28].

I.5.6 Rendement quantique (QE)

Le rendement quantique d'une cellule solaire est un paramètre essentiel qui caractérise son efficacité à convertir la lumière incidente en électrons collectés. Il est défini comme le rapport entre le nombre d'électrons collectés à la borne de la cellule et le nombre de photons incidents d'une longueur d'onde donnée, généralement exprimé en pourcentage. Elle dépend de la longueur d'onde (λ) de la lumière incidente [29]. La valeur de QE peut varier entre 0 et 100% :

- QE = 0%: aucun photon n'est converti en électron collecté ;
- QE = 100%: tous les photons incidents sont convertis en électrons collectés.

I.5.6.1 Rendement quantique externe (EQE)

Le rendement quantique externe est le pourcentage d'électrons collectés qui participant au photocourant par rapport au nombre de photons incidents [28].

$$EQE(\lambda) = \frac{hc}{q\lambda} RS(\lambda) \quad (I.8)$$

I.5.6.2 Rendement quantique interne (IQE)

Contrairement au rendement quantique externe, qui prend en compte tous les photons incidents sur la surface du dispositif, le rendement quantique interne se concentre exclusivement sur les photons réellement absorbés par le matériau actif du dispositif.

Pour calculer l'IQE, il est nécessaire de séparer du calcul les photons, qui sont réfléchis par la surface du dispositif, ceux qui sont transmis sans être absorbés, ainsi que ceux qui sont absorbés dans des couches non actives comme les couches antireflet ou les couches de protection. En ne considérant que les photons effectivement absorbés dans la couche active, l'IQE fournit une mesure plus précise de l'efficacité de la conversion photon-électron à l'intérieur du matériau actif.

$$IQE(\lambda) = \frac{EQE(\lambda)}{(1-R(\lambda)-A(\lambda)-T(\lambda))} \quad (I.9)$$

avec :

- $R(\lambda)$: Réflectivité de la cellule (%). ;
- $A(\lambda)$: Absorption dans les couches non actives(%). ;
- $T(\lambda)$: Fraction du rayonnement transmis à travers la cellule (%).

En d'autres termes, l'IQE donne le pourcentage d'électrons qui contribuent au photocourant par rapport au nombre de photons qui ont été réellement absorbés par la cellule photovoltaïque. Cette mesure est essentielle pour identifier les pertes internes dues à des processus comme la recombinaison des porteurs de charge, et pour optimiser les matériaux et les structures des dispositifs afin d'améliorer leur efficacité globale [30].

I.6 État de l'art des technologies de cellules solaires

La conversion photovoltaïque requiert l'utilisation d'un matériau photoconducteur, appelé couche absorbante, qui convertit la lumière en paires électron-trou. Ensuite, ces porteurs générés sont collectés en formant une jonction à la surface de cette couche absorbante.

Cette jonction peut être :

- Homojonction: jonction entre deux régions du même semiconducteur, comme le Germanium [31] ;
- Hétérojonction: jonction entre deux semiconducteurs différents, comme le GaP et GaAs [32];
- Schottky: jonction entre un métal et un semiconducteur [33].

Dans le marché industriel, ils existent quatre principaux types de cellules solaires à savoir, figure (1.7) : les cellules monocristallines, les cellules polycristallines, les cellules à couches minces et les cellules organiques [34].

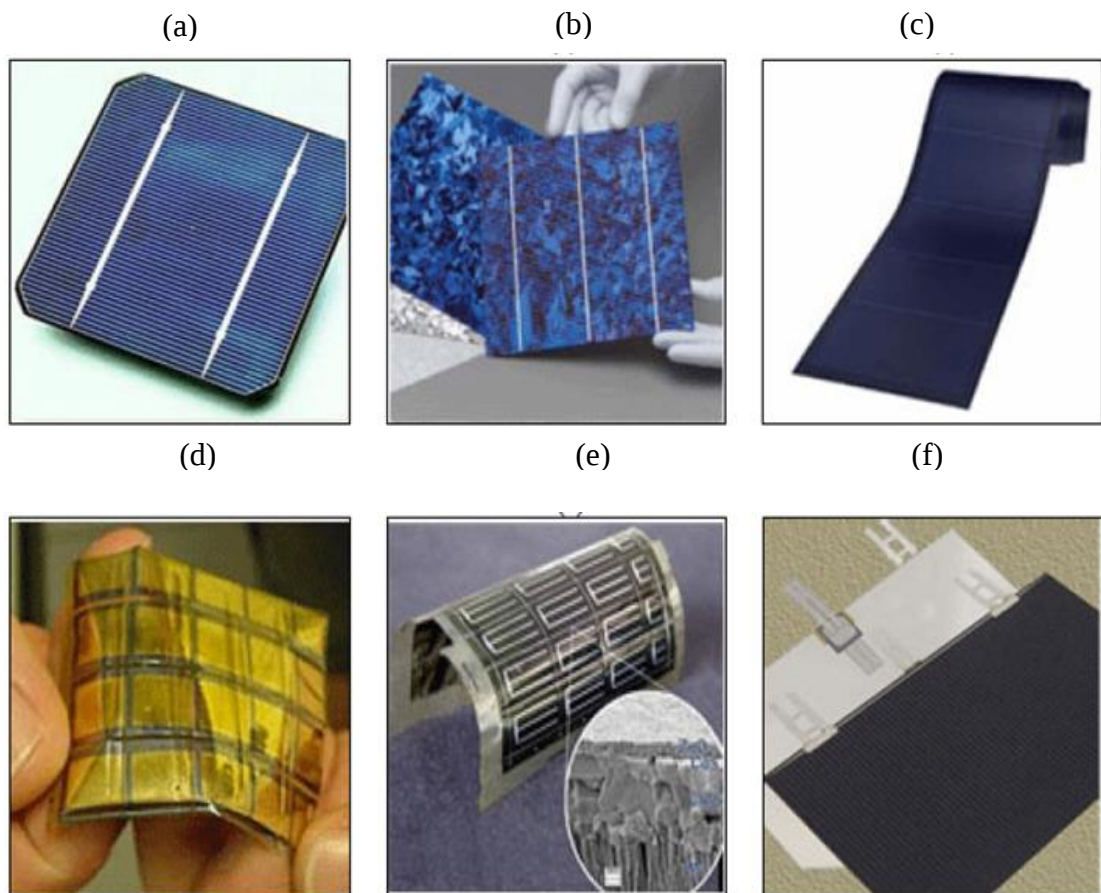


Figure (1.7) : Différents types de cellules solaires [31] : (a) : Si monocristallin; (b) : Si polycristallin; (c) : Si amorphe; (d) : CdTe; (e) : CuInSe₂; (f) : multijonctions.

I.6.1 Première Génération à base de silicium cristallin

Le silicium, classé dans la colonne IV de la classification périodique de Mendeleïev, est le deuxième élément le plus abondant sur notre planète après l'oxygène.

Bien qu'il ne se trouve pas sous forme pure dans la nature, il est largement présent dans des composés tels que le sable et le quartz. Malgré que le silicium n'est pas le matériel idéal, tableau (I.2), pour la conversion PV, mais il est le plus utilisé à ce jour pour la réalisation des cellules solaires (plus de 90%) [35].

Tableau (I.2) : Avantages et les inconvénients du silicium dans les applications photovoltaïques [36-41].

Avantages	Inconvénients
Haute efficacité de conversion énergétique.	Consommation énergétique lors de la purification.
Abondance et disponibilité.	Coût de fabrication élevé.
Technologie bien établie et mature.	Fragilité et cassure des cellules.
Durabilité et longue durée de vie.	Problèmes de recyclage des panneaux en fin de vie.
Bonne performance à des températures élevées.	Impact environnemental de l'extraction.

L'industrie photovoltaïque repose à plus de 90 % sur l'utilisation du silicium comme matériau principal. Ce semi-conducteur présente plusieurs avantages. Son seul véritable inconvénient est son gap indirect, ce qui entraîne une absorption plus faible du rayonnement comparée à celle d'un matériau à gap direct.

Par exemple, pour absorber 90 % du spectre solaire, une épaisseur de 100 μm de silicium est nécessaire, alors qu'une épaisseur de seulement 1 μm de GaAs suffit [42]. Le tableau (I.3) présente quelques propriétés de silicium.

Les cellules à partir de plaquettes de silicium cristallisé (c-Si) se divisent en trois catégories distinctes, figure (1.7), celles à partir de :

- Silicium monocristallin (mc-Si) ;
- Silicium poly-cristallin (pc-Si) ;
- Silicium amorphe.

Tableau (I.3) : Quelques propriétés du silicium [43].

Paramètre	Définition	Valeur
ϵ_r	Permittivité relative	11.9
χ (eV)	Affinité électronique	4.05
E_g (300 K) eV	Energie de gap	1.12
N_c (cm^{-3})	densité d'état efficace dans la bande de conduction	2.8 E19
N_v (cm^{-3})	densité d'état efficace dans la bande de valence	1.04 E17
μ_n (cm^2/Vs)	mobilité des électrons	1500
μ_p (cm^2/Vs)	mobilité des trous	450

1.6.1.1 Cellules monocristallin

Les cellules solaires à base de silicium monocristallin sont très efficaces, convertissant entre 15% et 22% de l'énergie solaire en électricité grâce à leur structure cristalline pure. Elles sont durables, avec une durée de vie supérieure à 25 ans, et nécessitent moins d'espace pour la même production énergétique que d'autres types de cellules. Cependant, leur coût de production est plus élevé et le processus de fabrication est complexe. Elles sont idéales pour les installations résidentielles, commerciales et industrielles, où l'efficacité et la durabilité sont essentielles [44].

1.6.1.2 Cellules poly-cristallines

Le silicium polycristallin est une forme dérivée du silicium obtenue par fusion de silicium hautement pur, suivi de son moulage pour former une plaquette composée de multiples petits cristaux, contrairement au silicium monocristallin issu d'un seul cristal. Sa fabrication est moins coûteuse en raison de processus de traitement simplifiés, bien que son rendement soit légèrement moindre en raison des limitations entre cristaux, susceptibles d'engendrer des imperfections dans les cellules photovoltaïques. Les modules en silicium polycristallin présentent souvent une teinte bleutée due à la réflexion de la lumière par les limites des cristaux. Malgré ces considérations, le silicium polycristallin reste largement utilisé dans la production de cellules solaires pour son coût compétitif et sa capacité à générer de l'énergie à des prix attractifs, avec un rendement typiquement situé entre 16 et 18 % en conditions réelles [45].

I.6.2 Deuxième génération à base des couches minces

Les cellules photovoltaïques en couche mince sont souvent qualifiées de deuxième génération de cellules, succédant historiquement aux cellules en silicium cristallin plus épaisses. Ce qui rend la technologie en couche mince particulièrement attrayante, c'est la réduction significative de la quantité de matériaux requis pour fabriquer une cellule par rapport aux cellules traditionnelles.

Contrairement aux cellules de première génération en silicium cristallin, seules des quantités minimales de matériau photosensible sont déposées pour absorber la majeure partie du rayonnement solaire, quelques microns d'épaisseur sont suffisants. De plus, ces cellules utilisent des méthodes de fabrication moins coûteuses, permettant une intégration plus complète [46].

Les trois technologies émergentes sont aujourd'hui [34] :

- Silicium amorphe et microcristallin noté TFSi (Thin-Film Silicon en anglais) ;
- Semi-conducteur Poly-cristallin CdTe (Tellure de Cadmium) ;
- Alliage Cu(In, Ga)Se_2 (Cuivre- Indium/Gallium-Sélénium) noté dans la littérature CIGS.

Une cellule photovoltaïque en couche mince, comme le montre la figure (I.8), se compose de quatre éléments principaux à savoir [34] :

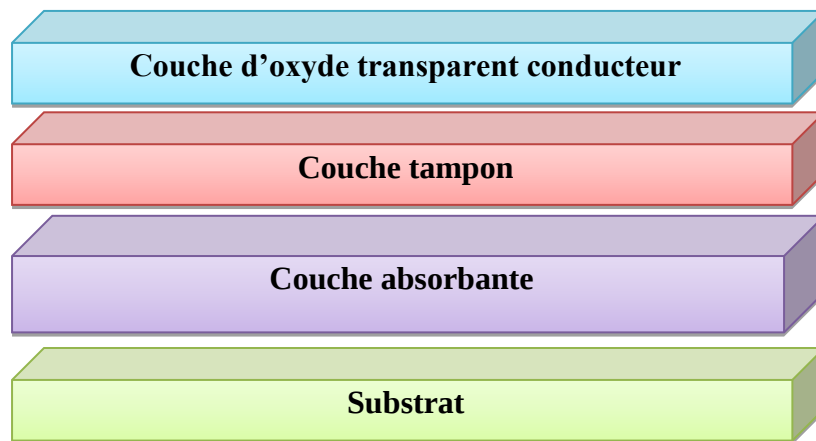


Figure (I.8): Schéma simplifié d'une cellule solaire CIGS.

- **Un substrat** : qui sert de base à la cellule. Le plus souvent, on utilise du verre ordinaire ou du verre sodé, choisi pour sa transparence qui facilite les calculs des paramètres optiques. De plus, le verre présente des propriétés cristallochimiques compatibles avec le contact inférieur en molybdène (Mo). Dans certains cas, on peut opter pour un substrat flexible ou métallique, dont l'épaisseur varie généralement entre 1 et 3 mm, offrant ainsi des possibilités d'applications plus variées;

- **Une couche absorbante** : Cette couche est constituée d'un matériau semi-conducteur de type p, caractérisé par un coefficient d'absorption élevé. Son épaisseur est typiquement comprise entre 1,5 et 2 μm . Elle présente une conductivité de l'ordre de $10^{-1} (\Omega.\text{cm})^{-1}$ et une énergie de bande interdite oscillant entre 1,1 et 1,7 eV. Ces propriétés font de cette couche le cœur de la cellule, où se produit l'absorption de la lumière et la génération des porteurs de charge ;
- **Une couche tampon** : Son rôle est d'agir comme un intermédiaire, optimisant l'interface entre les différentes couches de la cellule. Cette couche est cruciale pour maximiser les performances de la cellule solaire, en facilitant le transport des charges et en minimisant les pertes à l'interface;
- **Une couche d'oxyde transparent conducteur**: Cette couche remplit deux fonctions essentielles : elle doit être à la fois transparente pour permettre à la lumière solaire de pénétrer jusqu'à la couche absorbante, et conductrice pour faciliter la collecte des charges électriques générées. Sa transparence assure que le maximum de lumière atteigne la couche absorbante, tandis que sa conductivité permet aux électrons générés de circuler efficacement vers les électrodes de la cellule, d'où ils peuvent être collectés pour une utilisation externe.

I.6.3 Troisième génération

I.6.3.1 Cellules hétérostructures

Les cellules hétérostructures sont constituées de matériaux différents, formant ainsi des combinaisons telles que métal-isolant-semi-conducteur (MIS), métal-semi-conducteur (Schottky), ou encore semiconducteur 1- semiconducteur 2, où ces matériaux sont déposés en couches superposées les uns sur les autres [47].

I.6.3.2 Cellules multijonctions

Les cellules multijonctions, connues également sous le nom de cellules de troisième génération, sont des dispositifs solaires qui se composent de plusieurs couches de matériaux semi-conducteurs empilées. Ces couches sont principalement constituées de matériaux III-V comme le GaAs et le GaN, chacun ayant des bandes interdites distinctes [35]. Nous tenons à préciser que l'approche cellulaire adoptée dans le cadre de notre projet de thèse repose sur l'utilisation de ce type spécifique de cellule, dont la pertinence est discutée en détail au chapitre II).

I.6.3.3 Cellules organiques

Les cellules photovoltaïques organiques, utilisent des matériaux organiques tels que les polymères. Actuellement, elles atteignent typiquement des rendements de conversion d'énergie compris entre 10% et 15% dans les meilleures conditions de laboratoire [48]. Généralement, la couche active comprend deux matériaux essentiels : un donneur d'électrons comme un polymère conducteur, et un accepteur d'électrons tel qu'un fullerène.

Lorsque la cellule est exposée à la lumière, il y a un transfert d'électrons du polymère vers la molécule de fullerène. Ces cellules se distinguent par leur aptitude à être fabriquées sur de larges surfaces, leur poids léger, leur flexibilité et leur coût de production réduit [49].

I.6.3.4 Cellules hybrides

Les cellules hybrides représentent une avancée récente dans les technologies de cellules solaires flexibles, combinant des matériaux organiques et inorganiques à base de semi-conducteurs nanostructures. Elles sont conçues pour être plus économiques. Parmi ces innovations, on trouve les cellules solaires sensibilisées par colorant (DSSCs), figure (I.9).

Elles utilisent un colorant organique comme sensibilisateur pour absorber la lumière du soleil et générer des électrons, tandis que le semi-conducteur inorganique, souvent du dioxyde de titane (TiO_2), est utilisé pour faciliter le transfert d'électrons et la conductivité [50, 51].

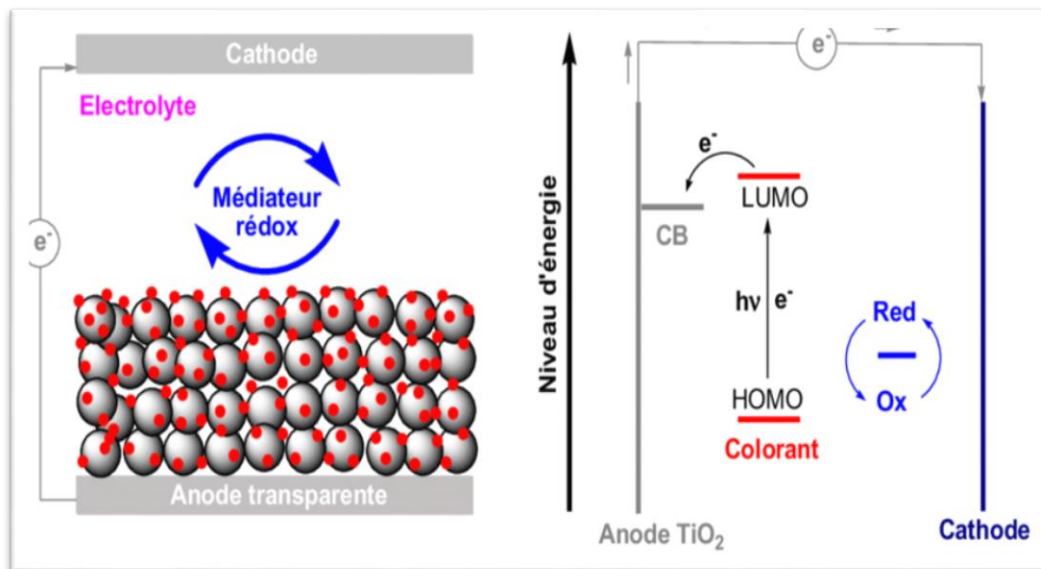


Figure (I.9): Présentation schématique d'une cellule DSSC [51].

I.6.3.5 Cellules solaires à bande intermédiaire

La cellule solaire à bande intermédiaire (CS-BI) peut surpasser la limite théorique d'efficacité de Shockley-Queisser de 30% pour une cellule solaire à jonction unique en exploitant plus efficacement le spectre solaire [52]. Étant donné que l'une des principales pertes dans les cellules solaires à bande interdite unique provient de la non-absorption des photons situés sous la bande interdite et puisque la région infrarouge du spectre solaire contient une part significative d'énergie à basse fréquence, il est essentiel d'exploiter ces photons pour améliorer l'efficacité des cellules solaires.

Une bande intermédiaire (BI) au sein du semi-conducteur permet l'absorption des photons sous la bande interdite, figure (I.10). En plus de l'absorption normale des photons par les transitions électroniques entre la bande de valence (BV) et la bande de conduction (BC), il existe un processus d'absorption à deux photons impliquant des transitions de la BV à la BI, puis de la BI à la BC. Chaque bande (E_{FV} , E_{FC} , E_{FI}) possèdera un niveau quasi de Fermi étant donné que la relaxation des porteurs entre les bandes est plus lente que celle à l'intérieur des bandes elles-mêmes [53].

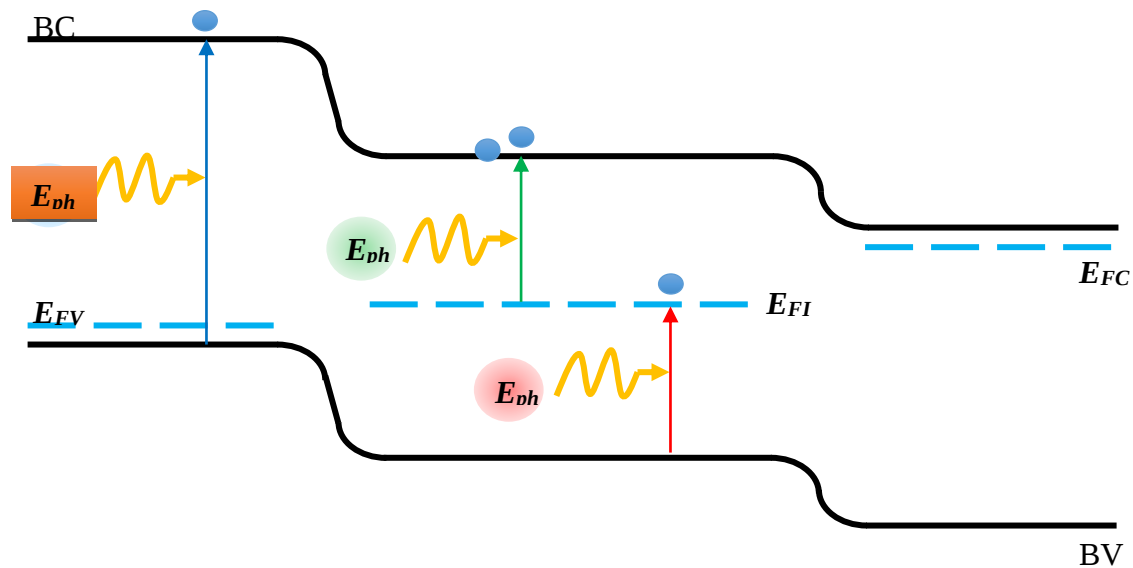


Figure (I.10):Processus d'absorption de photons à basse énergie dans les cellules solaires à bande intermédiaire.

Pour améliorer l'efficacité selon le concept de CS-BI, il est essentiel d'augmenter le photocourant par l'absorption de photons supplémentaires, tout en maintenant une tension de sortie stable. Les niveaux individuels de quasi-Fermi pour les bandes d'énergie jouent un rôle essentiel dans ce processus. La tension extraite de la CS-BI résulte de la différence entre les niveaux quasi-Fermi des électrons (E_{FC}) dans la bande de conduction (BC) et des trous (E_{FV}) dans la bande de valence (BV), divisée par la charge élémentaire.

Selon le schéma équivalent, figure (I.11), deux sources de courant supplémentaires correspondent à l'absorption sous la bande interdite, tandis que deux diodes supplémentaires représentent de nouveaux mécanismes de recombinaison des porteurs. La simulation suggère qu'à des intensités lumineuses élevées, les CS-BI pourraient dépasser en efficacité les cellules solaires à bande interdite simple, car à ces niveaux élevés de courant, la recombinaison de la BC vers la BV (J_{CV}) domine davantage que la recombinaison par la bande intermédiaire (J_{CI} et J_{IV}).

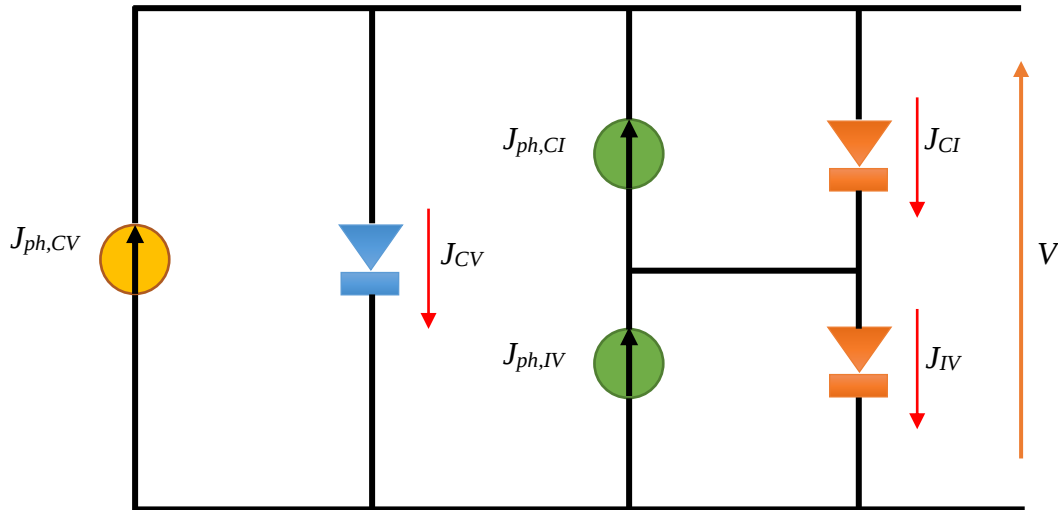


Figure (I.11): Circuit équivalent d'une cellule solaire à bande intermédiaire.

Comme évoqué précédemment, les SCMJ et les SCBI représentent des avancées de troisième génération visant à accroître l'efficacité en captant une plus large portion du spectre solaire. Le schéma équivalent d'un SCMJ est composé de cellules individuelles (source de courant et diode) reliées en série. Il est pertinent de noter que le schéma équivalent d'une SCBI se compose également de cellules individuelles : deux en série, puis en parallèle avec une troisième [54].

I.6.3.6 Cellules nano-structurées

Les cellules nano-structurées représentent une catégorie avancée de cellules solaires qui exploitent des nanostructures pour augmenter l'efficacité de conversion de la lumière en électricité. Ces nanostructures varient en forme et en taille, et peuvent être conçues à partir d'une gamme de matériaux différents. Elles améliorent l'absorption de la lumière en piégeant et en diffusant la lumière au sein de la cellule solaire, ce qui permet une génération accrue d'électricité.

De plus, elles facilitent le transport des charges en réduisant la distance parcourue par les porteurs de charge vers les électrodes, optimisant ainsi l'efficacité de la collecte des charges. En outre, les nanostructures réduisent la recombinaison des charges en créant des barrières qui empêchent les porteurs de charge de se recombiner prématurément, ce qui augmente l'efficacité globale de conversion de la lumière en électricité. Les applications des cellules nano-structurées s'étendent à la production d'énergie solaire, où elles surpassent les technologies traditionnelles en termes d'efficacité, les rendant particulièrement prometteuses dans ce domaine.

Elles sont également employées dans la fabrication de capteurs sensibles à la lumière et à d'autres formes de rayonnement, ainsi que dans le développement de l'électronique flexible, en raison de leur capacité à être intégrées sur des substrats flexibles. La recherche sur les cellules nano-structurées est un domaine dynamique où de nouvelles avancées technologiques sont constamment explorées. Ces cellules ont le potentiel de transformer significativement la production d'énergie solaire et d'autres applications technologiques, ouvrant la voie à des innovations continues dans le domaine de l'énergie durable et de l'électronique avancée [55]. Il existe plusieurs types de cellules nano-structurées, parmi lesquels :

- **Cellules solaires à base de nanofils** : Les chercheurs ont mis au point des cellules solaires révolutionnaires à base de nanofils, de minuscules filaments ultra-fins capables de capturer la lumière de manière extrêmement efficace. Ces nanofils, fabriqués à partir d'arséniure de gallium par exemple, absorbent jusqu'à 12 fois plus de lumière que les cellules solaires traditionnelles, grâce à une structure qui agit comme un entonnoir lumineux. Cette innovation permet une utilisation plus large et moins coûteuse de l'arséniure de gallium, un matériau haute performance. Grâce à leur flexibilité et leur résistance, ces nanofils offrent de nouvelles perspectives pour l'énergie solaire, allant des panneaux solaires légers et flexibles aux applications spatiales ;
- **Cellules solaires à base de points quantiques** : Les cellules solaires à points quantiques sont des dispositifs photovoltaïques avancés qui utilisent des cristaux semi-conducteurs extrêmement petits, appelés points quantiques, ayant une taille proche de celle des atomes. Ces points quantiques absorbent la lumière et libèrent des électrons, produisant ainsi un courant électrique. En modifiant la taille des points quantiques, on peut contrôler les longueurs d'onde de lumière qu'ils absorbent, ce qui permet d'optimiser leur efficacité de conversion de l'énergie solaire.

Cette capacité à adapter l'absorption de la lumière en fonction de la taille des points quantiques rend ces cellules particulièrement prometteuses pour améliorer les rendements des technologies photovoltaïques ;

- **Cellules solaires à base de Perovskite** : Les cellules solaires à base de Perovskite utilisent des matériaux semi-conducteurs dotés d'une structure cristalline spécifique appelée Perovskite.

Cette structure peut être affinée à l'échelle nanométrique pour optimiser la conversion de l'énergie solaire en électricité. Grâce à leurs propriétés uniques, les matériaux Perovskite permettent d'améliorer considérablement l'efficacité des cellules solaires, offrant ainsi un potentiel élevé pour des performances accrues et des coûts réduits par rapport aux technologies photovoltaïques traditionnelles. Le terme "Perovskite" fait référence à une structure cristalline spécifique que l'on trouve dans une variété de matériaux. Le nom vient du minéral perovskite, qui a été découvert dans les années 1830 et qui a une structure cristalline particulière. La structure cristalline des matériaux Perovskite est généralement décrite par la formule chimique ABX_3 , où :

- A et B sont des cations de tailles différentes ;
- X est un anion, souvent un oxyde ou un halogène.

I.7 Conclusion

À la lumière de cette exploration approfondie sur les technologies électroniques et optoélectroniques des cellules solaires, nous avons pu tracer un parcours significatif à travers les aspects fondamentaux et avancés de cette technologie cruciale pour les énergies renouvelables. En examinant en détail les principes de fonctionnement des cellules solaires et leurs caractéristiques essentielles, nous avons souligné les défis et les opportunités pour améliorer leur efficacité. Enfin, en explorant les différentes technologies, nous avons ouvert la voie à de nouvelles perspectives d'amélioration continue et d'innovation dans le domaine de l'énergie solaire.

Cette étude approfondie constitue une base solide pour aborder les défis technologiques futurs et pour exploiter pleinement le potentiel des cellules solaires dans la transition vers une énergie propre et durable. Dans le prochain chapitre, nous explorerons l'état de l'art des cellules multijonction, une technologie essentielle qui représente le cœur de notre travail et qui promet des avancées significatives en termes d'efficacité et de performance des dispositifs photovoltaïques.

Références

- [1] M.Z. Rahman, « Retraction : Modeling Electrical Characteristics of a pn-Junction Silicon Solar Cell Using PSpice », *Smart Grid and Renewable Energy*, vol. 3, pp. 370–370, 2012, doi: 10.4236/sgre.2012.34052..
- [2] W.G. Adouns et R. E. Day, « The action of light on selenium », *Proceedings of the Royal Society A*, vol 24, pages 113-117, 1876, Available: <https://royalsocietypublishing.org>.
- [3] C.E Fritts, « On a new form of selenium cell, and some electrical discoveries made by its use », *American Journal of Science*, vol. 26, no. 156, pages 465-472, 1883.
- [4] G. Destriau, « Brightness Waves and Transitory Phenomena in the Quenching of Luminescence by Alternating Electric Fields », *J. Appl. Phys.*, vol. 25, n° 1, p. 67-71, janv. 1954, doi: 10.1063/1.1721522.
- [5] N. D. Cuong et J. Blair, « Impurity Photovoltaic Effect in Cadmium Sulfide », *J. Appl. Phys.*, vol. 37, n° 4, p. 1660-1669, mars 1966, doi: 10.1063/1.1708581.
- [6] D. A. Jenny, J. J. Loferski, et P. Rappaport, « Photovoltaic Effect in GaAs p – n Junctions and Solar Energy Conversion », *Phys. Rev.*, vol. 101, no 3, p. 1208-1209, févr. 1956, doi: 10.1103/PhysRev.101.1208.
- [7] Zh. I. Alferov, V. M. Andreev, D. Z. Garbuzov, Yu. V. Zhilyaev, Ya. V. Morozenko, E. L. Portnoi, and V. G. Trofim, « Solar-energy converters based on p-n $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ -GaAs heterojunctions » *Fiz. Tekh. Poluprovodn.*, vol. 4, pp. 2378–2383, Dec. 1970.
- [8] J. M. Woodall et H. J. Hovel, « High-efficiency $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ -GaAs solar cells », *Sol. Cells*, vol. 29, n° 2-3, p. 167-172, août 1990, doi: 10.1016/0379-6787(90)90024-y.
- [9] L. M. Fraas, J. E. Avery, V. S. Sundaram, V. T. Dinh, T. M. Davenport, J. W. Yerkes, J. M. Gee, and K. A. Emery, "Over 35% efficient GaAs/GaSb stacked concentrator cell assemblies for terrestrial applications," in *Proc. IEEE Photovoltaic Specialists Conf.*, Kissimmee, FL, USA, 1990, pp. 190–195. doi: 10.1109/PVSC.1990.111616..
- [10] M. A. Green, K. Emery, D. L. King, Y. Hishikawa, et W. Warta, « Solar cell efficiency tables (version 28) », *Prog. Photovolt. Res. Appl.*, vol. 14, n° 5, p. 455-461, août 2006, doi: 10.1002/pip.720.
- [11] B. Francis, « Le soleil comme laboratoire des pratiques scientifiques », thèse de doctorat, Université de Pierre et Marie Curie-Paris, 2014.
- [12] F. Kurker, « Microfabrication based design and simulation of hétérojunction solar cell », thèse de doctorat, Université de Cukuriva, 2010.

- [13] O. Engvold, J.-C. Vial, et A. Skumanich, Eds., « The Sun as a Guide to Stellar Physics ». Amsterdam, Netherlands: Elsevier, 2019. doi: 10.1016/B978-0-12-814334-6.
- [14] R. Alicki, D. Gelbwaser-Klimovsky, et A. Jenkins, « A thermodynamic cycle for the solar cell », *Ann. Phys.*, vol. 378, p. 71-87, mars 2017, doi: 10.1016/j.aop.2017.01.003.
- [15] P. Muthusamy et J. Arivudainambi, « Evaluation of Solar Photovoltaic Cells using the DEMATEL Method », *Renew. Nonrenewable Energy*, vol. 1, n° 2, p. 94-101, juin 2022, doi: 10.46632/rne/1/2/5.
- [17] H. Mathieu « Physique des semiconducteurs et des composants électroniques » 2ème édition, Masson Paris, France: Masson, 1990.
- [18] A. Adaine, « Optimisation numérique de cellules solaires à très haut rendement à base d'InGaN », thèse de doctorat, Université de Lorraine, 2018. [En ligne]. Disponible: <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-01870260>. NNT: 2018LORR0085.
- [19] S.M. SZE et Kwok K. Ng, « Physics of semiconductor Devices », 3rd Edition, Wiley, ISBN 978-0471143239, 2006.
- [20] C. T. Capucine, « III-V-on-Si nanowire-based solar cells for tandem applications », thèse de doctorat, Université de Paris-Saclay, 2023. [En ligne]. Disponible: <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-04194165>. NNT: 2023UPAST044.
- [21] Bérengère Frouin « Advances for ultrathin GaAs and CdTe solar cells » Thèse de doctorat, Université Paris-Saclay, 2023, [En ligne]. Disponible: <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-04365319>. NNT: 2023UPAST076.
- [22] M. Xianqin, « Design and fabrication of photonic crystals and diffraction gratings for ultra thin film Si solar cells », thèse de doctorat, Ecole Centrale de Lyon (ECL), 2012, [En ligne]. Disponible: <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00752950>.
- [23] G. J. W. Aalbers, T. P. A. Van Der Pol, K. Datta, W. H. M. Remmerswaal, M. M. Wienk, et R. A. J. Janssen, « Effect of sub-bandgap defects on radiative and non-radiative open-circuit voltage losses in perovskite solar cells », *Nat. Commun.*, vol. 15, n° 1, févr. 2024, doi: 10.1038/s41467-024-45512-8.
- [24] C. Li, Y. Zhang, X. Zhang, P. Zhang, X. Yang, et H. Chen, « Efficient Inverted Perovskite Solar Cells with a Fill Factor Over 86% via Surface Modification of the Nickel Oxide Hole Contact », *Adv. Funct. Mater.*, vol. 33, no 13, p. 2214774, mars 2023, doi: 10.1002/adfm.202214774.

- [25] B. Caroline, « Développement de techniques de métallisation innovantes pour cellules photovoltaïques à haut rendement », these de doctorat, L'institut national des sciences appliquées de Lyon, 2012, [En ligne]. Disponible: <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00679876>. NNT: 2011ISAL0032.
- [26] G. Emmanuel, « Evaluation d'une filière technologique de cellules photovoltaïques multi-jonctions à base de matériaux antimoniures (III-V)-Sb pour applications aux très fortes concentrations solaires », Ecole doctorale I2S et de l'unité de recherche IES, France, 2016. [En ligne]. Disponible: <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-01816922>. NNT: 2016MONTT330.
- [27] R. Daxini et Y. Wu, « Review of methods to account for the solar spectral influence on photovoltaic device performance », *Energy*, vol. 286, p. 129461, janv. 2024, doi: 10.1016/j.energy.2023.129461.
- [28] A. BALI, « Etude comparative entre les cellules solaire de type p + -AlGaAs/ p-GaAs /n-GaAs et une autre de type n⁺ AlGaAs / n⁻ GaAs/p⁻ GaAs », thèse de Magister, Université Mohamed Kheider-biskra.
- [29] D. Soro, A. Sylla, N. A. Ignace, A. Toure, A. Bouch, S. Toure, and B. Mari, « Simulation of a CIGS Solar Cell with CIGSe₂/MoSe₂/Mo Rear Contact Using AFORS-HET Digital Simulation Software », *Model. Numer. Simul. Mater. Sci.*, vol. 12, n° 02, p. 13-23, 2022, doi: 10.4236/mnsms.2022.122002.
- [30] W. Shockley et H. J. Queisser, « Detailed balance limit of efficiency of p-n junction solar cells », *Journal of Applied Physics*, vol. 32, no 3, p. 510, 1961, doi: 10.1063/1.1736034.
- [31] Fonash, S. J « Solar cell device physics » Handbook Elsevier, 2010.
- [32] L. Chen, Y. Dong, H. Yang, « Research Progress on Metallization Technologies for Heterojunction Solar Cells » *Journal of Rare Metal Materials and Engineering* 53(1):281-295, 2024, DOI: [10.12442/j.issn.1002-185X.20220962](https://doi.org/10.12442/j.issn.1002-185X.20220962).
- [33] A. M. Suhail, M. A. Abed, S. M. Ahmed, I. M. S. Al-Kadmy, H. Altaï, et G. Pan, « Developed performance of rGO/p-Si Schottky junction solar cells », *Carbon Trends*, vol. 9, p. 100205, oct. 2022, doi: 10.1016/j.cartre.2022.100205.
- [34] Bahi .A. A, « Etude des couches minces du monoxyde de nickel NiO », Thèse de Magister, Université d'Oran, 2014.
- [35] N. Phuong, « Gluing III-V//Si with transparent conductive layers for tandem solar cells », Phuong-Linh Nguyen, Université Paris-Saclay, France, 2022, [En ligne]. Disponible: <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-03685424>.

- [36] M. A. Green, « Silicon photovoltaic modules: a brief history of the first 50 years », *Prog. Photovolt. Res. Appl.*, vol. 13, n° 5, p. 447-455, août 2005, doi: 10.1002/pip.612.
- [37] A. Luque et S. Hegedus « Handbook of Photovoltaic Science and Engineering », Wiley, 2003, DOI/ISBN : ISBN 0-471-49196-9.
- [38] E. Radziemska, « The effect of temperature on the power drop in crystalline silicon solar cells », *Renew. Energy*, vol. 28, n° 1, p. 1-12, janv. 2003, doi: 10.1016/s0960-1481(02)00015-0.
- [39] L. M. Fraas, « Low-Cost Solar Electric Power ». Springer, 2014. doi: 10.1007/978-3-319-07530-3.
- [40] A. Fave, S. Quozola, J. Kraiem, A. Kaminski, M. Lemiti, A. Laugier, « Comparative study of LPE and VPE silicon thin film on porous sacrificial layer », *Thin Solid Films*, vol. 451-452, p. 308-311, mars 2004, doi: 10.1016/j.tsf.2003.11.055.
- [41] C. Wadia, A. P. Alivisatos, et D. M. Kammen, « Materials Availability Expands the Opportunity for Large-Scale Photovoltaics Deployment », *Environ. Sci. Technol.*, vol. 43, n° 6, p. 2072-2077, mars 2009, doi: 10.1021/es8019534.
- [42] M. Bounouar , « Etude de la purification du silicium destiné à la réalisation de cellules Photovoltaïques », Mémoire de magister, Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou, 2015.
- [43] SILVACO® (2016) ATLAS™ User's Manual. <https://dynamic.silvaco.com/dynamicweb/jsp/downloads/DownloadManualsAction.do?req=silentmanuals&nm=atlas>.
- [44] J. Mao, « Enhancement of efficiency in monocrystalline silicon solar cells », *Theor. Nat. Sci.*, vol. 25, n° 1, p. 173-180, déc. 2023, doi: 10.54254/2753-8818/25/20240953.
- [45] U. Romer, R. Peibst, T. Ohrdes, B. Lim, J. Krugener, T. Wietler, et R. Brendel, « Ion Implantation for Poly-Si Passivated Back-Junction Back-Contacted Solar Cells », *IEEE J. Photovolt.*, vol. 5, n° 2, p. 507-514, mars 2015, doi: 10.1109/jphotov.2014.2382975.
- [46] M. Ficcadenti et R. Murri, Éd., « Basics of Thin Film Solar Cells », in *Silicon Based Thin Film Solar Cells*, Bentham Science Publishers, 2013, p. 3-28. doi: 10.2174/9781608055180113010005.
- [47] S. Said et A. AL-Hilo, « Prepare heterostructure of MoS₂/TiO₂ solar cell via simple two-steps by hydrothermal method », *J. Educ. Pure Sci.- Univ. Thi-Qar*, vol. 13, n° 3, nov. 2023, doi: 10.32792/jeps.v13i3.340.

- [48] L. Pan, Y. Lin, W. Wang, J. Zhang, X. Liu, M. Li, K. Lu et Z. Wei, « Wide Bandgap Conjugated Polymers Based on Difluorobenzoxadiazole for Efficient Non-Fullerene Organic Solar Cells », *Rapid Communications* 43(22), 2022, doi: 10.1002/marc.202200458.
- [49] Z. E. J. Zouhair, « Réalisation et caractérisation des cellules photovoltaïques organiques », thèse de doctorat, Université d'Angers, 2016, <https://theses.hal.science/tel-01443621>.
- [50] S. A. Cahyani et N. Kusumawati, « Optimization of Polysulfone/Polyethylene Glycol (PSf/PEG) Casted Solution Composition as a Membrane Electrolyte in a Dye-Sensitized Solar Cell (DSSC) », *J. Pijar Mipa*, vol. 19, n° 3, p. 499-506, mai 2024, doi: 10.29303/jpm.v19i3.6610.
- [51] T.-T. Bui et F. Goubard, « Matériaux de transport de trous à base de petites molécules organiques pour cellules photovoltaïques hybrides solides », *Matér. Tech.*, vol. 101, n° 1, p. 102, 2013, doi: 10.1051/mattech/2013056.
- [52] W. Shockley et H. J. Queisser, « Detailed Balance Limit of Efficiency of p-n Junction Solar Cells », *J. Appl. Phys.*, vol. 32, n° 3, p. 510-519, mars 1961, doi: 10.1063/1.1736034.
- [53] T. Sogabea,b,c, Y. Shojia,d, N. Miyashitaa, D.J. Farrella, K. Shibac, H-F. Honge , et Y. Okadaa « High-efficiency InAs/GaAs quantum dot intermediate band solar cell achieved through current constraint engineering », *Mater.*, vol. 1, n° 2, p. 100013, juin 2023, doi: 10.1016/j.nxmater.2023.100013.
- [54] A. E.-M. M. Aly et A. Nasr, « The effect of multi-intermediate bands on the behavior of an $\text{InAs}_{1-x}\text{N}_x/\text{GaAs}_{1-y}\text{Sb}_y$ quantum dot solar cell », *J. Semicond.*, vol. 36, no 4, p. 042001, avr. 2015, doi: 10.1088/1674-4926/36/4/042001.
- [55] P.V. Tumram, R. Nafdey, P.R. Kautkar, S.V. Agnihotri, R. A. Khaparde, S.P. Wankhede, et S.V. Moharil, « Solar cell performance enhancement using nanostructures », *Mater. Sci. Eng. B*, vol. 307, p. 117504, sept. 2024, doi: 10.1016/j.mseb.2024.117504.

Chapitre

Etat de l'art des cellules
tandem III-V-N/Si

II

II.1 Introduction

Les cellules solaires conventionnelles à jonction unique, malgré leur efficacité dans certains domaines, sont intrinsèquement limitées par les propriétés de bande de leurs semi-conducteurs. Pour dépasser ces contraintes et optimiser la conversion photovoltaïque, la recherche s'est orientée vers les cellules solaires multijonctions, ou tandem. Ces dispositifs avancés superposent plusieurs couches de semi-conducteurs, chacune ciblant une portion spécifique du spectre solaire.

Ce chapitre examine les limites des cellules à jonction unique et expose les principes fondamentaux des cellules tandem. Nous nous pencherons sur les outils de modélisation essentiels à l'analyse des phénomènes de l'effet tunnel dans ces structures, en particulier la transition directe inter-bandes. L'accent sera mis sur l'apport des nitrures dans l'amélioration des performances des matériaux III-V/Si pour les cellules multijonctions, ces composés offrant des possibilités uniques d'ajustement de la bande interdite et d'optimisation des interfaces.

Notre analyse couvrira également les diverses configurations de cellules multijonctions, ainsi que les enjeux et solutions liés à la croissance des matériaux III-V sur substrats de silicium, en intégrant le rôle des nitrures dans ces processus. L'objectif est de dresser un panorama complet de l'état de l'art des cellules tandem III-V-N/Si, en mettant en lumière les avancées récentes et les défis technologiques qui façonnent l'avenir de cette technologie prometteuse.

II.2 Limites des cellules solaires à jonction unique

L'efficacité d'une cellule solaire est déterminée par trois facteurs clés : un courant I_{CC} élevé, une tension V_{CO} importante, et un facteur de remplissage aussi proche que possible de l'unité, comme le stipule l'équation du rendement (I.6) présentée au premier chapitre.

Avant d'aborder les avantages des cellules solaires à jonctions multiples par rapport à celles à jonction unique, il est crucial de comprendre les limitations inhérentes à ces dernières. La figure (II.1) présente les différents processus de perte énergétique dans une cellule photovoltaïque à simple jonction de type p-n. Voici une explication pour chaque étape numérotée dans l'image :

- (1) : Pertes de thermalisation des porteurs de charges ;
- (2) : Perte à la jonction p-n ;
- (3) : Perte aux électrodes ;
- (4) : Pertes de Transmission (Photons Non Absorbés);
- (5) : Recombinaison des porteurs.

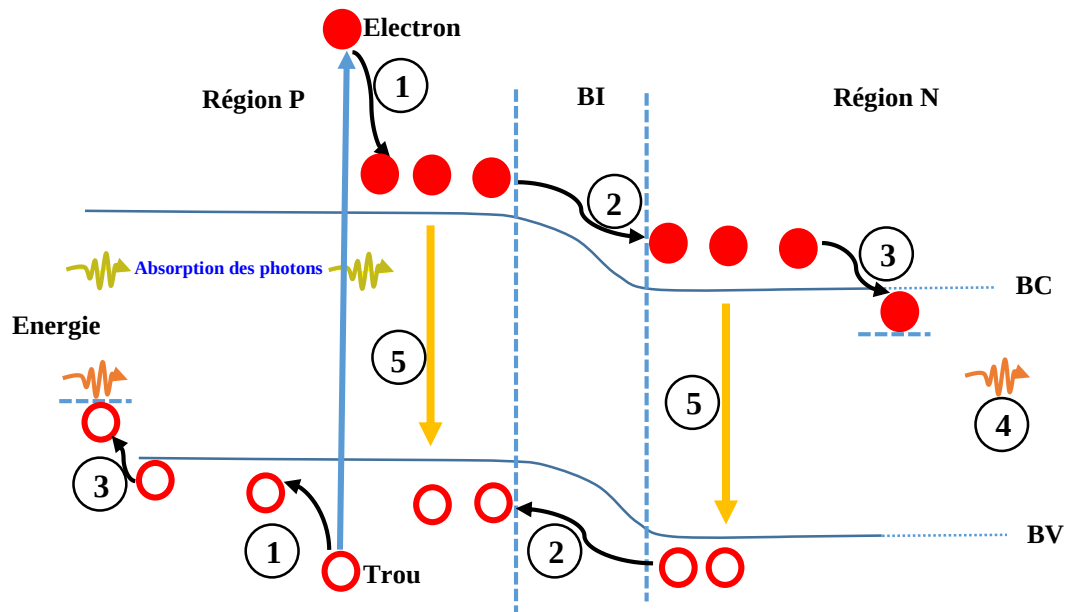


Figure (II.1) : Limitations des cellules solaires à jonction unique [1].

II.2.1 Limitation par la Largeur de Bande

Les pertes d'efficacité fondamentales dans une jonction p-n incluent les pertes par transmission et les pertes thermiques des porteurs chauds (thermalisation). Par conséquent, l'efficacité est intrinsèquement limitée par la largeur de bande des matériaux. Ces deux types de pertes sont responsables de plus de 40 % des pertes d'efficacité pour les cellules solaires en silicium à jonction unique [2].

II.2.2.1 Pertes de Thermalisation

Les matériaux à large bande interdite ne peuvent absorber que les photons à haute énergie, générant ainsi un faible courant de court-circuit mais un potentiel élevé. Les photons ayant une énergie plus élevée que la largeur de bande du matériau génèrent des porteurs chauds (électrons et trous avec une énergie excédentaire). Avant que ces porteurs puissent contribuer à la génération de courant, l'excès d'énergie est perdu sous forme de chaleur, réduisant ainsi l'efficacité.

II.2.2.2 Pertes de Transmission (Photons Non Absorbés)

En revanche, les matériaux à petite bande interdite absorbent davantage de photons, produisant un courant I_{CC} élevé, mais avec une faible énergie potentielle des porteurs. Les photons ayant une énergie inférieure à la largeur de bande du matériau ne sont pas absorbés et passent à travers le matériau, ne contribuant pas à la génération de courant. Cela entraîne des pertes de transmission [2].

II.2.2 Limite de Shockley-Queisser (SQ)

L'efficacité théorique maximale, connue sous le nom de « limite de Shockley et Queisser », peut être calculée en utilisant la théorie de l'équilibre détaillé. Les formules et la théorie associées sont facilement disponibles dans la littérature [3, 4]. Dans ces calculs, il est supposé que tous les photons ayant une énergie supérieure à la bande interdite ($E > E_g$) sont entièrement absorbés par le matériau. Autrement dit, le matériau est considéré comme optiquement suffisamment épais pour absorber tous les photons.

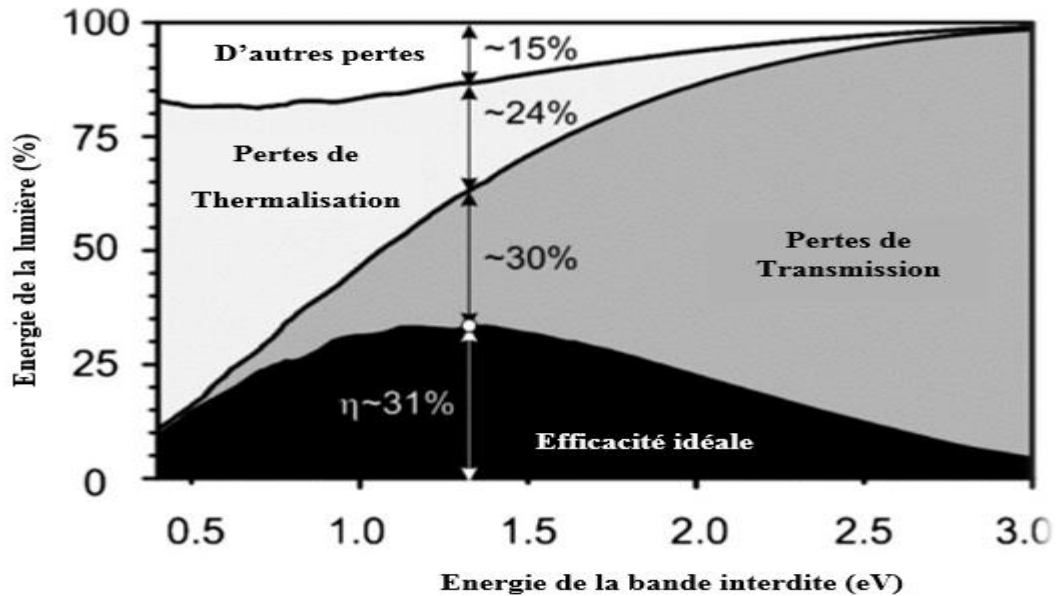


Figure (II.2) : Efficacité idéale d'une cellule solaire en fonction des gaps des semiconducteurs, avec les pertes correspondantes [4].

Cette limite théorique représente une situation idéale où uniquement la recombinaison radiative des paires électron-trou est prise en compte dans les calculs. Ce type de recombinaison est considéré comme le mécanisme fondamental et inévitable dans les semi-conducteurs. Plus précisément, la recombinaison de surface, qui se produit aux interfaces de la cellule solaire, dépend essentiellement de la structure physique du dispositif, de la qualité de la passivation et des conditions spécifiques à la surface du matériau. En parallèle, la recombinaison dans le volume du matériau est principalement influencée par la qualité cristalline du semi-conducteur, notamment par la présence de défauts structuraux comme les dislocations, les impuretés atomiques et les niveaux énergétiques profonds dans la bande interdite. Dans ce modèle idéalisé, le paramètre clé est la durée de vie des porteurs minoritaires, qui est directement liée à leur longueur de diffusion dans le matériau. Cette durée de vie est considérée comme infinie dans ce cas parfait, ce qui signifie que les porteurs de charge peuvent se déplacer indéfiniment dans le matériau sans subir de recombinaison non désirée.

Les pertes électriques (résistives) ainsi que les pertes optiques (réflexion de surface) ne sont pas prises en compte et dépendent principalement des processus de fabrication technologiques et de l'architecture de la cellule [5]. Pour le spectre solaire AM1.5G, la limite théorique maximale de SQ est d'environ 33,7 % pour un matériau idéal avec une bande interdite de 1,34 eV, figure (II.2).

II.3 Principe d'une cellule solaire à jonction multiple (MJ)

La meilleure solution pour réduire les problèmes de thermalisation et de transmission, et ainsi augmenter l'efficacité d'une cellule solaire, est le passage vers une autre catégorie de la cellule solaire, également appelée cellule à jonction multiple. Le principe d'une cellule solaire MJ repose sur la combinaison (souvent en série) de plusieurs jonctions p-n, ou sous-cellules, ayant des énergies de bande interdite différentes et connectées par des jonctions tunnel. Cela permet d'optimiser chaque jonction pour des longueurs d'onde spécifiques, ce qui améliore la conversion du large spectre solaire de manière plus efficace. Cette optimisation est réalisée par le découpage spatial du spectre ou par des sous-cellules empilées avec des configurations à deux, trois ou quatre bornes, figure (II.3).

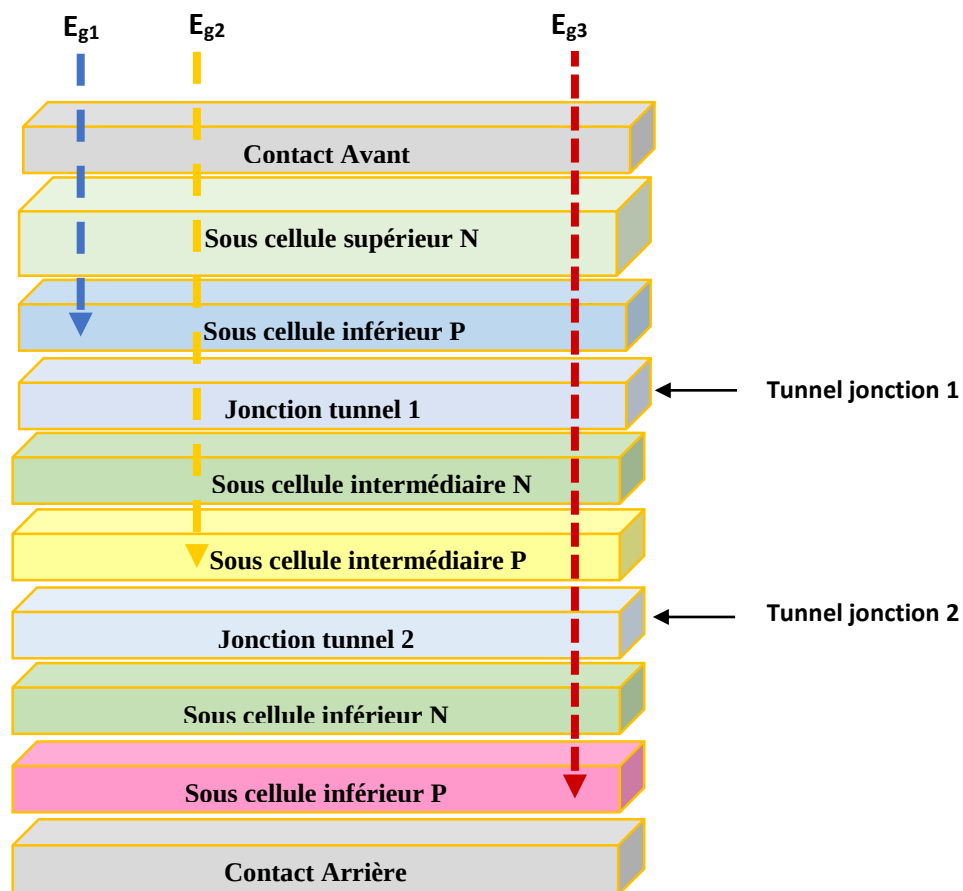


Figure (II.3) : Structure d'une cellule solaire à trois jonctions.

Bien que le découpage spatial du spectre soit conceptuellement simple, il est indésirable en raison des complexités mécaniques et optiques [3]. Dans le cas des configurations à trois et quatre bornes, des structures compliquées, des procédés d'assemblage et des configurations de modules sont nécessaires, ce qui les rend moins souhaitables que les configurations à deux bornes.

Un autre inconvénient de cette conception, est que la cellule ayant le courant de sortie le plus faible limite le courant total du dispositif. Un choix judicieux du matériau et de l'épaisseur des sous-cellules est nécessaire pour assurer l'accord de réseau entre les couches et l'adaptation des courants entre les cellules. Des efficacités, de 38.8 % a été atteint avec des cellules solaires à 5 jonctions [6] et de 37.9 % avec trois jonctions [7].

Dans une cellule tandem monolithique, les jonctions sont empilées dans un ordre de réduction de l'énergie de bande interdite, de sorte que la lumière passe d'abord à travers la couche ayant la plus grande énergie de bande. Les photons dont l'énergie est supérieure à cette bande interdite sont absorbés, tandis que ceux dont l'énergie est inférieure atteignent la jonction suivante. Ce processus se répète en fonction du nombre de jonctions assemblées. Le tableau (II.1) résume quelques structures tandem.

Tableau (II.1) : Etat de l'art de Cellule solaire multi-jonction AM1.5.

Cellule Tandem	Rendement (%)	Surface (Cm ²)	V _{co} (V)	J _{cc} (mA/Cm ²)	FF (%)	Référence
InGaP/GaAs/InGaAs	37.7	1.047	3.065	14.27	86.7	Sasaki et al 2013 [8]
GaInP/GaAs	30.8	0.999	2.547	14.30	84.7	Kayes et al 2014 [9]
GaAsP/Si	14.3	0.040	1.550	12.40	75.0	Grassman 2016 [10]
GaInP/GaAs/Si	25.9	4.000	2.646	12.21	80.2	Feifel et al 2021 [11]
GaInP/GaInAsP//Si	36.1	3.987	3.309	12.70	86.0	Schygulla et al 2023 [12]

II.4 Outils de modélisation de l'effet tunnel des cellules tandem

La modélisation des cellules solaires bénéficie actuellement d'un large spectre des outils de simulation, comprenant des logiciels open-source tels que PC1D, SCAPS et AFORS-HET, ainsi que des solutions propriétaires comme ASA, ASPIN₃, SETFOS et Atlas de Silvaco, ce dernier étant utilisé dans notre étude. Ces outils de simulation reposent fondamentalement sur le modèle de dérive-diffusion des semi-conducteurs, enrichi par l'intégration des phénomènes quantiques complexes. Parmi ces phénomènes, on compte l'émission thermoionique et divers mécanismes d'effet tunnel, notamment le tunnel à travers une couche isolante, le tunnel intra-bande et le tunnel assisté par pièges. Ces ajouts permettent une modélisation plus précise du transport des porteurs de charge aux interfaces hétérogènes.

Dans le contexte des dispositifs multi-jonctions monolithiques, caractérisés par l'interconnexion des sous-cellules via des diodes tunnel de type Esaki, la prise en compte de l'effet tunnel bande-à-bande (BTB) s'avère cruciale pour une description fidèle du comportement des jonctions tunnel. Cependant, une limitation significative persiste dans de nombreux logiciels de simulation, y compris certains mentionnés précédemment : l'incapacité à reproduire avec précision la caractéristique de résistance différentielle négative, typique des diodes Esaki. Cette lacune est principalement due à l'absence d'un modèle robuste de l'effet tunnel BTB dans ces outils.

Pour pallier les limitations des outils de simulation standard, la modélisation des dispositifs multi-jonctions requiert fréquemment une approche hybride, combinant des simulations optiques avancées avec des modèles électriques simplifiés. La modélisation couplée électro-optique complète des cellules solaires tandem est principalement réalisée via des outils de Conception Assistée par Ordinateur pour la Technologie (TCAD) commerciaux, tels qu'Atlas de Silvaco, ou des logiciels propriétaires développés en interne par des groupes de recherche. Atlas Silvaco se démarque par son implémentation robuste de l'effet tunnel BTB, permettant une caractérisation plus précise des cellules multi-jonctions, notamment en ce qui concerne les phénomènes de transport aux interfaces.

Néanmoins, malgré ces progrès significatifs, l'absence de logiciels open-source offrant une gamme complète de fonctionnalités pour la modélisation des cellules solaires tandem reste un obstacle majeur à l'avancement des études théoriques dans ce domaine. Cette lacune met en évidence la nécessité cruciale de développer des outils de simulation plus accessibles et exhaustifs.

De tels outils joueraient un rôle catalyseur dans l'accélération de la recherche et de l'innovation dans le domaine des cellules solaires multi-jonctions, permettant une exploration plus approfondie des phénomènes physiques complexes régissant leur fonctionnement et ouvrant la voie à des optimisations de conception plus efficaces [13, 14].

II.4.1 Transition directe de bande à bande (BTB)

Le mécanisme de transition directe de bande à bande se caractérise par le passage direct d'électrons de la bande de valence d'un matériau vers la bande de conduction, sans l'intervention d'états intermédiaires ou de défauts. Ce processus de tunneling, particulièrement efficace, est un élément clé dans la conception des jonctions tunnel pour les cellules multi-jonctions.

La théorie du tunneling BTB, dont les fondements ont été établis à la fin des années 1950, a connu une évolution significative dans son intégration aux simulateurs TCAD (Technology Computer-Aided Design) depuis les années 1990. Son implémentation dans la modélisation TCAD a initialement été motivée par l'analyse des transistors à effet tunnel, en particulier les MOSFET nanométriques, où le tunneling BTB est devenu un mécanisme de transport de courant prépondérant nécessitant une modélisation plus sophistiquée.

L'amélioration continue des modèles de tunneling BTB, initialement développés pour d'autres applications en électronique (comme les transistors à effet tunnel), couplée à l'expérience acquise dans la simulation des cellules solaires à jonction unique, a permis l'extension et l'adaptation de ces modèles à l'analyse des cellules solaires tandem via des logiciels TCAD commerciaux.

Les modèles de tunneling BTB sont classés en deux catégories principales : les modèles locaux et les modèles non locaux, comme illustré à la figure (II.4). Dans les deux approches, le courant de tunnel est intégré aux équations de continuité des électrons et des trous sous la forme d'un terme de recombinaison supplémentaire (ou, dans certaines références, comme un terme de génération avec un signe négatif).

Dans le cadre des modèles locaux, le terme de recombinaison R_{BTB} est déterminé par des paramètres locaux tels que le champ électrique, la largeur de bande interdite et le gradient des niveaux de Fermi. Bien que conceptuellement plus simples, ces modèles peuvent ne pas capturer pleinement la complexité des phénomènes de tunneling réels.

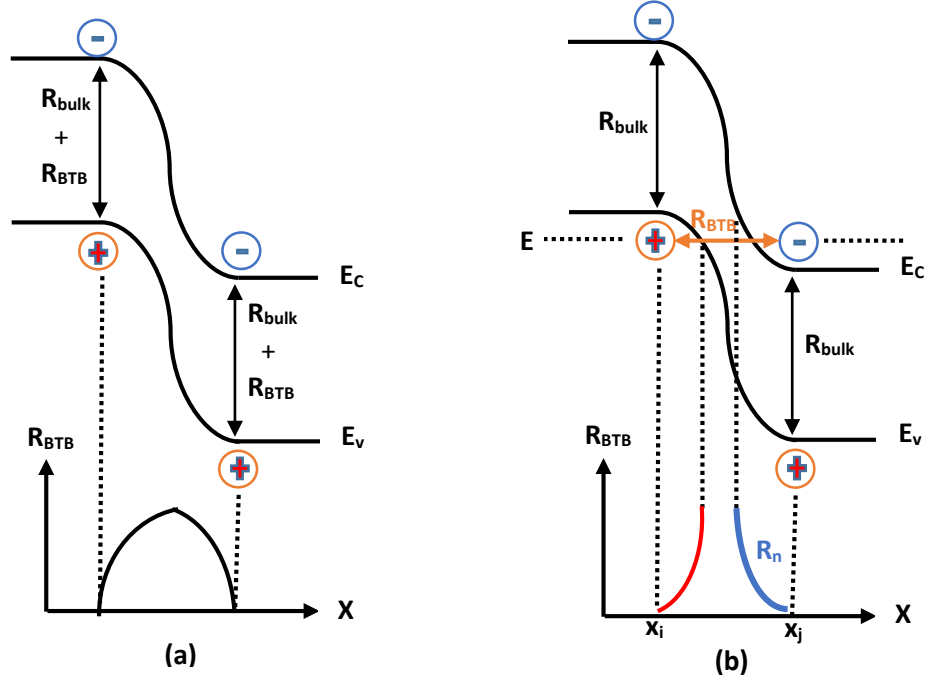


Figure (II.4) : Illustration des concepts physiques de modèle de tunneling BTB

(a) BTB locaux. (b) BTB non locaux [13].

À l'inverse, les modèles non locaux offrent une description plus précise du processus de tunneling BTB en considérant la dépendance de la probabilité de tunnel sur l'ensemble du profil de potentiel à travers la région de tunneling. Dans ces modèles, R_{BTB} est calculé en fonction de multiples variables réparties sur toute la région de tunnel, conformément à l'équation (II.1). Cette approche permet de mieux représenter les interactions électroniques et les variations du potentiel électrique, offrant ainsi une modélisation plus fidèle des phénomènes physiques impliqués.

Le taux de recombinaison (R_{BTB}) entre les points de tunneling x_i et x_j au niveau d'énergie E est donné par :

$$R_{BTB}(i, j, E) = \frac{A_{CV}^* TF}{qK} \Gamma(i, j, E) \ln \left(\frac{1 + e^{\frac{E_{fp}(i) - E}{KT}}}{1 + e^{\frac{E_{fn}(j) - E}{KT}}} \right) \quad (II.1)$$

Où :

- A_{CV}^* : Constante de Richardson effective ;
- T : Température ;
- F : Champ électrique ;

- $E_{fp}(i)$ et $E_{fn}(j)$: Quasi-niveaux de Fermi pour les trous et les électrons, respectivement.

À l'équilibre thermique, $E_{fp}(i) = E_{fn}(j)$ et, comme prévu, l'équation (II.1) est nulle. La probabilité de tunneling bande-à-bande $\Gamma(i, j, E)$ entre les points x_i et x_j , au niveau d'énergie E , est calculée en utilisant une relation de dispersion à deux bandes.

$$\Gamma(i, j, E) = e^{-2 \int_{x_i}^{x_j} \frac{K_c K_v}{\sqrt{k_c^2 + k_v^2}} dx} \quad (\text{II.2})$$

où les nombres d'onde locaux Sont basés sur l'approximation de Wentzel–Kramers–Brillouin (WKB). Ici :

- $\hbar$: désigne la constante de Planck réduite ;
- m_c^* , m_v^* : représentent respectivement les masses effectives des électrons et des trous.

$$K_c = \sqrt{2 m_c |E_c(x) - E|} / \hbar \quad (\text{II.3})$$

$$K_v = \sqrt{2 m_v |E - E_v(x)|} / \hbar \quad (\text{II.4})$$

Lors du calcul numérique de l'équation (II.2), un maillage finement ajusté à la jonction tunnel est nécessaire afin d'évaluer avec précision l'intégrale et la probabilité de tunneling. Le R_{BTB} est incorporé dans les équations de continuité du courant pour les nœuds situés entre x_i et x_j . Dans le cas du diagramme de bandes d'énergie, figure (II. 4.b), le R_{BTB} non local (i, j, E) est lié aux trous à x_i et aux électrons à x_j . Par conséquent, les équations de continuité du courant pour les porteurs à la position x_i sont :

$$\frac{1}{q} \nabla J_n(x_i) = R_{bulk}(x_i) - G(x_i) \quad (\text{II.5})$$

$$\frac{1}{q} \nabla J_p(x_i) = G(x_i) - R_{bulk}(x_i) - R_{BTB}(i, j, E) \quad (\text{II.6})$$

Tandis que, pour les porteurs à la position x_j , les équations de continuité s'écrivent ::

$$\frac{1}{q} \nabla J_n(x_j) = R_{bulk}(x_j) + R_{BTB}(i, j, E) - G(x_j) \quad (\text{II.7})$$

$$\frac{1}{q} \nabla J_p(x_j) = G(x_j) - R_{bulk}(x_j) \quad (\text{II.8})$$

Où :

- G : représente le taux de génération causé par l'absorption des photons ;

- R_{bulk} : désigne la recombinaison en volume causée par la recombinaison non radiative :
- J_n et J_p : sont les densités de courant des électrons et des trous, respectivement.

Les quatre équations de (II.5) à (II.8) sont uniquement utilisées pour les nœuds de simulation situés dans la jonction tunnel. En dehors de la région de la jonction tunnel, le terme R_{BTB} est éliminé, et le transport des porteurs revient à une description classique par dérive-diffusion [14].

II.5 Architectures possibles et exigences associées

Il existe trois configurations principales de cellules tandem, qui se distinguent par le nombre de connexions nécessaires pour les intégrer dans un module. Chaque configuration présente ses propres avantages et défis, offrant ainsi différentes options pour optimiser les performances et la fabrication des cellules solaires tandem.

II.5.1 Configuration à deux terminaux (2T)

Elles ne possèdent que deux connexions, ce qui permet une intégration similaire aux cellules à jonction unique classiques. Dans cette configuration, les sous-cellules sont assemblées en série, ce qui résulte en une tension V_{co} plus élevée, égale à la somme des tensions des sous-cellules, figure (II.5).

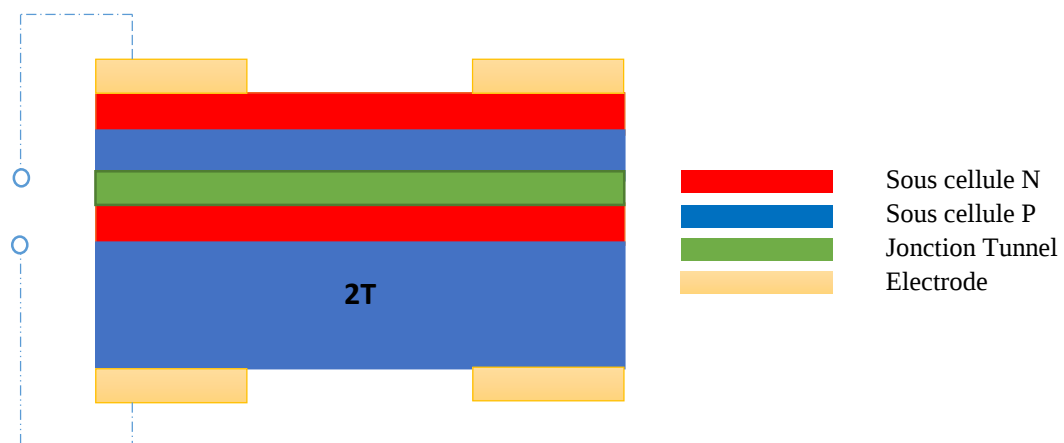


Figure (II.5) : Configuration à deux terminaux [15].

Cependant, le même courant traverse toutes les sous-cellules, ce qui signifie que la sous-cellule générant le courant le plus faible qui limite le courant de l'ensemble du dispositif. Cette contrainte nécessite une optimisation minutieuse de la structure cellulaire pour assurer un équilibrage des courants entre les sous-cellules. De plus, cette configuration requiert l'utilisation de jonctions tunnel et de processus de liaison ou de fabrication de cellules supérieures exigeants.

Malgré ces défis, cette approche a été adoptée avec succès par le « ISE » (Fraunhofer-Institut für Solare Energie systeme) qui détient actuellement le record d'efficacité pour les cellules tandem à trois jonctions. Par exemple, une cellule de GaInP/GaAs//Si atteignant une efficacité de 33,3% sous 1 soleil [16]. Dans le domaine des cellules pérovskites, une cellule tandem texturée avec dépôt monolithique de pérovskite sur silicium a atteint une efficacité de 25,2% [17].

II.5.2 Configuration à quatre terminaux (4T)

Elles se caractérisent par des contacts indépendants pour chaque sous-cellule. Dans cette configuration, les deux cellules fonctionnent séparément, la cellule supérieure agissant comme un filtre lumineux pour la cellule inférieure. L'efficacité totale de la cellule tandem est simplement la somme des efficacités des deux sous-cellules, figure (II.6).

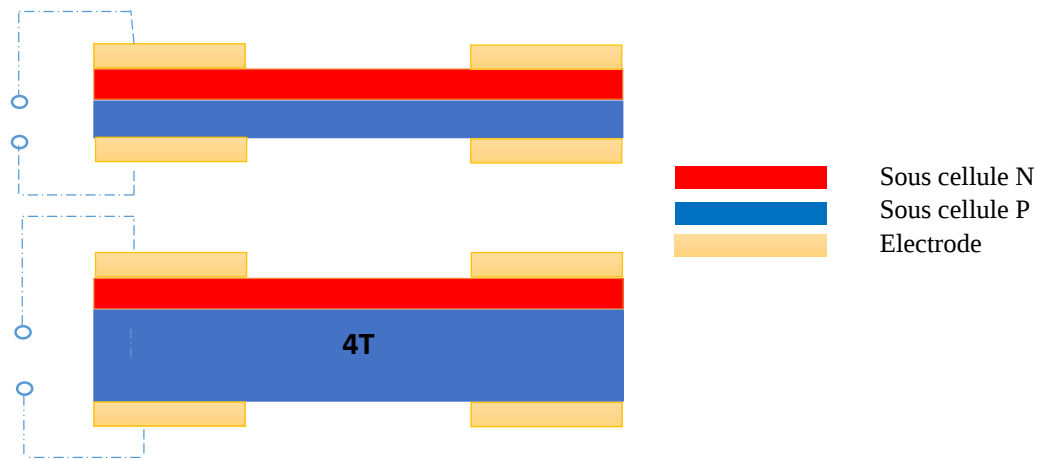


Figure (II.6) : Configuration à quatre terminaux [15].

Les performances record obtenues avec cette configuration sont particulièrement impressionnantes. Les cellules tandem utilisant une combinaison GaAs/Si ont démontré un rendement exceptionnel de 32,82%, tandis qu'une configuration alternative utilisant GaInP/Si a atteint un rendement remarquable de 32,45% [18]. Ces résultats témoignent du potentiel considérable de cette approche dans l'amélioration de l'efficacité des cellules solaires.

Un avantage technique majeur et distinctif de cette configuration réside dans la possibilité de traiter et d'optimiser chaque sous-cellule de manière indépendante durant le processus de fabrication. Cette caractéristique permet une grande flexibilité dans le processus de production, l'étape d'empilement final pouvant être réalisée comme ultime phase du processus de fabrication. Cette approche modulaire facilite non seulement l'optimisation individuelle des composants mais permet également une meilleure gestion des défauts et un contrôle qualité plus précis à chaque étape de la fabrication.

II.5.3 Configuration à trois terminaux (3T)

Elle représente une troisième possibilité, où les sous-cellules partagent l'un des contacts. Cette approche permet d'exploiter chaque sous-cellule à son point de puissance maximum. Elle est particulièrement intéressante dans une configuration où la cellule inférieure est une cellule de silicium à contact arrière interdigité, figure (II.7), [19].

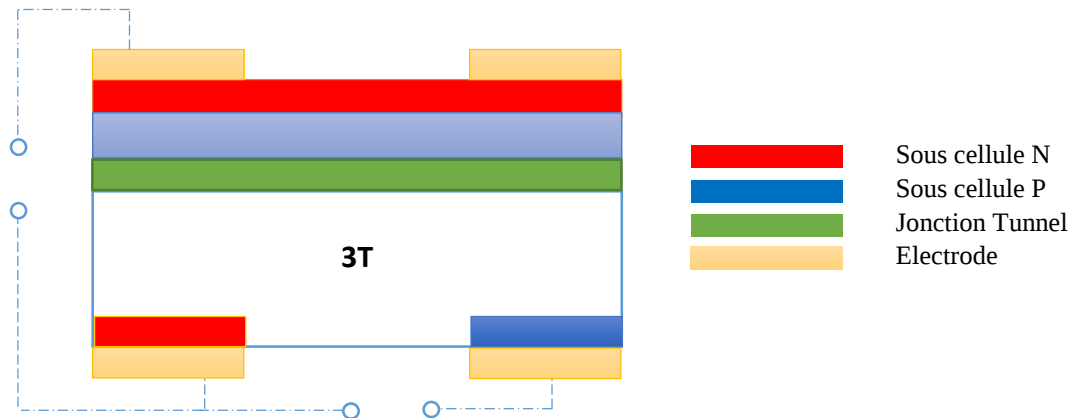


Figure (II.7) : Configuration à trois terminaux [15].

II.6 Cellules Multijonctions CPV : Du spatial vers terrestre

Les cellules multijonctions qui sont fabriquées à partir de semi-conducteurs III-V sont coûteuses. Ainsi, elles sont utilisées pour les applications spatiales qui sont moins concernées par les problèmes de coût et où la résistance des composés III-V aux dommages causés par les rayonnements est un avantage majeur [20]. Les systèmes de concentration photovoltaïque (CPV) émergent comme une approche prometteuse pour rendre les cellules multijonctions économiquement viables dans les applications terrestres. Cette technologie vise à résoudre le problème du coût élevé associé aux cellules tandem, initialement développées pour les applications spatiales.

Le principe de base des systèmes CPV consiste à utiliser des systèmes optiques, tels que des miroirs ou des lentilles de Fresnel, pour concentrer la lumière solaire sur une surface réduite de cellules multijonctions. Cette concentration permet d'atteindre des efficacités remarquables, avec des records allant jusqu'à 46% d'efficacité sous une intensité lumineuse équivalente à 518 soleils [21], et des modules atteignant 38,9% d'efficacité à 333 soleils [22]. Cependant, malgré ces performances impressionnantes, les systèmes CPV font face à plusieurs défis qui limitent actuellement leur adoption généralisée. Ils nécessitent des zones à forte irradiance normale directe, ce qui restreint leur utilisation à des régions géographiques spécifiques.

De plus, leurs composants optiques sont sensibles à l'encrassement et leurs dispositifs de suivi solaire exigent une grande précision, ce qui augmente significativement les coûts de maintenance et d'opération. Ces difficultés, associées à un marché encore peu développé et à un manque de normalisation, expliquent la chute drastique des installations CPV, qui sont passées de plus de 120 MW en 2012 à environ 10 MW en 2016 [23].

Malgré ces obstacles, la technologie CPV conserve un potentiel considérable. Grâce aux progrès continus dans la conception optique, à une maintenance mieux maîtrisée et à une standardisation croissante, les systèmes CPV pourraient rivaliser plus efficacement avec les panneaux solaires traditionnels en silicium. L'évolution future de cette technologie reposera sur sa capacité à surmonter ces obstacles techniques et économiques, tout en exploitant son excellente efficacité pour devenir une solution rentable dans la production d'énergie solaire à grande échelle.

II.7 Etat de l'art des cellules Tandem à base matériaux III-V

II.7.1 Première partie : Cellules à double jonction III-V/ Si

Au début des années 1980, les chercheurs ont exploré diverses approches pour créer des cellules solaires tandem efficaces en combinant des matériaux III-V avec du silicium.

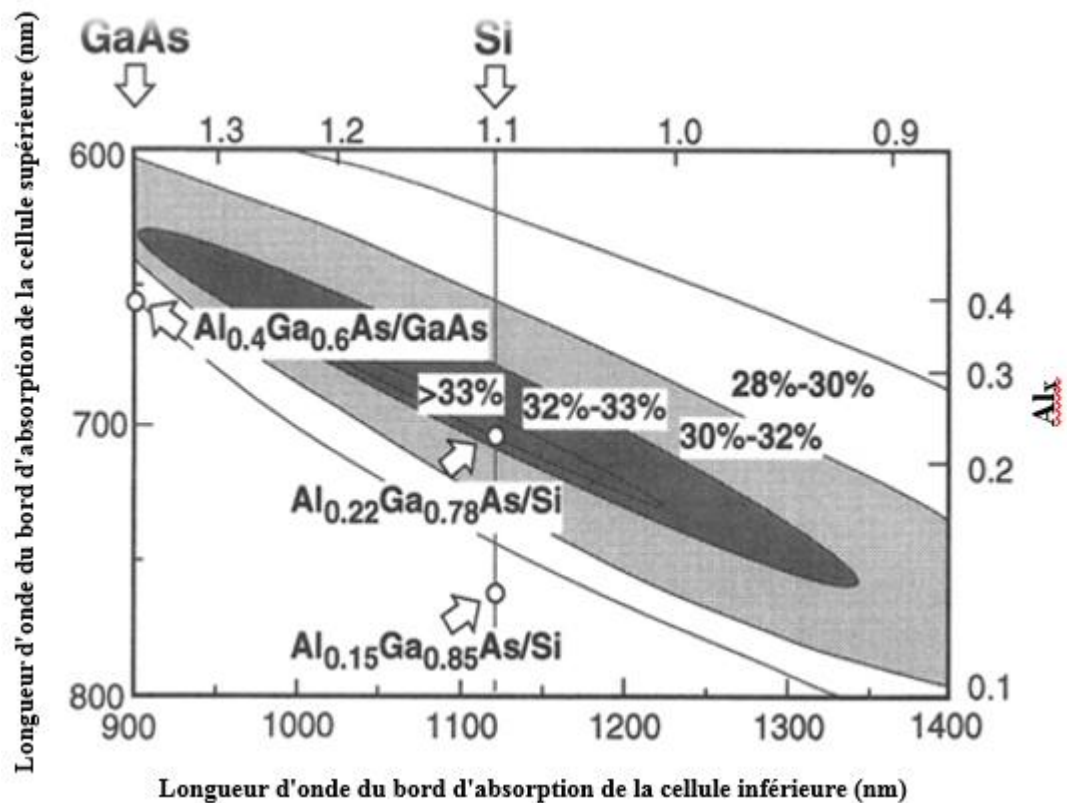


Figure (II.8) : L'efficacité (AM0) pour les cellules tandem $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{Si}$ [24].

Cependant, des défis techniques tels que les incompatibilités de réseau cristallin et la sensibilité à l'oxygène ont limité le succès commercial de ces technologies prometteuses, malgré leur potentiel théorique élevé [3]. Par exemple, une efficacité théorique allant jusqu'à 32 % peut être atteinte en combinant les énergies de bande interdite de 1,75 eV pour la cellule supérieure avec de 1,11 eV pour la cellule inférieure (voir la figure II.8) [24].

II.7.2 Deuxième partie : Cellules à double jonction III-V/ GaAs

Le NREL (National Renewable Energy Laboratory) a marqué un tournant dans l'histoire des cellules solaires multi-jonctions (MJSC) en 1984. Ils ont conçu un système novateur associant GaInP et GaAs sur un substrat de GaAs, ouvrant la voie à la première MJSC économiquement viable [25]. Cette cellule innovante se compose de deux sous cellules : une cellule supérieure de $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$, dont la bande interdite se situe entre 1,8 et 1,9 eV, et une cellule inférieure de GaAs, avec une bande interdite de 1,44 eV. Cette configuration a permis de surmonter les difficultés liées à la sensibilité à l'oxygène, un problème récurrent dans les modèles antérieurs.

L'innovation majeure réside dans l'utilisation d'une approche sans aluminium, tout en assurant une parfaite adaptation au réseau cristallin. Cette avancée a ouvert la possibilité d'atteindre une efficacité théorique impressionnante de 34%. Les années 90 ont vu des progrès significatifs dans l'optimisation de ces cellules. En affinant l'épaisseur de la couche supérieure, les chercheurs ont réussi à obtenir des rendements dépassant 27% sous le spectre solaire AM1.5G [26]. L'industrie aéronautique a rapidement saisi le potentiel de cette technologie. Dès 1996, la production de cellules GaInP/GaAs sur des substrats de germanium a débuté, élargissant encore le champ des applications possibles.

Les performances de ces cellules continuent d'impressionner. Pour les applications terrestres, un record d'efficacité de 34,1% a été atteint, dans des conditions de concentration équivalentes à 467 fois l'intensité solaire normale [27].

II.7.3 Troisième partie : Évolution des cellules triple et quatre jonctions

En 1997, les chercheurs ont fait une avancée significative en ajoutant une troisième jonction de germanium à la cellule tandem GaInP/GaAs existante. Cette nouvelle structure, nommée GaInP/Ga(In)As/Ge, présentait des bandes interdites de 1,86 eV, 1,39 eV et 0,67 eV respectivement. Malgré un déséquilibre de courant, cette cellule avait le potentiel théorique d'atteindre une efficacité de 38,6% sans concentration solaire [28].

L'incorporation d'indium dans la couche de GaAs a permis d'améliorer à la fois l'ajustement du réseau cristallin et l'équilibrage des courants. Néanmoins, cette innovation a engendré de nouveaux défis, particulièrement au niveau de l'interface Ga(In)As/Ge. Les différences de structures cristallines et de compositions chimiques entre ces matériaux ont posé problème. En particulier, la croissance d'une couche de GaAs polaire sur un substrat de Ge non-polaire a généré des défauts structurels, tels que des domaines anti-phase et des défauts d'empilement. Bien que diverses approches aient été proposées pour optimiser cette croissance, les résultats sont restés variables et parfois contradictoires. Ces inconsistances pourraient s'expliquer par des différences dans les équipements utilisés, la qualité des matériaux, ou les méthodes de préparation des substrats. Pour atténuer ces problèmes, des recommandations ont été établies, mettant l'accent sur un nettoyage rigoureux du substrat et l'utilisation de techniques de croissance adaptées [29].

Après avoir résolu les problèmes liés à l'hétéro-interface de GaAs/Ge, les chercheurs se sont concentrés sur la maîtrise de la diffusion des dopants dans le substrat de germanium lors de l'hétéro-épitaxie à haute température [30]. Les jonctions se sont avérées plus stables à basse température, et le phosphore est devenu le dopant préféré pour le germanium. Pour les cellules GaInP/Ga(In)As/Ge, la tension de sortie de la cellule Ge s'est révélée cruciale. En 2007, cette structure a atteint un record d'efficacité de 40.7% sous 240 soleils [31]. Ces cellules sont maintenant largement utilisées dans les applications spatiales et terrestres à concentration, produites par des entreprises comme Spectrolab et Azurspace [31,32].

Pour améliorer davantage l'efficacité, les scientifiques ont cherché à optimiser la combinaison des bandes interdites en augmentant la composition en indium des cellules supérieure et médiane. Cette approche a cependant créé un désaccord de maille, générant des défauts. Une cellule $\text{Ga}_{0,35}\text{In}_{0,65}\text{P}/\text{Ga}_{0,83}\text{In}_{0,17}\text{As}/\text{Ge}$ a atteint 41,1% d'efficacité sous 454 soleils en 2009, malgré un désaccord de 1,2% [33]. Des structures tampons à gradients et des diodes tunnel spécifiques ont été développées pour gérer les dislocations, mais l'évolution à long terme des défauts reste incertaine.

Le NREL a proposé une approche novatrice avec une structure inversée à désaccord de maille [34]. Cette méthode consiste à cultiver les jonctions dans l'ordre croissant de désaccord de maille, limitant ainsi l'impact des défauts. Cette technique a permis d'atteindre un record d'efficacité de 44,4% sous 302 soleils en 2013 [7].

Les recherches ont ensuite porté sur le développement de cellules à quatre jonctions, visant à atteindre un rendement allant jusqu'à 33,6% sous les conditions AM0 [35]. Toutefois, la combinaison de matériaux présentant un désaccord de maille constitue un défi de taille, car elle entraîne la formation de dislocations, ce qui peut affecter négativement la performance des cellules. Une percée significative a été réalisée grâce à la technique de collage de wafers, permettant de combiner des matériaux désaccordés sans créer de dislocations [36]. En 2014, cette approche a permis d'atteindre un record mondial d'efficacité de 44,7% sous 297 soleils avec un dispositif à quatre jonctions [21]. Bien que coûteuse, cette méthode offre d'excellentes qualités matérielles pour toutes les jonctions.

II.8 Défis liés à la croissance de matériaux III-V/Si et solution proposée

Les défis techniques liés à la croissance des matériaux III-V sur silicium sont nombreux et complexes, en particulier dans le cadre des cellules solaires tandem, qui suscitent un grand intérêt en raison de leur potentiel d'efficacité élevée. Cependant, l'intégration de ces matériaux sur du silicium pose plusieurs problèmes techniques majeurs. Parmi les défis principaux, on trouve la gestion de l'interface entre les matériaux polaires (III-V) et non polaires (Si), ainsi que les différences de coefficients de dilatation thermique entre ces deux types de matériaux.

Ces écarts peuvent entraîner des contraintes thermiques supplémentaires lors du processus de croissance, augmentant ainsi le risque de défauts dans la structure cristalline. Dans cette section, nous examinerons diverses méthodes proposées pour surmonter ces défis, en vue d'améliorer la performance et la fiabilité des cellules solaires tandem [37].

II.8.1 Défi du désaccord de maille

Le principal défi réside dans le désaccord de réseau, c'est-à-dire la différence entre les paramètres de maille cristalline des matériaux III-V et du silicium. Le silicium possède un paramètre de maille de 0,357 nm, qui ne correspond à aucun des composés III-V. Par exemple, les alliages AlGaAs ont des constantes de maille proches de celles du GaAs, et le GaInP est accordé au réseau du GaP à une certaine composition. Pour surmonter ce désaccord de maille, la croissance directe des matériaux III-V sur silicium nécessite l'utilisation de couches tampons, souvent basées sur des alliages de GaP ou de SiGe. Une épitaxie cohérente de couches uniformes n'est réalisable que pour des désaccords de maille relativement faibles, généralement inférieurs à 1 %, et pour des épaisseurs de couche qui restent en deçà d'une certaine valeur critique.

Lorsque cette épaisseur critique est dépassée, la couche tend à relâcher l'énergie de contrainte accumulée en générant des dislocations. Ces dislocations sont particulièrement préjudiciables aux propriétés optoélectroniques de la couche, car elles servent de centres de recombinaison pour les porteurs de charge, ce qui réduit considérablement l'efficacité des dispositifs [37].

II.8.2 Défi de la différence de dilatation thermique

La différence de dilatation thermique entre les matériaux III-V et le silicium exacerbe encore ces problèmes. Par exemple, l'arséniure de gallium, avec sa constante de maille de 0,565 nm, présente une différence de 4 % avec le réseau cristallin du silicium à température ambiante. Cette différence s'amplifie à la température de croissance par épitaxie par jets moléculaires (MBE) en raison des coefficients de dilatation thermique différents : $5,73 \times 10^{-6} \text{ }^{\circ}\text{C}^{-1}$ pour le GaAs contre $2,6 \times 10^{-6} \text{ }^{\circ}\text{C}^{-1}$ pour le silicium. Cette différence peut atteindre 18 %, rendant une croissance cohérente et sans défauts encore plus difficile.

II.8.3 Solution 1 : Croissance directe des matériaux III-V sur Si

Pour améliorer la qualité des couches désaccordées, des tampons d'une épaisseur de 2 μm combinés à un recuit par cycles thermiques (TCA) ont été utilisés [38].

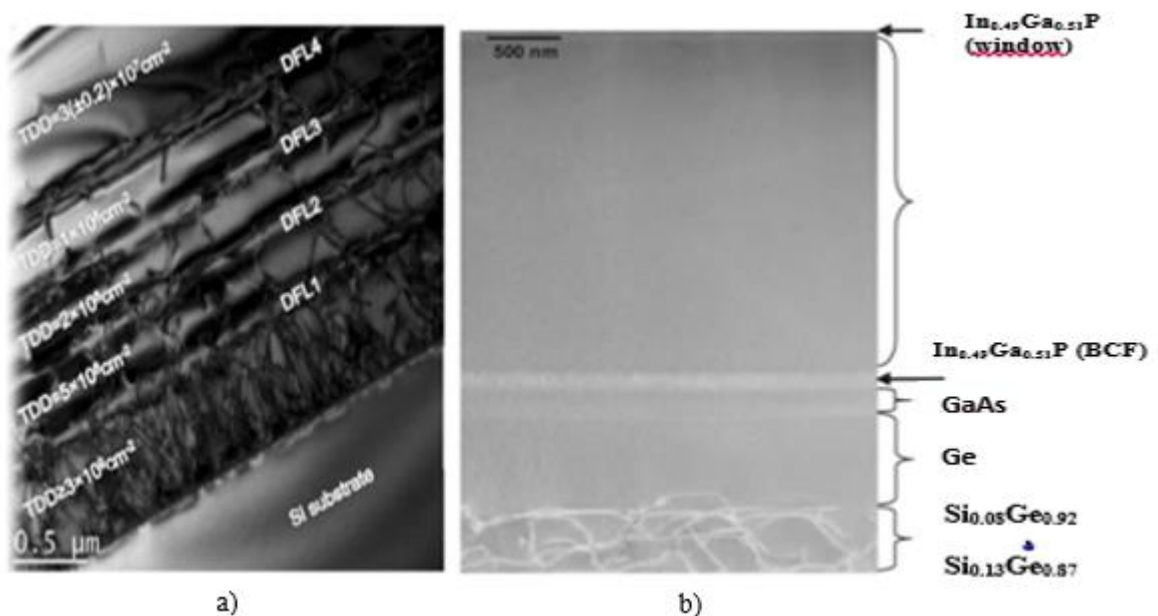


Figure (II.9) : a) Réduction de la densité de dislocations avant la croissance du couche tampon par l'utilisation des filtres et le TCA [41]. b) Croissance d'une cellule GaAs sur Si en utilisant une couche tampon SiGe [39].

Cette méthode appliquée par « S M Vernon et al » [38] permet de réduire la densité des dislocations dans les couches actives III-V, aboutissant à une efficacité de 16,6 % sous illumination AM1.5G [38]. Cependant, il convient de noter que l'ensemble de cette structure, comprenant la cellule et le tampon, atteignait une épaisseur de 6 μm , et que l'élimination complète des dislocations restait impossible.

En effet, la même structure cultivée sur substrat GaAs présente un rendement de 24,7 %, avec une longueur de diffusion des porteurs environ vingt fois supérieure à celle mesurée pour la cellule cultivée sur substrat de silicium. D'autres approches ont été explorées, comme l'utilisation de couches filtrant les dislocations (successions complexes de super-réseaux) et le TCA pour la croissance de cellules AlGaAs sur silicium [40].

Une autre méthode consiste à utiliser des couches graduelles pour modifier progressivement la constante de réseau. Deux voies ont été étudiées pour passer du paramètre de maille du silicium à celui du GaAs : l'utilisation d'alliages SiGe ou la croissance commençant par GaP, suivie d'alliages GaAsP, pour finir par GaAs (voir la figure II.9). Grâce à une couche tampon graduelle en SiGe, une cellule GaAs avec une efficacité de 18,1% a été obtenue sur un substrat de silicium [39]. Bien que ces méthodes offrent des solutions pratiques pour l'intégration des matériaux III-V sur le silicium, elles présentent des limitations importantes pour une utilisation en cellules tandem. En effet, ces épaisses couches tampons ne sont pas transparentes au spectre absorbé par le silicium, ce qui entraîne une absorption parasite significative et réduit ainsi le courant photoélectrique de la cellule inférieure en silicium. De plus, la croissance de ces couches tampons ajoute un coût supplémentaire, ce qui complique leur adoption dans des dispositifs tandem à grande échelle.

Une autre approche prometteuse est l'utilisation de nanofils, qui permet de résoudre le problème du désaccord de réseau [41]. Grâce à leur géométrie unique, la contrainte est relaxée élastiquement aux surfaces libres des nanofils. Cependant, la croissance de ces structures reste complexe et nécessite un substrat structuré, rendant leur mise en œuvre à grande échelle industrielle difficile.

Enfin, une autre solution intéressante consiste à inverser le processus en faisant croître le silicium sur les matériaux III-V. Cette technique tire parti de la température de croissance plus basse offerte par la déposition chimique en phase vapeur assistée par plasma (PECVD) [42], ce qui pourrait faciliter l'intégration des matériaux tout en maintenant des coûts de production plus compétitifs.

II.8.4 Solution 2 : Croissance à distance et collage

Une méthode plus rationnelle consiste à faire croître la cellule III-V sur un substrat de GaAs, puis à la coller sur la sous-cellule en silicium dans une seconde étape.

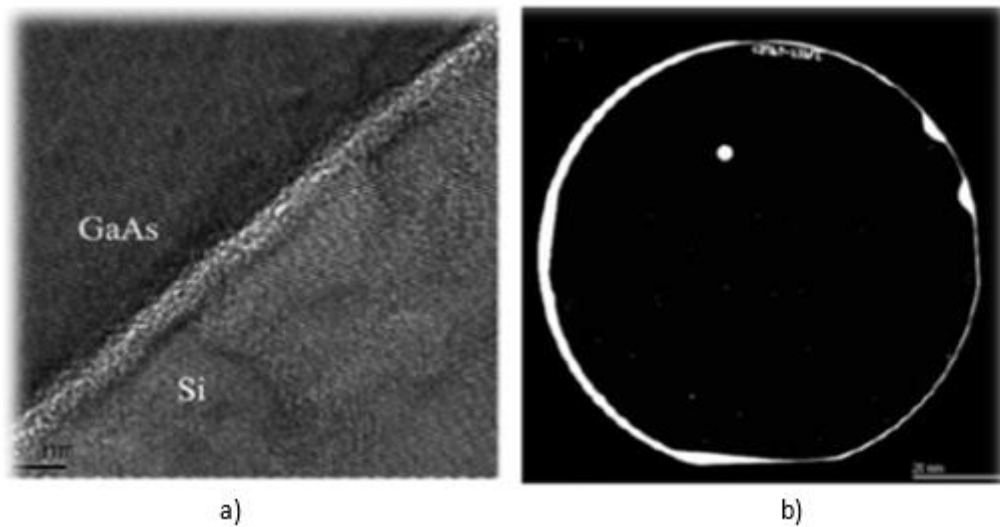


Figure (II.10) : a) Image MET haute définition de l'interface de la cellule III-V collée sur une cellule en silicium. b) Image de Microscopie Acoustique à Balayage de la cellule III-V collée sur le Si. Les zones noires sont correctement collées, les zones blanches sont des vides dus à la contamination de surface [37].

Les couches actives III-V peuvent être séparées de leur substrat de GaAs par un procédé de décollement épitaxial (ELO), permettant la réutilisation du substrat. Cette approche peut être économique et évite les problèmes de désaccords de mailles (voir la figure II.10). Pour cette méthode de collage de plaquettes, les surfaces des deux échantillons sont mises en contact dans des conditions spécifiques : sous vide poussé, faible pression mécanique appliquée, et parfois en incluant un traitement par plasma [43].

Une fine couche amorphe se forme à l'interface, assurant un collage permanent des deux pièces tout en permettant la conduction électrique d'une cellule vers l'autre. Cette technique nécessite des interfaces lisses et est très sensible à la rugosité des échantillons ou à la présence d'impuretés. Une rugosité moyenne quadratique aussi faible que 1 nm peut provoquer des vides entre les échantillons, ce qui est évidemment préjudiciable pour la cellule solaire tandem [44]. Toutes les méthodes mentionnées précédemment sont utilisées pour fabriquer des cellules tandem à deux terminaux (2T). L'empilement mécanique est une autre méthode de collage qui permet la réalisation de tandems à quatre terminaux (4T).

Les cellules sont collées avec une résine époxy de chaque côté d'une plaque de verre. La résine de collage doit être transparente, et l'alignement des contacts de la cellule supérieure avec ceux de la cellule inférieure est important pour minimiser l'ombrage. L'avantage majeur de cette méthode est que les deux cellules peuvent être traitées séparément. De plus, il n'y a pas de contrainte sur la morphologie des surfaces, qui peuvent être texturées puisqu'elles seront planarisées par la résine de collage. Ainsi, aucune conception spécifique n'est requise pour la cellule Si (hormis le dimensionnement), et toutes les technologies Si actuelles du marché conviennent à ce type de tandem [37].

II.9 Etat de l'art des cellules Tandem à base de matériaux III-V-N

Dans une cellule tandem III-V, telle que la structure $\text{Ga}_{0.49}\text{In}_{0.51}\text{P}/\text{Ga}_{0.99}\text{In}_{0.01}\text{As}/\text{Ge}$, la jonction inférieure en germanium génère un excès de courant, limitant ainsi l'efficacité globale du dispositif. Pour surmonter cette limitation tout en préservant l'accord de maille et en évitant les problèmes de fiabilité, l'incorporation d'azote (N) dans ces alliages III-V s'est avéré une solution prometteuse.

Cette approche a permis de résoudre les défis persistants liés aux composés III-V. Une avancée significative a été réalisée avec le développement d'une cellule solaire multi-jonctions adaptée, intégrant une sous-cellule inférieure de GaInAsSbN ayant une bande interdite de 1 eV [45]. Ce comportement spécifique des nitrures dilués a d'abord été exploré en 1994 dans la zone active des diodes laser. Les chercheurs se sont intéressés à ce phénomène car il a été observé que l'ajout de petites quantités d'azote dans les matériaux III-V comme le GaAs entraîne deux phénomènes notables [46] :

- Une réduction de désaccord de maille ;
- Une diminution significative de la bande interdite, un phénomène connu sous le nom d'effet de "grand fléchissement de la bande interdite" (giant bandgap bowing effect).

Pour expliquer ce comportement spécifique (III-V-N), deux modèles théoriques ont été utilisés avec succès, le modèle de répulsion de bande (Band Anti Crossing BAC) et le modèle des calculs de liaison étroite (Tight Binding Calculations TBC) [47, 48]. Ces modèles permettent de comprendre le mécanisme sous-jacent : les atomes d'azote, hautement électro-négatifs, lorsqu'ils sont incorporés dans le GaAs ou d'autres matériaux III-V, ont tendance à localiser les électrons avec des niveaux d'énergie proches de la bande de conduction.

L'interaction entre les états localisés de l'azote et les états étendus du GaAs entraîne un phénomène crucial : la scission de la bande de conduction en deux sous-bandes distinctes. Cette division est responsable de la réduction observée de la bande interdite du matériau [49].

II.9.1 Exemple de l'alliage GaInAsN

Il présente des caractéristiques intéressantes pour les applications photovoltaïques, notamment la possibilité d'ajuster son paramètre de maille pour s'aligner sur celui du GaAs ou du Ge, tout en offrant une bande interdite modulable entre 0,8 eV et 1,4 eV, simplement en contrôlant les concentrations d'azote et d'indium. Cette flexibilité a suscité un grand intérêt pour le développement de cellules solaires à base de GaInAsN, tant en configuration mono-jonction que multi-jonctions [49].

Cependant, malgré ces efforts, les performances de ces dispositifs restent limitées. Les principaux obstacles rencontrés sont dus à la présence de défauts intrinsèques, d'états d'énergie localisés induits par l'azote, ainsi que d'impuretés comme l'hydrogène ou le carbone. Ces facteurs entraînent une réduction significative de la longueur de diffusion des porteurs minoritaires, ce qui se traduit par une faible efficacité quantique et un photocourant insuffisant. En conséquence, le GaInAsN s'est avéré inadapté pour une utilisation comme troisième jonction dans les cellules solaires multi-jonctions, notamment en dessous des sous-cellules GaAs/InGaP [50]. Ces défis soulignent la complexité de l'ingénierie des matériaux à base de nitrures dilués et mettent en lumière la nécessité de poursuivre les recherches pour améliorer la qualité cristalline et les propriétés électroniques de ces alliages prometteurs.

Le développement des nitrures dilués a été freiné par des problèmes liés à la croissance par MOCVD, la technique standard utilisée dans l'industrie pour la fabrication des cellules solaires III-V. Cependant, ces matériaux ont été intensivement étudiés en utilisant la méthode MBE, une technologie généralement adoptée pour la recherche sur les nouveaux matériaux. Le MBE offre des avantages significatifs par rapport au MOCVD pour la croissance des nitrures dilués, notamment en réduisant le dopage en carbone et les complexes liés à l'hydrogène. De plus, le MBE permet un contrôle plus précis des conditions de croissance grâce à des températures relativement basses, ce qui évite les effets de séparation de phase et les effets de grappes (clustering), tout en permettant un contrôle plus précis du ratio V/III et une quantité de nitrures disponible pour la nucléation [49] [51].

Cependant, la fenêtre de croissance est étroite en raison de la grande différence (plus de 20 %) entre les paramètres de réseau du GaAs et du GaN, ainsi que de la différence importante entre les énergies des orbitales atomiques de l'As et du N. Cela rend la croissance de GaNAs (et d'autres nitrures dilués) de haute qualité structurale beaucoup plus difficile que celle des alliages III-V classiques [52]. De plus, il a été démontré que les matériaux à base de nitrure dilué sont métastables, avec une tendance à se séparer plutôt qu'à former un alliage homogène.

Pour surmonter ces défis, diverses approches ont été explorées, notamment l'incorporation de l'antimoine (Sb) dans l'alliage GaInNAs. Cela élargit la fenêtre de croissance vers une épitaxie bidimensionnelle tout en permettant d'incorporer des quantités plus élevées d'indium (In) et d'azote (N). Sous des conditions de croissance optimales, l'antimoine s'incorpore dans cet alliage à des niveaux de 5 à 8 %, bien au-delà du niveau d'incorporation de l'azote, ce qui est caractéristique des surfactants réactifs [53].

Les recombinaisons non radiatives provenant de défauts ponctuels constituent l'un des plus grands défis pour les nitrures dilués. Ces recombinaisons sont principalement dues à la faible température de croissance de MBE et à l'utilisation d'une source de plasma pour produire de l'azote atomique réactif [54]. Une partie de ces défauts peut être éliminée par un recuit post-croissance [55].

II.10 Conclusion

Ce chapitre a permis de dresser un état des lieux exhaustif des technologies et des défis associés aux cellules solaires tandem, en particulier celles à base de matériaux III-V et III-V-N. Nous avons exploré les limites des cellules solaires à jonction unique et les principes sous-jacents aux cellules multijonctions, avec une attention particulière portée aux mécanismes de tunneling et à l'impact des nitrures sur les performances des matériaux III-V/Si. Les différentes architectures des cellules multijonctions ont également été analysées, en mettant en évidence les défis liés à la croissance des matériaux III-V sur des substrats de silicium, ainsi que les solutions proposées pour surmonter ces obstacles.

Dans les deux chapitres suivants, les résultats des simulations mettront en lumière les performances des cellules à double jonction et des cellules à triple jonction, fournissant ainsi une évaluation comparative des technologies décrites et ouvrant de nouvelles perspectives pour l'amélioration des cellules solaires à jonction multiples.

Références

- [1] L. C. Hirst et N. J. Ekins-Daukes, « Fundamental losses in solar cells », *Prog. Photovolt. Res. Appl.*, vol. 19, n° 3, p. 286-293, mai 2011, doi: 10.1002/pip.1024.
- [2] K. Medjoubi, « Investigation of new solar cell technology III-V//Si behavior under irradiations for space applications », Thèse de doctorat, Institut Polytechnique de Paris, 2021, <https://theses.hal.science/tel-03220969>
- [3] A. Luque, « Handbook of photovoltaic science and engineering », 2nded. Chichester, West Sussex, U.K: Wiley, 2011.
- [4] C. Algara, « Handbook of concentrator photovoltaic technology. Chichester », West Sussex: Wiley, 2016.
- [5] S. Kasap et P. Capper, « Electronic and Photonic Materials», Springer Handbooks, 2017, doi: 10.1007/978-3-319-48933-9.
- [6] P. T. Chiu, D.C Law, R.L, et A. Zakaria, « 35.8% space and 38.8% terrestrial 5J direct bonded cells », IEEE 40th Photovoltaic Specialist Conference (PVSC), Denver, CO, USA: IEEE, juin 2014, p. 0011-0013. doi: 10.1109/PVSC.2014.6924957.
- [7] T. Takamoto, H. Washio, et H. Juso, « Application of InGaP/GaAs/InGaAs triple junction solar cells to space use and concentrator photovoltaic », in 2014 IEEE 40th Photovoltaic Specialist Conference (PVSC), Denver, CO, USA: IEEE, juin 2014, p. 0001-0005. doi: 10.1109/PVSC.2014.6924936.
- [8] K. Sasaki, T. Agui, K. Nakaido, N. Takahashi, R. Onitsuka, et T. Takamoto, « Development of InGaP/GaAs/InGaAs inverted triple junction concentrator solar cells », présenté à 9TH International Conference on Concentrator Photovoltaic Systems: CPV-9, Miyazaki, Japan, 2013, p. 22-25. doi: 10.1063/1.4822190.
- [9] B. M. Kayes, L. Zhang, R. Twist, I.-K. Ding, et G. S. Higashi, « Flexible Thin-Film Tandem Solar Cells With >30% Efficiency », *IEEE J. Photovolt.*, vol. 4, n° 2, p. 729-733, mars 2014, doi: 10.1109/JPHOTOV.2014.2299395.
- [10] T. J. Grassman, D. J. Chmielewski, S. D. Carnevale, J. A. Carlin, et S. A. Ringel, « GaAs_{0.75} P_{0.25} /Si Dual-Junction Solar Cells Grown by MBE and MOCVD », *IEEE J. Photovolt.*, vol. 6, n° 1, p. 326-331, janv. 2016, doi: 10.1109/JPHOTOV.2015.2493365.

- [11] M. Feifel, D. Lackner, J. Schön, J. Ohlmann, et J. Benick, « Epitaxial GaInP/GaAs/Si Triple-Junction Solar Cell with 25.9% AM1.5g Efficiency Enabled by Transparent Metamorphic $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ Step-Graded Buffer Structures », Sol. RRL, vol. 5, n° 5, p. 2000763, mai 2021, doi: 10.1002/solr.202000763.
- [12] P. Schygulla, J. Werner, B.A. Kamino, M. Bräuninger, et R. Monnard, « Wafer-bonded two-terminal III-V//Si triple-junction solar cell with power conversion efficiency of 36.1% at AM1.5g », Prog. Photovolt. Res. Appl., vol. 33, n° 1, p. 100-108, janv. 2025, doi: 10.1002/pip.3769.
- [13] Y. Liu, M. Ahmadpour, J. Adam, J. Kjelstrup-Hansen, H.-G. Rubahn, et M. Madsen, « Modeling Multijunction Solar Cells by Nonlocal Tunneling and Subcell Analysis », IEEE J. Photovolt., vol. 8, n° 5, p. 1363-1369, sept. 2018, doi: 10.1109/JPHOTOV.2018.2851308.
- [14] SILVACO® (2016) ATLAS™ User's Manual. <https://dynamic.silvaco.com/dynamicweb/jsp/downloads/DownloadManualsAction.do?req=silentmanuals&nm=atlas>.
- [15] F. Sahli, J. Werner, B.A. Kamino, M. Bräuninger, et R. Monnard, « Fully textured monolithic perovskite/silicon tandem solar cells with 25.2% power conversion efficiency », Nat. Mater., vol. 17, n° 9, p. 820-826, sept. 2018, doi: 10.1038/s41563-018-0115-4.
- [16] T. Leijtens, K. A. Bush, R. Prasanna, et M. D. McGehee, « Opportunities and challenges for tandem solar cells using metal halide perovskite semiconductors », Nat. Energy, vol. 3, n° 10, p. 828-838, juill. 2018, doi: 10.1038/s41560-018-0190-4.
- [17] R. Cariou, J. Benick, F. Feldmann¹, O. Höhn, H. Hauser, et P. Beutel, « III-V-on-silicon solar cells reaching 33% photoconversion efficiency in two-terminal configuration », Nat. Energy, vol. 3, n° 4, p. 326-333, avr. 2018, doi: 10.1038/s41560-018-0125-0.
- [18] S. Essig, C. Allebé, T. Remo, J.F. Geisz, et M. A. Steiner, « Raising the one-sun conversion efficiency of III-V/Si solar cells to 32.8% for two junctions and 35.9% for three junctions », Nat. Energy, vol. 2, n° 9, p. 17144, août 2017, doi: 10.1038/nenergy.2017.144.
- [19] Juan. C. Jimeno, R. Gutierrez, V. Fano, A. Habiba, et C. Cañizo, « A 3 Terminal Parallel Connected Silicon Tandem Solar Cell », Energy Procedia, vol. 92, p. 644-651, août 2016, doi: 10.1016/j.egypro.2016.07.031.

- [20] S. Lu, T.N. D. Tibbits, M. Niemeyer, et F. Predan, « Room-temperature wafer-bonded four-junction solar cell and its electron irradiation study », in *Light, Energy and the Environment*, Boulder, Colorado: OSA, 2017, p. PW3A.1. doi: 10.1364/PV.2017.PW3A.1.
- [21] F. Dimroth, M. Grave, Paul Beutel, U. Fiedeler, et C. Karcher¹, « Wafer bonded four-junction GaInP/GaAs//GaInAsP/GaInAs concentrator solar cells with 44.7% efficiency », *Prog. Photovolt. Res. Appl.*, vol. 22, n° 3, p. 277-282, mars 2014, doi: 10.1002/pip.2475.
- [22] S. Van Riesen, M. Neubauer, A. Boos, M. M. Rico, et C. Gourdel « New module design with 4-junction solar cells for high efficiencies », présenté à 11TH International conference on concentrator photovoltaic systems: CPV-11, Aix-les-Bains, France, 2015, p. 100006. doi: 10.1063/1.4931553.
- [23] S. P. Philipps, A. W. Bett, K. Horowitz, et S. Kurtz, « Current Status of Concentrator Photovoltaic (CPV) Technology », NREL/TP--5J00-65130, 1351597, déc. 2015. doi: 10.2172/1351597.
- [24] M. Umeno, T. Kato, T. Egawa, T. Soga, et T. Jimbo, « High efficiency AlGaAs/Si tandem solar cell over 20% », *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, vol. 41-42, p. 395-403, juin 1996, doi: 10.1016/0927-0248(95)00123-9.
- [25] C.-S. Jiang, D. J. Friedman, J. F. Geisz, H. R. Moutinho, M. J. Romero, et M. M. Al-Jassim, « Distribution of built-in electrical potential in GaInP₂/GaAs tandem-junction solar cells », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 83, n° 8, p. 1572-1574, août 2003, doi: 10.1063/1.1602575.
- [26] K. A. Bertness, S. R. Kurtz, D. J. Friedman, A. E. Kibbler, C. Kramer, et J. M. Olson, « 29.5%-efficient GaInP/GaAs tandem solar cells », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 65, n° 8, p. 989-991, août 1994, doi: 10.1063/1.112171.
- [27] K. Preiser, « Photovoltaic Systems », *Handbook of Photovoltaic Science and Engineering*, 1^{re} éd, Éd., Wiley, 2003, p. 753-798. doi: 10.1002/0470014008.ch17.
- [28] S. Kurtz, D. Myers, W. E. McMahon, J. Geisz, et M. Steiner, « A comparison of theoretical efficiencies of multi-junction concentrator solar cells », *Prog. Photovolt. Res. Appl.*, vol. 16, n° 6, p. 537-546, sept. 2008, doi: 10.1002/pip.830.
- [29] S. Brückner, O. Supplie, E. Barrigón, J. Luczak, et P. Kleinschmidt « In situ control of As dimer orientation on Ge(100) surfaces », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 101, n° 12, p. 121602, sept. 2012, doi: 10.1063/1.4754122.

- [30] S. M. Ting et E. A. Fitzgerald, « Metal-organic chemical vapor deposition of single domain GaAs on Ge/Ge_xSi_{1-x}/Si and Ge substrates », J. Appl. Phys., vol. 87, n° 5, p. 2618-2628, mars 2000, doi: 10.1063/1.372227.
- [31] R. R. King, D. C. Law, K. M. Edmondson, C. M. Fetzer, et G. S. Kinsey, « 40% efficient metamorphic GaInP/GaInAs/Ge multijunction solar cells », Appl. Phys. Lett., vol. 90, n° 18, p. 183516, avr. 2007, doi: 10.1063/1.2734507.
- [32] D. C. Law, R.R. King, H. Yoon, et M.J. Archer, « Future technology pathways of terrestrial III-V multijunction solar cells for concentrator photovoltaic systems », Sol. Energy Mater. Sol. Cells, vol. 94, n° 8, p. 1314-1318, août 2010, doi: 10.1016/j.solmat.2008.07.014.
- [33] W. Guter, J. Schöne, et S.P. Philipps, « Current-matched triple-junction solar cell reaching 41.1% conversion efficiency under concentrated sunlight », Appl. Phys. Lett., vol. 94, n° 22, p. 223504, juin 2009, doi: 10.1063/1.3148341.
- [34] J. F. Geisz, D. J. Friedman, J. S. Ward, A. Duda, et W. J. Olavarria, « 40.8% efficient inverted triple-junction solar cell with two independently metamorphic junctions », Appl. Phys. Lett., vol. 93, n° 12, p. 123505, sept. 2008, doi: 10.1063/1.2988497.
- [35] M. Stan, D. Aiken, B. Cho, et A. Cornfeld, « High-efficiency quadruple junction solar cells using OMVPE with inverted metamorphic device structures », J. Cryst. Growth, vol. 312, n° 8, p. 1370-1374, avr. 2010, doi: 10.1016/j.jcrysgro.2009.10.059.
- [36] H. Moriceau, F. Rieutord, F. Fournel, Y. Tiec, et L. Cioccio1, « Overview of recent direct wafer bonding advances and applications », Adv. Nat. Sci. Nanosci. Nanotechnol., vol. 1, n° 4, p. 043004, févr. 2011, doi: 10.1088/2043-6262/1/4/043004.
- [37] M. Amadeo, « III-V / Silicon tandem solar cell grown with molecular beam epitaxy », thèse de doctorat, Université de Sorbonne, 2019, <https://theses.hal.science/tel-02985382>.
- [38] S. M. Vernon, S. P. Tobin, V. E. Haven, L. M. Geoffroy, et M. M. Sanfacon, « High-efficiency concentrator cells from GaAs on Si », in The Conference Record of the Twenty-Second IEEE Photovoltaic Specialists Conference - 1991, Las Vegas, NV, USA: IEEE, 1991, p. 353-357. doi: 10.1109/PVSC.1991.169237.
- [39] C. L. Andre, J.A. Carlin, et J. J. Boeckl, « Investigations of High-Performance GaAs Solar Cells Grown on Ge-Si_{1-x} Ge_x-Si substrates », IEEE Trans. Electron Devices, vol. 52, n° 6, p. 1055-1060, juin 2005, doi: 10.1109/TED.2005.848117.

- [40] A. Onno, J. Wua, Q. Jianga, S. Chena, M. Tanga, « $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$ Solar Cells Monolithically Grown on Si and GaAs by MBE for III-V/Si Tandem Dual-junction Applications », *Energy Procedia*, vol. 92, p. 661-668, août 2016, doi: 10.1016/j.egypro.2016.07.037.
- [41] I. Aberg, G. Vescovi, D. Asoli, et U. Naseem, « A GaAs Nanowire Array Solar Cell With 15.3% Efficiency at 1 Sun », *IEEE J. Photovolt.*, vol. 6, n° 1, p. 185-190, janv. 2016, doi: 10.1109/JPHOTOV.2015.2484967.
- [42] G. Hamon, N. Vaissiere, R. Cariou, et R. Lachaume, « Plasma-enhanced chemical vapor deposition epitaxy of Si on GaAs for tunnel junction applications in tandem solar cells », *J. Photonics Energy*, vol. 7, n° 2, p. 022504, avr. 2017, doi: 10.1117/1.JPE.7.022504.
- [43] K. Derendorf, S. Essig, E. Oliva, V. Klinger, T. Roesener, et S. P. Philipps, « Fabrication of GaInP/GaAs//Si Solar Cells by Surface Activated Direct Wafer Bonding », *IEEE J. Photovolt.*, vol. 3, n° 4, p. 1423-1428, oct. 2013, doi: 10.1109/JPHOTOV.2013.2273097.
- [44] M. M. R. Howlader, P. R. Selvaganapathy, M. J. Deen, et T. Suga, « Nanobonding Technology Toward Electronic, Fluidic, and Photonic Systems Integration », *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.*, vol. 17, n° 3, p. 689-703, mai 2011, doi: 10.1109/JSTQE.2010.2080261.
- [45] W. G. Bi, C. W. Tu, D. Mathes, et R. Hull, « A Study of Mixed Group-V Nitrides Grown by Gas-Source Molecular Beam Epitaxy Using a Nitrogen Radical Beam Source », *MRS Proc.*, vol. 449, p. 203, 1996, doi: 10.1557/PROC-449-203.
- [46] M. Kondow, K. Uomi, T. Kitatani, S. Watahiki, et Y. Yazawa, « Extremely large N content (up to 10%) in GaNAs grown by gas-source molecular beam epitaxy », *J. Cryst. Growth*, vol. 164, n° 1-4, p. 175-179, juill. 1996, doi: 10.1016/0022-0248(96)00008-5.
- [47] S.-H. Wei et A. Zunger, « Giant and Composition-Dependent Optical Bowing Coefficient in GaAsN Alloys », *Phys. Rev. Lett.*, vol. 76, n° 4, p. 664-667, janv. 1996, doi: 10.1103/PhysRevLett.76.664.
- [48] N. Shinkov, P. Desjardins, et R. A. Masut, « Empirical tight-binding model for the electronic structure of dilute GaNAs alloys », *Phys. Rev. B*, vol. 67, n° 8, p. 081202, févr. 2003, doi: 10.1103/PhysRevB.67.081202.

- [49] James S. Harris Jr., R. Kudrawiec, et H. B. Yuen, S. R. Bank, « Development of GaInNAsSb alloys: Growth, band structure, optical properties and applications », *Phys. Status Solidi B*, vol. 244, n° 8, p. 2707-2729, août 2007, doi: 10.1002/pssb.200675620.
- [50] W. M. Chen, I. A. Buyanova, C. W. Tu, et H. Yonezu, « Point defects in dilute nitride III-N-As and III-N-P », *Phys. B Condens. Matter*, vol. 376-377, p. 545-551, avr. 2006, doi: 10.1016/j.physb.2005.12.138.
- [51] A. Aho, « High Current Generation in Dilute Nitride Solar Cells Grown by Molecular Beam Epitaxy » *Optical Engineering*, p. 8620, 2013.
- [52] A. Erol, Éd., « Dilute III-V Nitride Semiconductors and Material Systems », vol. 105. in *Materials Science*, vol. 105. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2008. doi: 10.1007/978-3-540-74529-7.
- [53] E. Tournié, N. Grandjean, A. Trampert, J. Massies, et K. H. Ploog, « Surfactant-mediated molecular-beam epitaxy of III-V strained-layer heterostructures », *J. Cryst. Growth*, vol. 150, p. 460-466, mai 1995, doi: 10.1016/0022-0248(95)80254-A.
- [54] A. J. Ptak, S. Kurtz, M. H. Weber, et K. G. Lynn, « Positron annihilation study of vacancies in GaInNAs », *J. Vac. Sci. Technol. B Microelectron. Nanometer Struct. Process. Meas. Phenom.*, vol. 22, n° 3, p. 1584-1587, mai 2004, doi: 10.1116/1.1752914.
- [55] X. Z. Chen, D. H. Zhang, Y. J. Jin, J. H. Li, J. H. Teng, et N. Yakovlev, « Effect of rapid thermal annealing on behavior of nitrogen in GaAsN alloys », *J. Cryst. Growth*, vol. 362, p. 197-201, janv. 2013, doi: 10.1016/j.jcrysgro.2012.03.059.

Chapitre III

Résultats de simulations des cellules 2J III- V-N/Si

III.1 Introduction

Dans le cadre de notre étude, nous avons sélectionné les cellules tandem à base de couches minces III-V-N-Si qui incarnent une synergie entre la deuxième et la troisième génération des cellules solaires. Afin de structurer nos résultats de recherche, nous avons subdivisé notre travail en deux chapitres distincts. Le troisième chapitre sera consacré à l'examen approfondi des cellules tandem 2J, tandis que le dernier chapitre se penchera sur l'étude des cellules tandem 3J.

Les cellules solaires à double jonction sont un type de cellule solaire qui utilise deux jonctions PN ou NP ayant des bandes interdites différentes pour absorber la lumière sur une plus large gamme de longueurs d'onde. Elles sont utilisées dans des applications spatiales en raison de leur coût élevé et de leur capacité à fonctionner dans des conditions difficiles. Cette conception permet d'obtenir un meilleur rendement énergétique par rapport aux cellules solaires conventionnelles.

Dans notre cas, la sous cellule supérieure est fabriquée à partir de matériaux III-V-(N) (sans et avec N), tandis que la sous cellule inférieure est constituée d'une combinaison de deux technologies hybrides. Une couche est fabriquée à partir de matériaux III-V à base de GaAs qui est connue pour sa grande flexibilité, sa haute stabilité et sa densité de puissance élevée par unité de surface [1-5], alors que l'autre couche est fabriquée à partir de Si, qui représente le matériau le plus couramment utilisé dans l'industrie photovoltaïque en raison de son coût faible et de sa maturité technologique.

Dans le contexte de notre recherche, nous allons entreprendre des simulations numériques visant à optimiser les performances de ces cellules solaires, explorant ainsi deux configurations distinctes.

La première section de ce chapitre examine les cellules $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x/\text{GaAs:Si}$, explorant divers paramètres tels que l'éclairement, la fraction de phosphore et la température.

La seconde partie se penche sur une nouvelle configuration, GaAsPN/GaAs:Si , où des simulations numériques ont été utilisées pour optimiser les performances en fonction de la composition de l'azote. Ces travaux ont été réalisés à l'aide du logiciel Atlas Silvaco.

III.2 Aperçu sur le logiciel Atlas Silvaco

Dans ce travail, nous utilisons Silvaco Atlas pour modéliser des cellules solaires et calculer les divers paramètres permettant de déterminer leur efficacité. Silvaco Atlas propose une gamme d'outils performants pour les logiciels TCAD et EDA, qui sont utilisés dans divers domaines, tels que la conception assistée par ordinateur (CAD) pour les circuits numériques et personnalisés, ainsi que la modélisation des interconnexions. Dans le cadre de notre étude, Silvaco a été largement utilisé pour exécuter le code de simulation.

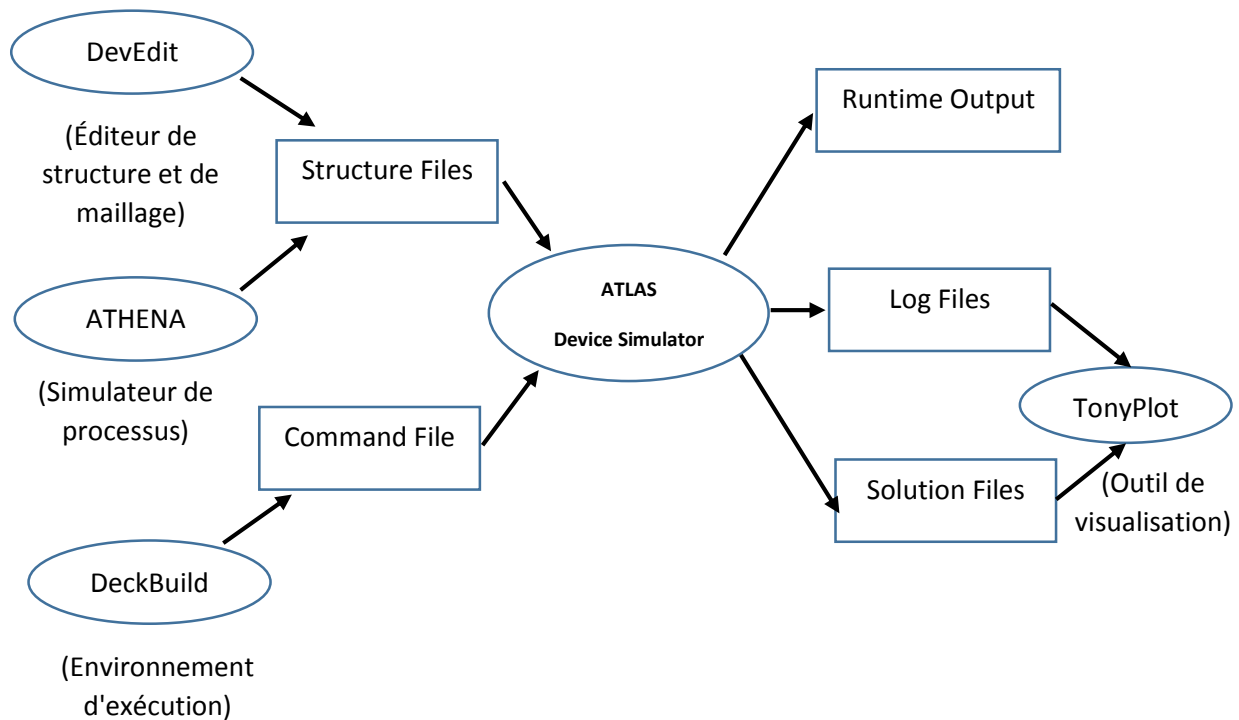


Figure (III.1) ; Entrées et sortie fournis par Atlas.

Nous y modélisons une cellule solaire à double jonction en entrant les paramètres nécessaires afin d'optimiser et maximiser l'efficacité de conversion. Ce logiciel nous permet ainsi de simuler et d'analyser le comportement des cellules solaires sous différentes conditions. Les simulations, ainsi que les courbes résultantes, ont été visualisées à l'aide de TonyPlot, un outil graphique intégré à Silvaco Atlas. Ce dernier permet de visualiser les résultats des simulations de manière claire et détaillée. En outre, des fichiers journaux de sortie ont été générés pour consigner les résultats et faciliter l'analyse. La figure (III.1) illustre les différentes entrées et sorties fournies par Atlas, permettant de mieux comprendre le processus de simulation, des paramètres initiaux à l'analyse des performances des cellules solaires.

Lors de la rédaction d'un code dans Atlas Silvaco, il est essentiel de suivre une série d'étapes méthodiques. La figure (III.2) offre un aperçu détaillé de ce processus. Initialement, la structure du dispositif est construite en définissant toutes les limites spatiales et les points clés de la géométrie, ainsi qu'en spécifiant les électrodes et les concentrations de dopage correspondantes. L'étape suivante implique la spécification des modèles nécessaires pour la simulation. Dans cette phase, on définit les paramètres matériels du matériau, ainsi que les modèles physiques tels que les mécanismes de recombinaison, les effets de tunneling, les interfaces et les caractéristiques des contacts.

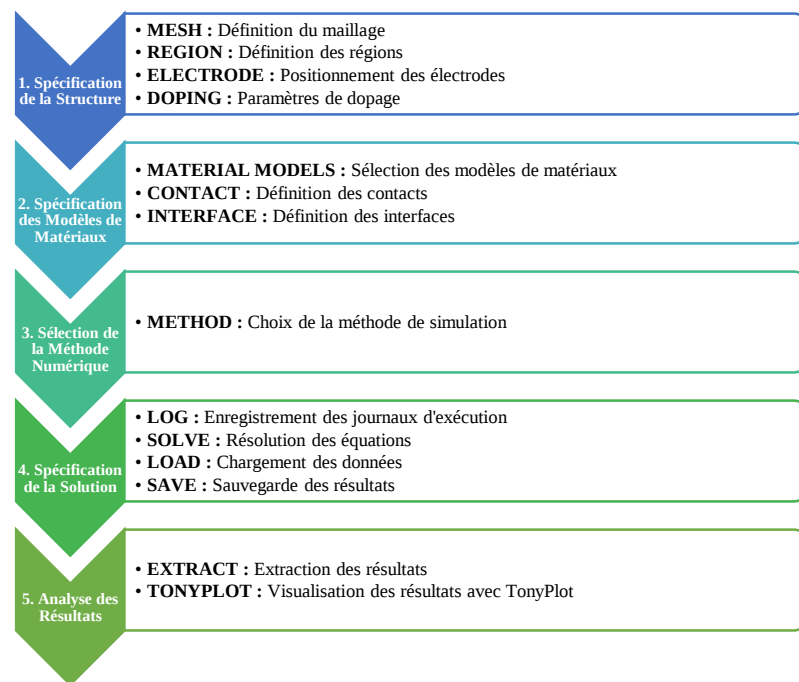


Figure (III.2) ; Une aperçue sur les étapes à suivre lors de la rédaction d'un code dans Atlas Silvaco.

La sélection de la méthode numérique dans Silvaco Atlas se divise en trois catégories :

- **Méthode découplée (GUMMEL)** : Cette méthode résout chaque variable individuellement tout en maintenant les autres constantes, ce qui permet de simplifier les calculs ;
- **Méthode entièrement couplée (NEWTON)** : Ici, toutes les inconnues sont résolues simultanément, offrant une approche plus complète et précise ;
- **Méthode BLOC (BLOCK)** : Cette approche combine les méthodes GUMMEL et NEWTON pour offrir un compromis entre simplicité et précision dans la résolution.

La dernière étape c'est la spécification de la solution qui est divisée en cinq commandes (voir tableau III.1).

Tableau (III.1) : Commandes utilisées pour la spécification de la solution dans Atlas Silvaco [6, 7].

Commande	Fonction
LOG	Enregistrer toutes les caractéristiques dans un fichier.
SOLVE	Générer les données AC, DC ou transitoires.
LOAD	Entrer la solution des fichiers précédents
SAVE	Enregistrer toutes ces informations dans le fichier de sortie
TonyPlot	Analyser les résultats qui en découle et extraire les paramètres du dispositif ainsi visualiser les courbes.

III.3 Optimisation des cellules solaire 2J GaAs_{1-x}P_x /GaAs : Si

La structure tandem que nous envisageons de simuler s'inspire du travail de Abdul Hadi et al [8]. La figure (III.3) présente une schématisation simplifiée de cette cellule solaire, qui se compose d'une cellule supérieure en GaAs_{1-x}P_x et d'une cellule inférieure en hétérostructure de GaAs et Si. Ces deux jonctions sont connectées en série à l'aide d'une jonction tunnel.

Ag
GaAs _{1-x} P _x (n) $N_D = 5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ (0.05μm)
GaAs _{1-x} P _x (p) $N_A = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ (0.15- 1μm)
GaAs (p) $N_A = 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ (0.01μm)
Si (n) $N_D = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ (0.01μm)
GaAs (n) $N_D = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ (0.1μm)
Si (p) $N_A = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ (100μm)

Figure (III.3) ; Structure de la cellule tandem à base de matériau III-V-Si [8].

Il est essentiel de souligner que notre proposition inclut deux modifications significatives : l'utilisation de sous cellule supérieur GaAs dans la jonction inférieure au lieu de Si et l'optimisation d'une nouvelle jonction tunnel. La composition en phosphore (x) peut être ajustée pour moduler la bande interdite de $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x$ variant ainsi de 1,42 eV ($x=0$) à plus de 2 eV (lorsque $x > 0,45$) [9]. Les détails exhaustifs des couches, incluant le dopage, les épaisseurs, sont fournis dans la figure (III.3).

III.3.1 Justification du choix des matériaux

L'intégration épitaxie d'une cellule solaire 2J à partir des matériaux III-V/Si offre la possibilité d'utiliser une sous-cellule en Silicium à faible coût comme substrat tout en ajoutant une ou plusieurs cellules supérieures en III-V via une croissance métamorphique. Cependant, cette approche a historiquement souffert d'une faible efficacité des sous-cellules III-V. En particulier, la formation de densités élevées de dislocations (TDD) due au grand désaccord de maille (environ 3,1% pour le $\text{GaAs}_{0.75}\text{P}_{0.25}$ et 4% pour le GaAs) conduit à une forte recombinaison non radiative dans les couches absorbantes III-V cultivées sur Si. Cela entraîne des réductions de la densité de courant J_{cc} [10]. Jusqu'à 2018, les meilleures performances des cellules tandem, GaAsP/Si à 2 jonctions et $\text{Ga}_{0.51}\text{In}_{0.49}\text{P}/\text{GaAs}/\text{Si}$ à 3 jonctions étaient respectivement de 13,2% et 19,7% [11, 12].

De plus, le désaccord des coefficients de dilatation thermique (CTE) entre le Si ($\text{CTE}_{\text{Si}} = 2,6 \times 10^{-6} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$) et le GaAsP ($\text{CTE}_{\text{GaP}} = 4,7 \times 10^{-6} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$, $\text{CTE}_{\text{GaAs}} = 5,7 \times 10^{-6} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$) peut limiter l'épaisseur totale de la région active qui peut résister à la fissuration dues à la variation de température (ΔT). Par exemple, l'épaisseur critique pour l'apparition de fissures a été rapportée expérimentalement à 6,8 μm et 5,4 μm théoriquement pour la structure GaAs/Si avec $\Delta T = 575 \text{ }^\circ\text{C}$ [13, 14]. Pour cela, Shizhao Fana et *al* ont constaté que les cellules solaires GaAsP cultivées sur Si ne se fissurent pas, à condition que l'épaisseur totale de la couche III-V soit maintenue inférieure ou égale à 6 μm (taux de dégradation $\geq 0,56\%$ de désaccord par μm). Sachant que, des taux de dégradation plus faibles conduisent généralement à une densité TDD plus faible [15].

Le choix de GaAsP, GaAs et Si comme matériaux qui constituent notre cellule solaire tandem présentent plusieurs avantages motivants, notamment :

- **Optimisation du spectre solaire :** La sous cellules supérieurs à base de GaAsP, avec sa bande interdite ajustable autour de 1,7 eV, absorbe efficacement la lumière à haute énergie.

Tandis que la sous cellule inférieure à base de GaAs/Si, avec ses bandes interdites relativement faibles (1,42 eV pour GaAs, 1,1 eV pour Si), capte les photons à plus basse énergie [16]. Cette combinaison permet une utilisation optimale du spectre solaire, maximisant l'efficacité de conversion globale.

- **Réduction des pertes par thermalisation** : La structure tandem GaAsP/GaAs:Si minimise les pertes par thermalisation (conversion des photons en chaleur), un facteur crucial pour l'efficacité globale de la cellule [17].
- **Gestion des contraintes et réduction des dislocations** : Le GaAsP est relativement compatible avec le GaAs en termes de réseau cristallin, ce qui minimise les dislocations lors de la croissance épitaxiale [18]. L'utilisation de GaAs comme couche intermédiaire aide à gérer la transition entre le GaAsP et le Si, réduisant les défauts structuraux qui pourraient limiter l'efficacité de la cellule.
- **Robustesse mécanique et thermique** : Le silicium, utilisé dans la cellule inférieure, offre une bonne robustesse mécanique et conductivité thermique, avantageuses pour les applications terrestres soumises à des courants élevés et des flux de chaleur importants [19].
- **Réduction des coûts et économies d'échelle** : L'utilisation du silicium comme substrat réduit considérablement le coût global par rapport aux substrats en Ge ou GaAs. De plus, la disponibilité de wafers de silicium de grande taille (jusqu'à 450 mm) offre des économies d'échelle importantes [19, 20].
- **Flexibilité de conception** : Cette configuration permet d'ajuster les compositions et les épaisseurs des différentes couches pour optimiser les performances [10].

III.3.2 Effets de la concentration de Phosphore P

L'étude de l'effet de la variation de la fraction de phosphore (P) sur les performances de la cellule tandem proposée est un élément essentiel pour l'optimisation et le développement de cette technologie prometteuse. Les résultats illustrés dans les figures (III.4) et (III.5) montrent une tendance marquée en fonction de la composition en phosphore (x). L'augmentation de la concentration de phosphore conduit à un élargissement de la bande interdite, ce qui favorise l'absorption des photons de haute énergie, en particulier ceux associés aux longueurs d'onde plus courtes. Cet élargissement améliore également la séparation des charges photogénérées, contribuant ainsi à une augmentation de la tension V_{co} . Notamment, un V_{co} de 1,27 V a ainsi été mesuré lorsque la concentration en phosphore atteignait 47 %.

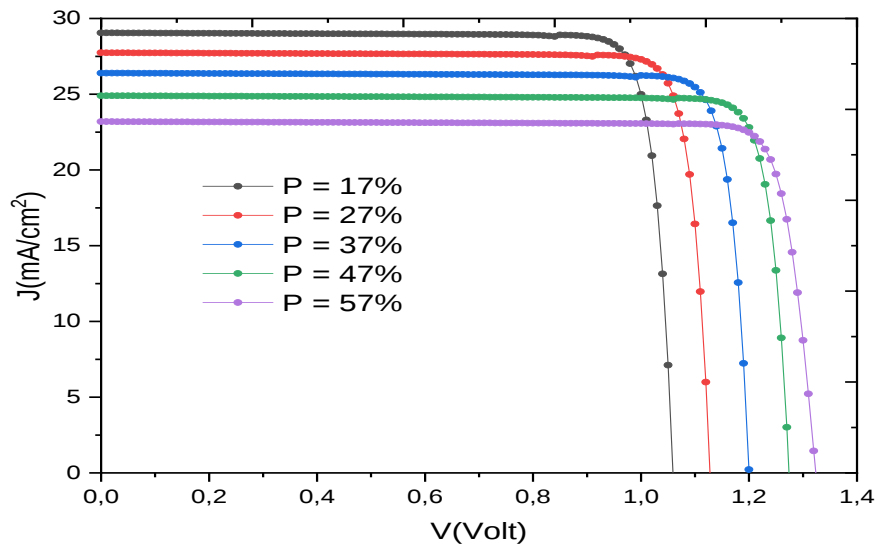


Figure (III.4) : Caractéristiques J-V en fonction de de la variation de phosphore.

Cependant, cet effet s'accompagne d'une diminution du courant J_{cc} , phénomène qui est en accord avec les observations de K.N. Yaung [10]. Celui-ci a mis en évidence que la formation de TDD, causée par un important désaccord de maille, induit une forte recombinaison non radiative dans les couches absorbantes GaAsP déposées sur du silicium. Cette recombinaison excessive entraîne une réduction de la densité de courant J_{cc} . Notamment, un J_{cc} élevé de 29,05 mA/cm² a été obtenu lorsque la teneur en phosphore était de 17 %. Cela souligne que, bien que l'augmentation de la composition en phosphore améliore le V_{co} , elle peut également compromettre la collecte des charges en raison de la recombinaison, ce qui affecte négativement le J_{cc} .

Le rendement et le FF ont le même comportement contribuant des augmentations jusqu'à $x=47\%$ suivi par des diminutions. L'augmentation initiale du rendement et du FF peut être attribuée à l'optimisation des propriétés électriques de la cellule solaire. Cette réduction observée pour des valeurs de P plus élevées peut être attribuée à des effets négatifs, tels qu'une absorption excessive des photons de faible énergie ou une recombinaison accrue des porteurs de charge. Un rendement de 28,20 % et un facteur de forme très élevé de 88,89 % ont été obtenus lorsque P était de 47 %. En conclusion, il apparaît que la composition optimale en phosphore pour cette cellule tandem est de $x = 47\%$, ce qui suggère que cette composition spécifique offre un équilibre optimal entre les différents paramètres de performance.

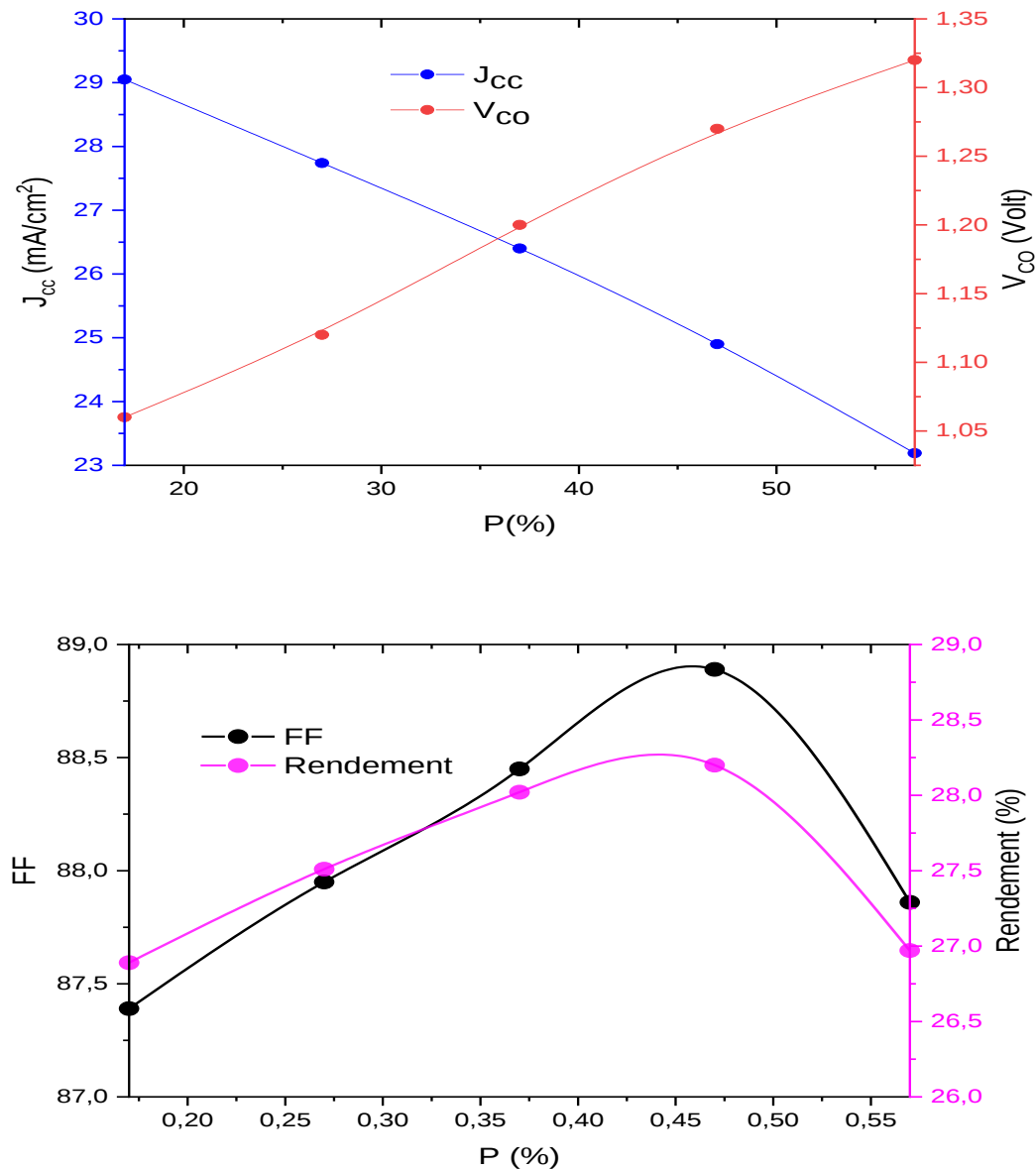


Figure (III.5) : Paramètres caractéristiques de cellule 2J en fonction de la concentration de P.

III.3.3 Effets de l'éclairement

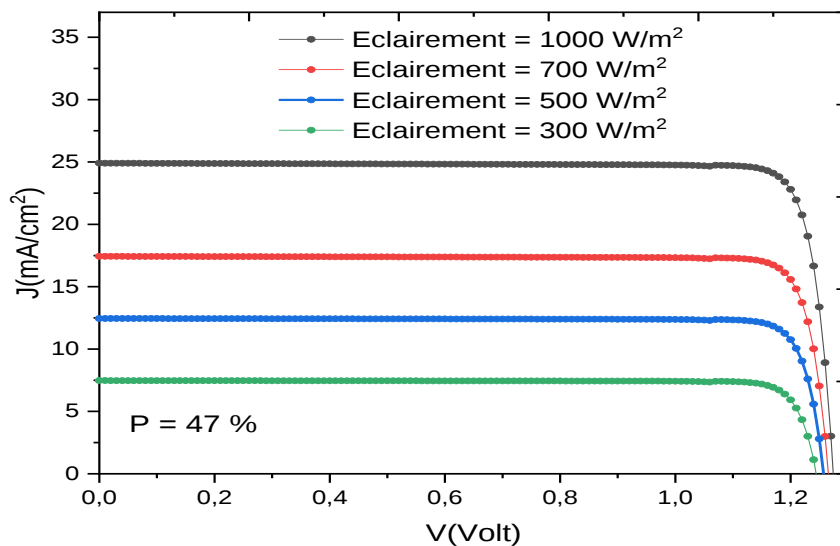
L'effet de l'éclairement sur cette cellule solaire peut être analysé en examinant comment la lumière incidente influence la génération et la séparation des paires électron-trou dans les deux jonctions, comme le montre le tableau (III.2). L'étude de la courbe J-V sous différentes intensités lumineuses, illustrée dans la figure (III.6), permet de mieux comprendre l'impact de l'intensité lumineuse sur le courant et la tension photovoltaïques.

Tableau (III.2) : Variation de rendement et FF en fonction de l'éclairement.

Intensité lumineuse (W/m^2)	1000	700	500	300
FF	88.89	88.99	89.02	89.05
Rendement (%)	28.20	19.63	13.94	8.28

L'augmentation de l'intensité lumineuse engendre une production accrue de paires électron-trou, ce qui se traduit par une augmentation proportionnelle du courant J_{cc} et du rendement de la cellule. Notamment, un rendement de 28,20 % et un courant J_{cc} élevé de 24,9 mA/cm^2 ont été obtenus pour un éclairement de 1000 W/m^2 . La tension V_{co} augmente légèrement avec l'augmentation de l'intensité lumineuse.

Par ailleurs, une légère variation du facteur de forme (FF) est observée, principalement. Il est également notable que, même pour un éclairement faible de l'ordre de 300 W/m^2 , les performances de la cellule seront acceptables, ce qui peut être attribué à sa capacité à absorber des photons d'énergie plus faible. Ainsi, on peut conclure que cette cellule solaire à double jonction est capable de fonctionner de manière efficace, quelles que soient les conditions de luminosité.

**Figure (III.6) :** Caractéristiques J-V en fonction de l'éclairement.

III.3.4 Effets de la température

La température influence significativement les performances d'une cellule solaire. L'analyse des résultats présentés dans la figure (III.7) et le tableau (III.3) révèle que l'augmentation de la température provoque une légère baisse du courant J_{cc} ($0.04 \text{ mA/cm}^2/\text{K}$) et un changement plus marqué de la tension V_{co} (environ 0.3 mV/K), réduisant ainsi l'efficacité globale. Ces observations concordent avec les travaux de Landis et *al* [21].

Tableau (III.3) : L'évolution de rendement et FF en fonction de température.

Temperature (K)	123	173	230	298	450
FF	88.6	90.23	88.92	88.95	82.86
Rendement (%)	35.37	31.53	29.82	28.30	20.37

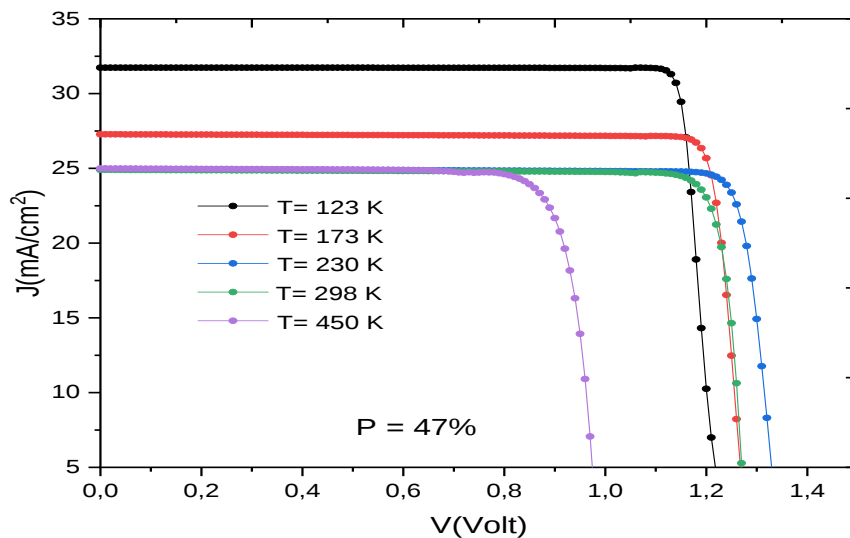


Figure (III.7) : Caractéristiques J-V en fonction de la température.

L'élévation de température réduit l'énergie de la bande interdite, favorisant la recombinaison entre bandes de conduction et de valence. Bien que cela génère davantage d'électrons libres dans la bande de conduction, l'instabilité de la bande interdite à haute température facilite la recombinaison des porteurs de charge lors de leur transport.

La sensibilité thermique d'une cellule solaire s'explique principalement par les variations de V_{co} , résultant du déséquilibre entre la photogénération et les recombinaisons (directe, indirecte et Auger) des porteurs [22, 23]. La diminution de la bande interdite avec la température constitue le facteur principal du changement de V_{co} , conduisant in à une baisse du rendement de la cellule.

III.3.5 Effets de la jonction tunnel (TJ)

Dans une cellule solaire tandem, la connexion électrique entre deux cellules est généralement réalisée en utilisant une structure à deux terminaux. Cette structure intègre une jonction tunnel ou une diode Esaki entre les deux cellules. La diode Esaki, introduite en 1958, est spécifiquement conçue pour offrir une faible résistance en raison de son dopage élevé (environ $1,10^{19} \text{ cm}^{-3}$) et une bonne transparence optique grâce à son épaisseur relativement faible (environ 50 nm). La diode Esaki est un dispositif semi-conducteur qui présente une région de résistance différentielle négative dans sa caractéristique courant-tension. Cette caractéristique unique permet une excellente transition des électrons à travers la jonction. Dans le contexte d'une cellule solaire multi-jonctions, la diode Esaki sert comme une jonction tunnel qui permet de connecter les différentes jonctions [24].

L'analyse des résultats présentés dans le tableau (III.4) compare les performances de notre cellule tandem 2J en fonction de différentes jonctions tunnel. Parmi les quatre configurations de TJ testées, avec une fraction optimale au phosphore de 47%, la structure GaAs(p+)/Si(n+) se distingue particulièrement. Cette configuration démontre une supériorité en termes de performances, optimisant simultanément le rendement et le facteur de forme de la cellule.

Tableau (III.4) : L'évolution de rendement et FF en fonction de différentes jonctions TJ.

Tunnel junction	GaAs/ GaAs	Si/Si	Si/GaAs	GaAs/Si
FF	83.12	74.85	72.87	88.89
Rendement (%)	18.50	14.61	13.9	28.20

III.3.6 Comparaison entre J-V de cellule 2J et ses deux cellules individuelles

La figure (III.8) compare les courbes courant-tension de notre cellule solaire 2J avec celles de ses deux composants : la sous-cellule en $\text{GaAs}_{0.53}\text{P}_{0.47}$ et l'autre sous cellule hétérojonction GaAs:Si. Cette visualisation nous permet de comprendre comment chaque sous-cellule influence les performances de l'ensemble, et d'identifier où se situent les principaux points de limitation dans le dispositif.

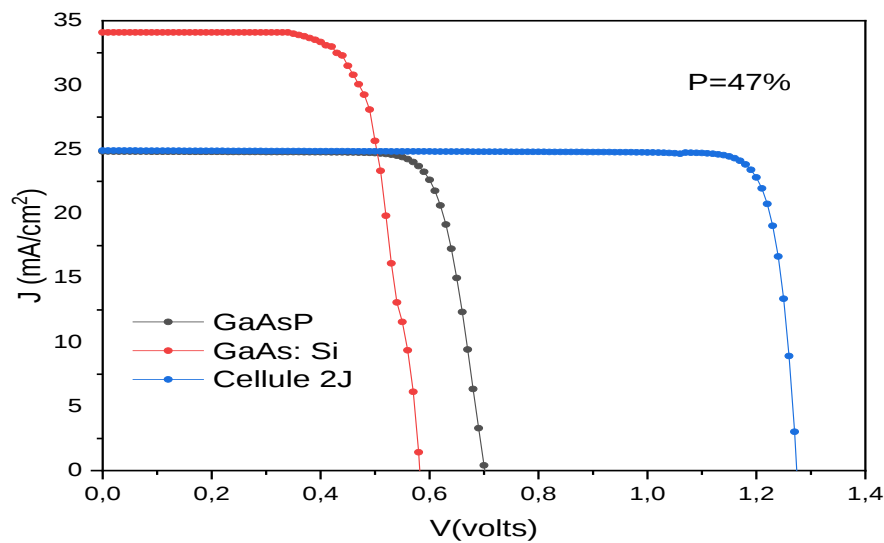


Figure (III.8) : Comparaison entre J-V de la cellule 2J et ses deux solaires individuelles.

Notre cellule solaire 2J présente une particularité importante : son courant total est déterminé par sa sous-cellule la plus faible. Dans ce cas, la densité de courant maximale est de 24,86 mA/cm². C'est une contrainte inhérente à la configuration en série des cellules tandem, où le courant ne peut dépasser celui du composant le plus limitant. En revanche, la tension V_{co} de 1,28 V représente un avantage majeur de cette architecture. Cette tension résulte de l'addition des tensions individuelles des deux sous-cellules connectées en série. Cette caractéristique démontre l'intérêt principal des cellules tandem qui se traduit par leur capacité à produire des tensions plus élevées.

III.4 Optimisation de la cellule tandem III-V-N-Si

III.4.1 Pour quoi les matériaux III-V-N

Bien que les matériaux III-V offrent des avantages significatifs en termes d'une efficacité élevée et des propriétés électriques acceptables, comme on a dit précédemment, leur intégration sur silicium est entravée par des problèmes de compatibilité de réseau et de performance, nécessitant des approches techniques ciblées pour surmonter ces obstacles.

Certains matériaux III-V, comme le GaP présentent une constante de réseau très proche de celle du silicium (écart de 0,37 % à 300 K) [24]. Cependant, son gap indirect, qui est relativement large (2,26 eV), limite son utilité dans des applications nécessitant un absorbeur efficace en couche mince. Les matériaux à gap indirect ne sont généralement pas efficaces pour les dispositifs optoélectroniques, car ils ne favorisent pas les transitions électroniques nécessaires à l'absorption de la lumière.

D'autre part, bien que d'autres types de matériaux aient des gaps directs, ses constantes de réseaux plus éloignées de celle du silicium (environ 3,1% pour le $\text{GaAs}_{0.75}\text{P}_{0.25}$ et 4% pour le GaAs) entraînent des problèmes fondamentaux lors de la croissance, notamment des défauts de réseau et des dislocations, qui peuvent dégrader les performances des dispositifs [10-15].

Ces deux défis illustrent les compromis nécessaires pour optimiser l'intégration des matériaux III-V sur le silicium. Pour combiner une bonne compatibilité de paramètre de maille avec celle du silicium, et chercher des matériaux qui présentent un gap quasi-direct et qui est relativement large, une solution potentielle consiste à l'utilisation des alliages III-V-N en tant que sous cellule supérieur [25]. Les alliages quaternaires III-V-N, tels que GaAsPN, présentent une large plage de bande interdite réglable, couvrant de 1,5 à 2,0 eV, ce qui représente un bon accord avec les calculs théoriques qui estiment, que pour atteindre une efficacité de conversion plus élevée avec des cellules solaires 2J avec une cellule inférieure en silicium, il faut sélectionner des sous-cellules supérieures ayant une énergie de bande interdite entre 1,5 et 2,0 eV. En d'autres termes, les efficacités maximales nécessitent des profils de bande interdite d'environ 1,7/1,1 eV pour les cellules à double jonction [26, 27].

III.4.2 Pour quoi le choix de GaAsPN

Pour notre étude, le choix s'est porté sur le GaAsPN en tant que matériau représentatif de la catégorie des III-V-N. Cette sélection spécifique s'inscrit dans le cadre de notre démarche visant à explorer les propriétés et les potentialités des alliages quaternaires III-V à base de nitrures. Le $\text{GaAs}_{1-x-y}\text{P}_x\text{N}_y$ est un alliage quaternaire intéressant pour les cellules solaires à haute efficacité en raison de ses propriétés ajustables et potentiellement améliorées [24]. Il s'agit d'un alliage de quatre éléments : Gallium (Ga), Arsenic (As), Phosphore (P) et Azote (N). Les indices x et y représentent les fractions molaires de phosphore et d'azote, respectivement, allant de 0 à 1.

L'alliage GaAsPN peut théoriquement être cultivé sur des substrats en silicium sans problèmes structurales lors de la croissance, et qu'il présente également une bande interdite qui est quasi-directe avec un grand intervalle de ses compositions. Ces matériaux sont très adaptés en tant que sous-cellules supérieures, ce qui donnent des cellules solaires multi-jonctions efficaces et économiques [26-28]. Cependant, les recherches sur les alliages III-V-N, y compris ceux à base de GaAs et de GaP, se sont principalement concentrées sur des compositions en N inférieures à 3 %, en raison d'une dégradation de la cristallinité à mesure que la composition en N augmente.

Les principaux défauts ponctuels, tels que les interstitiels N-As et N-N et les clusters de N, causent une dégradation des propriétés optiques et électriques. Lorsque la composition en N augmente dans ces alliages, le désaccord de maille augmente, ce qui génère des dislocations et/ou des fissures. En raison de ces facteurs complexes, les effets de la composition en N sur les propriétés optoélectroniques et les modes de croissance des alliages III-V-N restent peu clairs, notamment pour des compositions en N supérieures à 3 % [28].

III.4.3 Modèle théorique

La structure cristalline du composé $\text{GaAs}_{1-x-y}\text{P}_x\text{N}_y$ conserve généralement la même structure cubique de type zincblende que celle du GaAs. En ajustant les fractions atomiques de phosphore (P) et d'azote (N), il est possible de modifier les propriétés électroniques et optiques de ce matériau, notamment son gap d'énergie (voir l'équation III.1).

$$E_g(\text{GaAs}_{1-x-y}\text{P}_x\text{N}_y) = xE_g(\text{GaP}) + yE_g(\text{GaN}) + (1-x-y)E_g(\text{GaAs}) - x(1-x-y)b_1(\text{GaAsP}) - y(1-x-y)b_2(\text{GaAsN}) - (yx)b_3(\text{GaPN}) \dots \dots \dots (\text{III.1})$$

L'étude de l'influence de la variation de la fraction d'azote sur l'énergie de gap est présentée dans la figure (III.9). Les résultats montrent que, indépendamment de la valeur de P, l'augmentation de la concentration en azote provoque une réduction de l'énergie de gap de 2,26 eV à 1,04 eV.

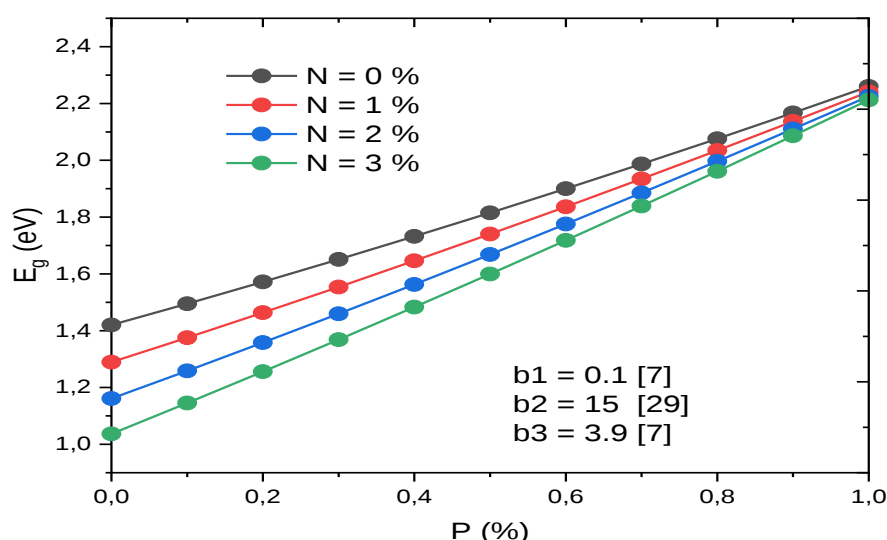


Figure (III.9) : Evolution de l'énergie de la bande interdite pour le GaAsPN pour différentes compositions de N.

Dans la deuxième partie de ce chapitre et pour un but de connaître l'effet de l'incorporation de N, on maintient la même structure de la première partie tout en remplaçant le matériau GaAsP par GaAsPN, figure (III.10). Le tableau (III.5) résume les paramètres physiques et optiques des matériaux utilisés tout au long de cette simulation.

Tableau (III.5) : Paramètres physiques et optiques de GaAsPN pour P égale à 47%.

	GaAs _{0.52} P _{0.47} N _{0.01}	GaAs _{0.51} P _{0.47} N _{0.02}	GaAs _{0.5} P _{0.47} N _{0.03}
E_g (eV)	1.71	1.64	1.56
ϵ_r	12.11	12.08	12.03
χ_e (eV)	4.23	4.23	4.23
a (Å)	5.53	5.51	5.48
N_C ($10^{18}/cm^3$)	6.54.	6.57	0.66
N_V ($10^{18}/cm^3$)	1.59	1.72	1.85

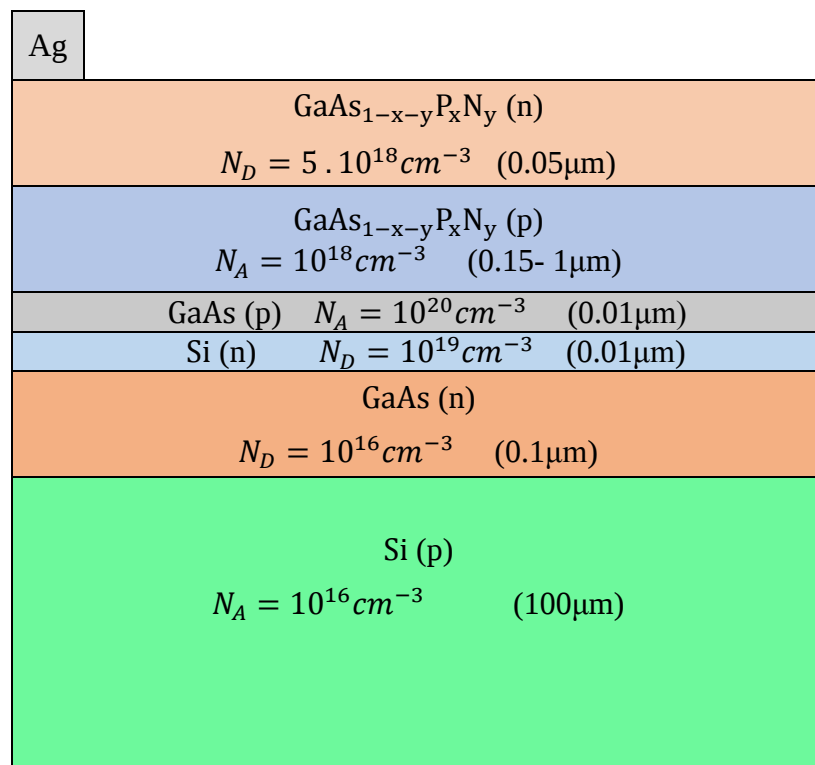


Figure (III.10) ; Structure de la cellule tandem à base de matériau III-V-N-Si.

L'analyse des données présentées dans la figure (III.11) révèle une corrélation positive entre la contrainte de GaAs_{1-x-y}P_xN_y sur GaAs et l'augmentation des teneurs en phosphore et en azote. Une concentration de phosphore de 47% correspond à une contrainte d'environ 2%, considérée comme acceptable. Cette valeur, identifiée comme optimale dans la première partie de l'étude, peut donc être conservée pour la suite de l'analyse.

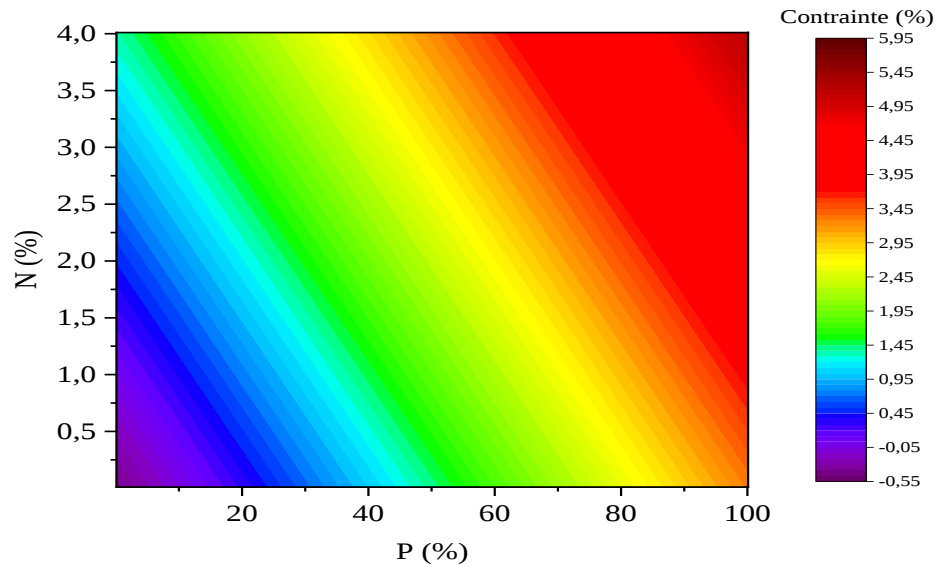


Figure (III.11) : Variations de la contrainte entre $\text{GaAs}_{1-x-y}\text{P}_x\text{N}_y/\text{GaAs}$ en fonction de la composition de phosphore et azote.

III.4.4 Effet de l'incorporation d'Azote sur EQE

La figure (III.12) illustre la variation du rendement quantique externe (EQE) en fonction de la longueur d'onde pour notre cellule solaire $\text{GaAs}_{1-x-y}\text{P}_x\text{N}_y/\text{GaAs}:\text{Si}$ avec différentes compositions de N.

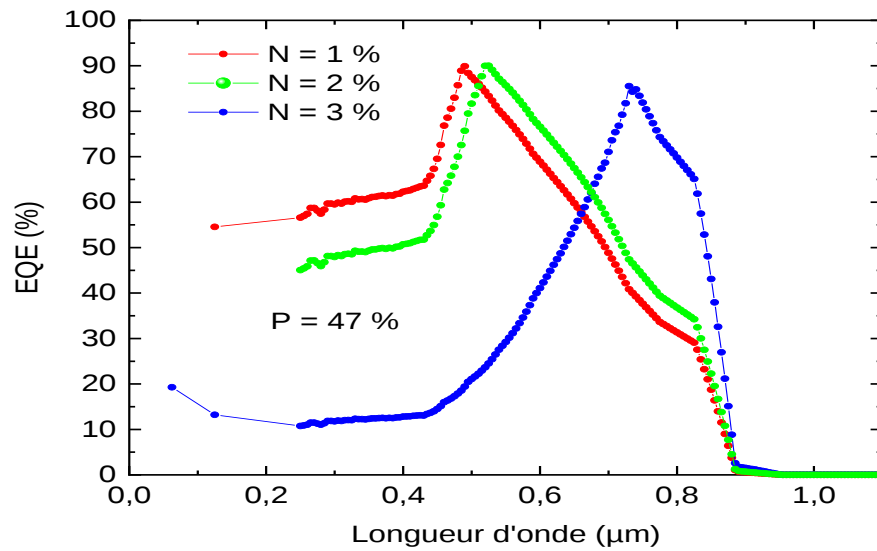


Figure (III.12) : Variation de l'EQE pour différentes compositions de la concentration de N.

Il est clair que la cellule contenant 1 % d'azote présente un EQE plus élevé que les autres configurations, avec un taux d'environ 89,9 % à une longueur d'onde de 490 nm. En revanche, pour une concentration en azote de 3 %, l'EQE est de 85.5 % à une longueur d'onde de 730 nm. Ces résultats montrent que l'augmentation de la fraction en N permet d'étendre la réponse spectrale de la cellule solaire vers le proche infrarouge, atteignant environ 950 nm.

Cependant, au-delà de cette longueur d'onde, l'EQE diminue rapidement jusqu'à approcher zéro. Cela s'explique par le fait que l'introduction d'azote réduit le gap d'énergie, ce qui permet à la cellule d'absorber des photons de plus faible énergie, étendant ainsi sa réponse spectrale à des longueurs d'onde plus longues. Toutefois, cette extension se fait au prix d'une réduction de l'EQE dans certaines régions du spectre visible, soulignant l'importance de l'équilibre entre l'efficacité dans le visible et l'absorption dans l'infrarouge pour optimiser la performance d'une cellule solaire tandem.

III.4.5 L'effet de l'incorporation de l'azote sur les caractéristiques J-V

La figure (III.13) présente la caractéristique courant-tension de cellule solaire 2J pour différentes compositions d'azote (N) dans la couche absorbante de la sous cellule supérieure : $y = 1\%$, $y = 2\%$ et $y = 3\%$. Les paramètres caractéristiques associés à chaque composition sont détaillés dans le tableau (III.6).

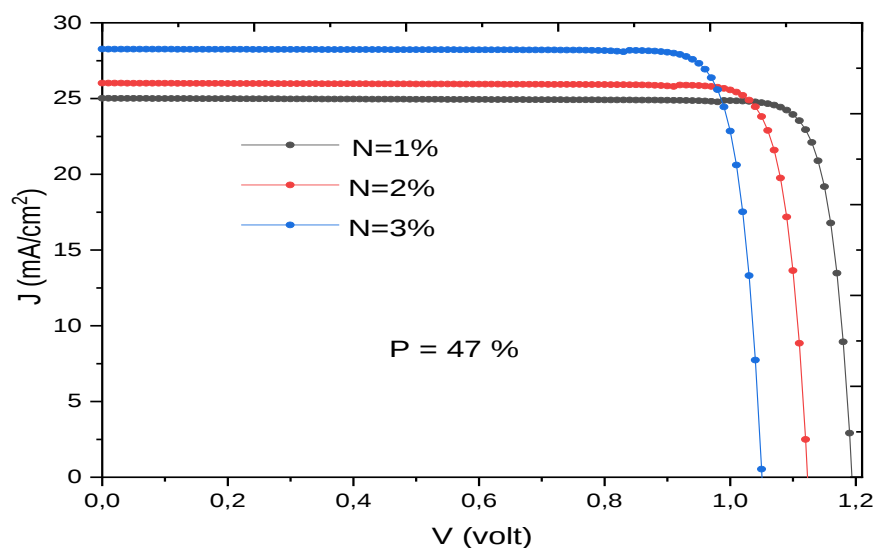


Figure (III.13) : Caractéristiques J-V en fonction de N.

La concentration d'azote (N) dans la structure de la cellule solaire affecte différemment ses paramètres clés. Avec l'augmentation de N, on observe une diminution du potentiel V_{co} , du facteur de forme et de l'efficacité globale. Une efficacité optimale de 26,42% est atteinte avec une concentration d'azote de 1%.

Tableau (III.6) : Paramètres caractéristiques de nouvelle cellule 2J pour P égale à 47%.

N (%)	1	2	3
J_{SC} (mA/cm ²)	25.01	26.02	28.26
V_{OC} (V)	1.19	1.12	1.05
FF (%)	88.47	87.99	87.41
Efficiency η (%)	26.42	25.96	25.71

Cependant, le courant J_{cc} présente une tendance inverse, augmentant significativement avec la teneur en N pour atteindre une valeur maximale de 28,26 mA/cm² à 3% d'azote. Cette relation illustre le compromis entre l'amélioration de l'absorption (reflétée par l'augmentation du J_{cc}) et la détérioration d'autres paramètres de performance avec l'augmentation de la concentration en azote.

III.5 Etude comparative entre les deux structures

III.5.1 Caractéristiques optiques

L'étude de l'effet de l'azote dans le GaAsPN sur les caractéristiques optiques des cellules solaires révèle des différences significatives selon la concentration utilisée, figure (III.14).

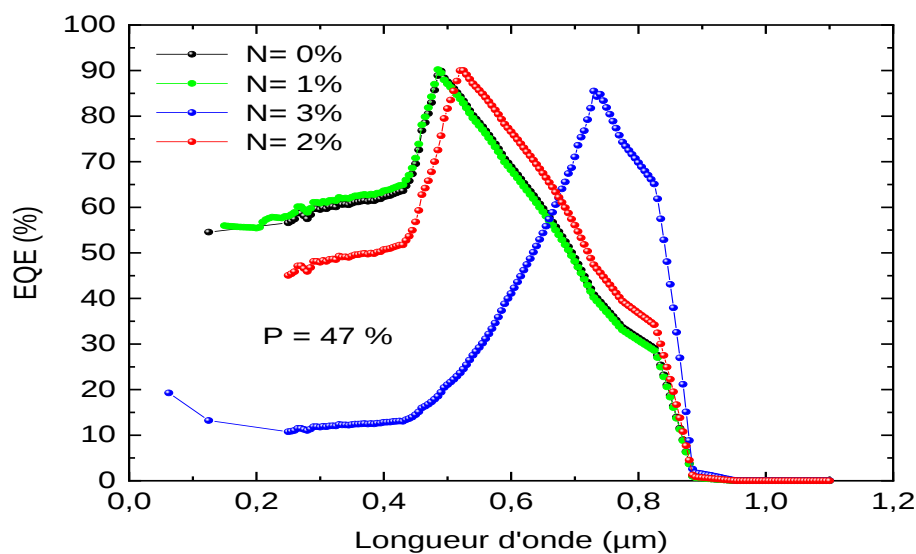


Figure (III.14) : Variation de l'EQE pour les deux structures avec et sans azote.

Les structures contenant peu ou pas d'azote (0% à 2%) démontrent une excellente efficacité quantique externe dans le spectre visible, atteignant jusqu'à 90,9% à 525 nm pour 2% d'azote, les rendant particulièrement adaptées aux conditions de faible luminosité ou de lumière diffuse. En revanche, l'augmentation de la concentration d'azote à 3% étend la réponse spectrale vers le proche infrarouge, jusqu'à 950 nm, avec un EQE de 85,5% à 730 nm. Cette extension est due à la réduction du gap d'énergie, permettant l'absorption de photons de plus basse énergie et rendant ces cellules plus efficaces sous un ensoleillement intense et direct. Ainsi, le choix de la concentration d'azote permet d'optimiser les cellules solaires en GaAsPN pour différentes conditions d'éclairage, offrant une flexibilité d'application selon les besoins spécifiques en termes de captation lumineuse.

III.5.1 Caractéristiques électriques

D'après les résultats de la figure (III.15), On remarque que nos résultats sont en bon accord avec les travaux antérieurs [26-27]. L'augmentation de la teneur en azote entraîne une diminution du rendement, du V_{co} et du FF, bien que une augmentation du J_{cc} , ce qui correspond bien aux conclusions des études sur les cellules tandem à double jonction. Ces études montrent que l'efficacité maximale est obtenue lorsque le gap d'énergie est précisément ajusté, avec environ 1,7 eV pour la sous-cellule supérieure et 1,1 eV pour la sous-cellule inférieure en silicium [26,27].

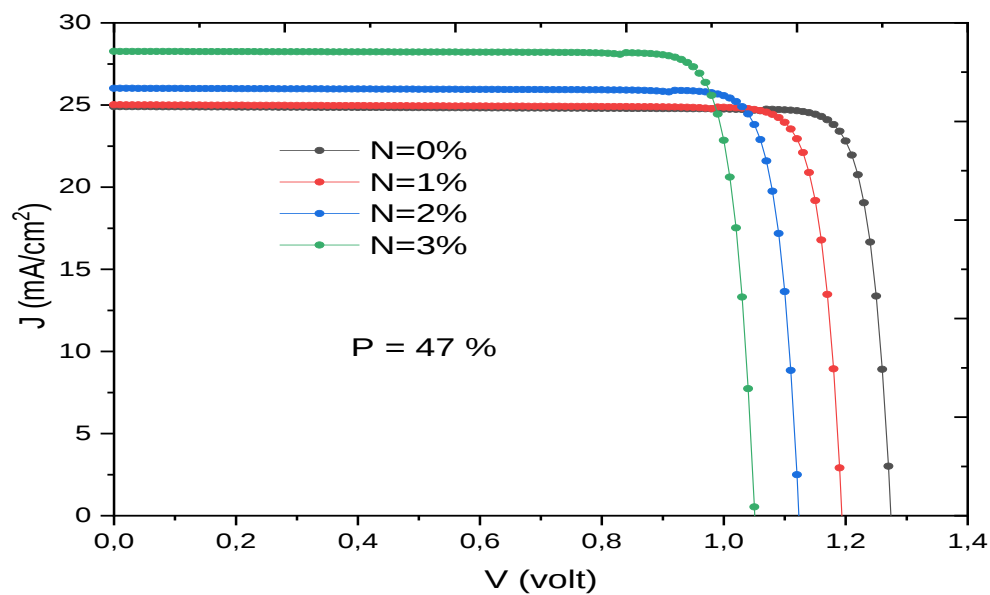


Figure (III.15) : Caractéristiques J-V pour les deux structures avec et sans azote.

Dans notre cas, la concentration en azote qui permet de maintenir ce gap d'énergie optimal de GaAsPN est environ $N=1\%$, assurant ainsi de bonnes performances globales. Alors que, l'augmentation de la fraction en azote au-delà de cette valeur, bien qu'elle améliore l'absorption et par conséquent augmente le J_{cc} , elle perturbe de l'autre côté l'équilibre énergétique, ce qui explique la baisse de l'efficacité, du V_{co} et du FF. Nos résultats confirment ainsi l'importance de l'ajustement fin du gap d'énergie, comme l'ont démontré les chercheurs dans leurs travaux sur les cellules solaires tandem.

III.6 Conclusion

Dans la première section de ce troisième chapitre, nous avons effectué des simulations numériques pour une cellule solaire tandem 2J GaAs_{1-x}P_x/GaAs:Si. Nous avons atteint une efficacité maximale d'environ 28.20 % en ajustant, l'éclairement à 1000 W/m², la fraction de phosphore P à 0.47 et la température à 300 K. Dans la seconde partie, nous avons exploré la même structure avec le changement du matériau GaAsP par GaAsPN. Les performances de cette structure ont été comparées pour différentes compositions de N.

L'incorporation de l'azote dans cette structure crée un équilibre entre les caractéristiques électriques et optiques. Nous avons observé que pour la première structure (sans azote), le FF, la tension V_{co} et le rendement présentent une légère augmentation par rapport à la deuxième structure (avec azote). Cependant, le courant de J_{cc} de cette dernière est plus élevé par rapport à la première structure.

En ce qui concerne les caractéristiques optiques, l'augmentation de la concentration en azote améliore la réponse spectrale de cette cellule solaire en élargissant sa sensibilité vers le proche infrarouge. Ces observations soulignent l'importance de l'optimisation de la concentration en azote pour atteindre un compromis entre les performances électriques et optiques de la cellule solaire à base des matériaux III-V-N:Si.

Références

- [1] V. Raj, T. Haggren, Y. O. Mayon, C. Jagadish, et H. H. Tan, « 21.2% GaAs Solar Cell Using Bilayer Electron Selective Contact », *Sol. RRL*, vol. 8, n° 5, p. 2300889, mars 2024, doi: 10.1002/solr.202300889.
- [2] V. Raj, T. Haggren, W. W. Wong, H. H. Tan, et C. Jagadish, « Topical review: pathways toward cost-effective single-junction III–V solar cells », *J. Phys. Appl. Phys.*, vol. 55, n° 14, p. 143002, avr. 2022, doi: 10.1088/1361-6463/ac3aa9.
- [3] J. Li, Y. Liu, Y. Zhuang, X. Yang, J. H. Mo, R. K. Fan, et Q. Y. Chen, « A Brief Review of High Efficiency III-V Solar Cells for Space Application », *Front. Phys.*, vol. 8, p. 631925, févr. 2021, doi: 10.3389/fphy.2020.631925.
- [4] R. Verduci, V. Romano, G. Brunetti, et N.Y Nia, « Solar Energy in Space Applications: Review and Technology Perspectives », *Adv. Energy Mater.*, vol. 12, n° 29, p. 2200125, août 2022, doi: 10.1002/aenm.202200125.
- [5] R. R. King, C.M. Fetzer, P.C. Colter, K.M. Edmondson. Et James H, « High-efficiency space and terrestrial multijunction solar cells through bandgap control in cell structures », *Conference Record of the Twenty-Ninth IEEE Photovoltaic Specialists Conference, 2002.*, New Orleans, LA, USA: IEEE, 2002, p. 776–781. doi: 10.1109/PVSC.2002.1190685.
- [6] P. Sharma, N. Malhotra, A. Tyagi, A. Pareek, A. Mehra, et P. Singh, « modeling of InGaN solar cell for better usage using silvaco atlas » *ARPN Journal of Engineering and Applied Sciences*, Vol. 10, No. 15, august 2015.
- [7] SILVACO® (2016) ATLAS™ User's Manual. <https://dynamic.silvaco.com/dynamicweb/jsp/downloads/DownloadManualsAction.do?req=silentmanuals&nm=atlas>.
- [8] S. Abdul Hadi, T. Milakovich, M.T. Bulsara, et S. Saylan, « Design Optimization of Single-Layer Antireflective Coating for GaAs_{1-x}P_x/Si Tandem Cells With x=0, 0.17, 0.29, and 0.37 », *IEEE J. Photovolt.*, vol. 5, n° 1, p. 425–431, janv. 2015, doi: 10.1109/JPHOTOV.2014.2363559.
- [9] A. Bahi. Azzououm, A. Aissat, F. Benyettou, et J. P. Vilecot, « Optimization of GaAs_{1-x} P_x/Si Tandem Dual-Junction Solar Cells », in *2018 International Conference on Communications and Electrical Engineering (ICCEE)*, El Oued, Algeria: IEEE, déc. 2018, p. 1–3. doi: 10.1109/CCEE.2018.8634480.

- [10] K. N. Yaung, M. Vaisman, J. Lang, et M. L. Lee, « GaAsP solar cells on GaP/Si with low threading dislocation density », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 109, n° 3, p. 032107, juill. 2016, doi: 10.1063/1.4959825.
- [11] T. J. Grassman, D. J. Chmielewski, S. D. Carnevale, J. A. Carlin, et S. A. Ringel, « GaAs_{0.75} P_{0.25} /Si Dual-Junction Solar Cells Grown by MBE and MOCVD », *IEEE J. Photovolt.*, vol. 6, n° 1, p. 326-331, janv. 2016, doi: 10.1109/JPHOTOV.2015.2493365.
- [12] M. Feifel, J. Ohlmann, J. Benick, M. Hermle, J. Belz, A. Beyer, et K. Volz, « Direct Growth of III-V/Silicon Triple-Junction Solar Cells With 19.7% Efficiency », *IEEE J. Photovolt.*, vol. 8, n° 6, p. 1590-1595, nov. 2018, doi: 10.1109/JPHOTOV.2018.2868015.
- [13] N. Hayafuji, H. Kuzuki, et A. Tada, « Crack Propagation and Mechanical Fracture in GaAs-on-Si », *Jpn. J. Appl. Phys.*, vol. 30, n° 3R, p. 459, mars 1991, doi: 10.1143/JJAP.30.459.
- [14] E.D. Pierron, D.L. Parker, et J.B. McNeely, « Expansion of GaAs, GaP, and Ga(As,P) compounds from -62 °C to 200 °C » *J. Appl. Phys.* 30 (12), 4669-4671, 1967.
- [15] S. Fan., Z.J. Yu, Y. Suna., W. Weigand, P. Dhingra, et M. Kima, « 20%-efficient epitaxial GaAsP/Si tandem solar cells », *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, vol. 202, p. 110144, nov. 2019, doi: 10.1016/j.solmat.2019.110144.
- [16] Benali Abdennacer « Nanofils de Ga (Al) As sur silicium pour les cellules photovoltaïques de 3ème génération : simulation et croissance auto-catalysée » Ecole Doctorale Matériaux de Lyon, 2017, https://bibliotheque.ec-lyon.fr/documents/TH_T2562_abenali.pdf.
- [17] L. C. Hirst et N. J. Ekins-Daukes, « Fundamental losses in solar cells », *Prog. Photovolt. Res. Appl.*, vol. 19, n° 3, p. 286-293, mai 2011, doi: 10.1002/pip.1024.
- [18] F. Dimroth, T. Roesener, et S. Essig « Comparison of Direct Growth and Wafer Bonding for the Fabrication of GaInP/GaAs Dual-Junction Solar Cells on Silicon », *IEEE J. Photovolt.*, vol. 4, n° 2, p. 620-625, mars 2014, doi: 10.1109/JPHOTOV.2014.2299406.
- [19] A. B. P. Mbeunmi, R. Arvinte, et A. Jaouad, « Direct growth of GaAs solar cells on Si substrate via mesoporous Si buffer », *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, vol. 217, p. 110641, nov. 2020, doi: 10.1016/j.solmat.2020.110641.
- [20] S. D'Souza, J. Haysom, H. Anis, et K. Hinzer, « The down-to-earth future of Si substrate multi-junction concentrator photovoltaics », in *2011 IEEE Electrical Power and Energy Conference*, Winnipeg, MB, Canada: IEEE, oct. 2011, p. 57-61. doi: 10.1109/EPEC.2011.6070253.
- [21] Geoffrey A. D. Merritt, et R. P. Raffaele, « High temperature solar cell development » NASA 18th Space Photovoltaic Research and Technology Conference, pp. 108-115, 2005.

- [22] M. A. Green, « General temperature dependence of solar cell performance and implications for device modelling », *Prog. Photovolt. Res. Appl.*, vol. 11, n° 5, p. 333-340, août 2003, doi: 10.1002/pip.496.
- [23] S. M. Sze, « handbook of Physics of Semiconductor Devices » John Wiley & Sons, 2007.
- [24] O. Durand, S. Almosni, Y. Wang, C. Cornet, et A. Létoublon, « Monolithic Integration of Diluted-Nitride III-V-N Compounds on Silicon Substrates: Toward the III-V/Si Concentrated Photovoltaics », *Energy Harvest. Syst.*, vol. 1, n° 3-4, janv. 2014, doi: 10.1515/ehs-2014-0008.
- [25] K. Medjoubi, « Investigation of new solar cell technology III-V//Si behavior under irradiations for space applications », Thèse de doctorat, Institut Polytechnique de Paris, 2021, <https://theses.hal.science/tel-03220969>.
- [26] K. Yamane, K. Sato, H. Sekiguchi, H. Okada, et A. Wakahara, « Doping control of GaAsPN alloys by molecular beam epitaxy for monolithic III-V/Si tandem solar cells », *J. Cryst. Growth*, vol. 473, p. 55-59, sept. 2017, doi: 10.1016/j.jcrysgro.2017.05.025.
- [27] K. Yamane, M. Goto, K. Takahashi, K. Sato, « Growth of a lattice-matched GaAsPN p-i-n junction on a Si substrate for monolithic III-V/Si tandem solar cells », *Appl. Phys. Express*, vol. 10, n° 7, p. 075504, juill. 2017, doi: 10.7567/apex.10.075504.
- [28] K. Yamane, S. Mugikura, S. Tanaka, M. Goto, et H. Sekiguchi, « Impact of temperature and nitrogen composition on the growth of GaAsPN alloys », *J. Cryst. Growth*, vol. 486, p. 24-29, mars 2018, doi: 10.1016/j.jcrysgro.2018.01.006.
- [29] K. Uesugi, I. Suemune, T. Hasegawa, T. Akutagawa, et T. Nakamura, « Temperature dependence of band gap energies of GaAsN alloys », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 76, n° 10, p. 1285-1287, mars 2000, doi: 10.1063/1.126010.

Chapitre IV

Résultats de simulations des cellules 3J III-V-N

IV.1 Introduction

Ce dernier chapitre présente deux approches alternatives visant à améliorer les résultats obtenus dans le troisième chapitre et à explorer les effets de l'introduction d'azote dans un nouveau type de cellule solaire multi-jonctions.

La première option consiste à l'utilisation d'une cellule tandem 3J. Cette configuration, qui intègre trois jonctions, vise à optimiser le rendement énergétique en exploitant différentes bandes spectrales pour augmenter la conversion de l'énergie solaire en électricité. La seconde alternative propose de conserver la structure de base tout en substituant le matériau III-V par un composé III-V-N. Cette modification a pour objectif d'introduire l'azote dans la structure cristalline, ce qui pourrait influencer significativement les propriétés électroniques de la cellule solaire. L'incorporation d'azote dans la structure III-V pourrait notamment affecter le gap énergétique, la mobilité des porteurs de charge et la réponse spectrale de la cellule.

Ces deux approches feront l'objet d'une étude approfondie, comprenant des analyses détaillées des performances électriques et optiques, ainsi que des investigations sur les propriétés structurales des matériaux. Les simulations, réalisées à l'aide du logiciel Atlas-Silvaco, permettront :

- De mieux comprendre les avantages et les limitations de chaque option ;
- De contribuer à éclairer la prise de décision pour l'amélioration des cellules solaires multi-jonctions à base de III-V-N, dans un contexte d'optimisation de leurs performances.

Cette étude s'inscrit dans une démarche d'innovation et d'optimisation des technologies photovoltaïques, visant à repousser les limites actuelles de l'efficacité des cellules solaires tandem.

IV.2 Justification du choix de structure 3J

L'augmentation de l'efficacité d'une cellule solaire entraîne la diminution du coût du watt crête [1]. Parmi les technologies offrant une augmentation de l'efficacité, on trouve la cellule solaire à jonctions multiples [2]. En effet, cette cellule à base de matériaux composés III-V présente une efficacité plus élevée et semble être l'avenir des applications photovoltaïques. De plus en plus, elles sont devenues la technologie solaire spatiale la plus prometteuse [3,4].

Effectivement, le coût de fabrication de ces configurations reste encore élevé. L'une des techniques proposées pour réduire ce coût est l'utilisation d'un substrat en silicium. Par conséquent, les cellules GaAsP/Si à croissance monolithique pourraient être un candidat approprié pour fournir une énergie solaire à faible coût et à haut rendement pour les applications spatiales. Bien que des difficultés soient rencontrées lors de la croissance expérimentale de matériaux III-V sur du silicium, dues à un important désaccord de maille et de la grande différence de coefficients de dilatation thermique [5-8].

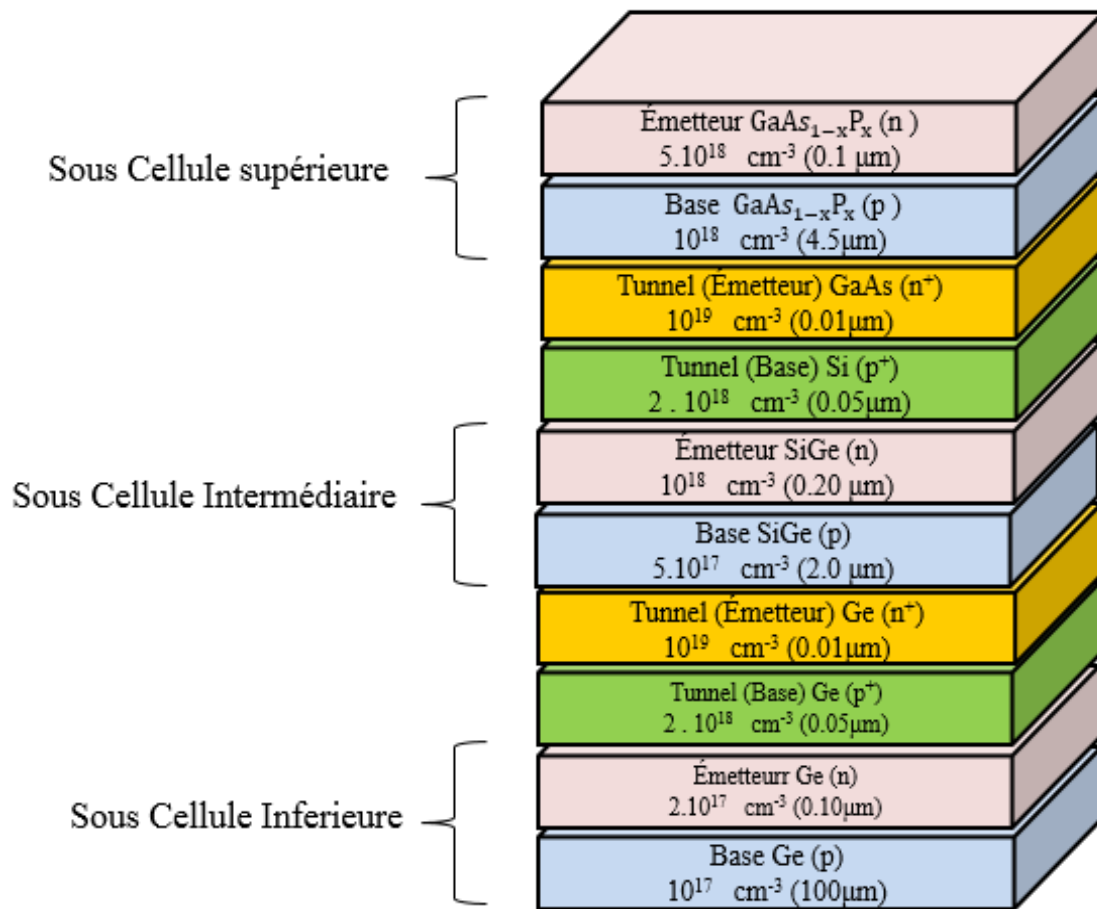


Figure (IV.1) : Structure de la cellule solaire proposée $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x/\text{Si}_{0.12}\text{Ge}_{0.88}/\text{Ge}$.

Un moyen prometteur de surmonter ces limitations et d'augmenter l'efficacité des cellules solaires 3J à base des semiconducteurs III-V consiste à utiliser l'élément germanium comme cellule inférieure au lieu du silicium. Le germanium se caractérise par une énergie de bande interdite directe de 0,66 eV à 300K, ce qui confère un bord d'absorption plus abrupt que le silicium, un meilleur recouvrement spectral du spectre d'irradiance solaire et un coût inférieur.

De plus, l'élément germanium peut être cultivé avec un réseau compatible avec les matériaux III-V. Cette supériorité du germanium en fait un matériau prometteur pour absorber les photons de faible énergie [9,10]. C'est pour ces raisons que le germanium est adopté comme cellule inférieure dans le présent travail.

L'intégration de SiGe entre la cellule supérieure III-V et la cellule inférieure en Ge permet de réduire l'interface de dislocation lors de la nucléation des matériaux III-V, garantissant ainsi une cellule inférieure de haute qualité. Fadaly et *al* [11] ont démontré que les durées de vie calculées des alliages $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ se rapprochent de celles des semi-conducteurs du groupe III-V car elles sont théoriquement prédites pour combiner une bande interdite directe, une longueur d'onde accordable et des transitions optiques fortes [11-13].

De plus, une structure expérimentale de cellule solaire 2J $\text{GaAs}_{0.79}\text{P}_{0.21}/\text{Si}_{0.18}\text{Ge}_{0.82}$ a été élaborée comme rapporté dans [12]. Afin d'améliorer encore les performances de ces 2J cellules, un modèle de cellule solaire à triple jonction est proposé dans ce travail. Pour optimiser cette cellule solaire 3J, des simulations des propriétés optiques et électriques ont été réalisées, notamment les caractéristiques courant-tension et l'efficacité quantique externe. Ces simulations se sont concentrées sur l'influence de la composition en phosphore de la cellule solaire supérieure.

La figure (IV.1) illustre la structure proposée, résumant les paramètres utilisés tout au long de la simulation. Cette cellule solaire 3J est constituée de trois cellules solaires empilées comme suit :

- ✚ Cellule solaire supérieure en GaAsP ;
- ✚ Cellule solaire intermédiaire en SiGe ;
- ✚ Cellule solaire inférieure en Ge ;
- ✚ Deux jonctions tunnel fortement dopées : p-GaAs/n-Si et p-Ge/n-Ge sont placées entre les cellules supérieure/intermédiaire et intermédiaire/inférieure, respectivement.

IV.3 Modèle théorique

L'analyse détaillée des dispositifs photovoltaïques nécessite l'utilisation de modèles théoriques sophistiqués pour comprendre et prédire leur comportement électrique. Dans ce cadre, le logiciel de simulation Atlas Silvaco joue un rôle crucial en offrant une palette complète de modèles physiques intégrés. Parmi ces modèles, on retrouve :

- ✚ **Recombinaison Shockley-Read-Hall (SRH):** Ce modèle prédominant décrit la recombinaison des porteurs via des centres de défauts dans le matériau semiconducteur. Il prend en compte la capture des électrons et des trous par ces centres, suivis de leur recombinaison et de l'émission d'un photon. Le modèle SRH introduit un paramètre crucial, la durée de vie des porteurs, qui dépend de la concentration des centres de défauts ;
- ✚ **Modèle de durée de vie dépendant de la concentration :** La durée de vie des porteurs n'est pas constante, elle varie en fonction de la concentration des centres de recombinaison. Ce modèle capture cette dépendance, permettant une simulation plus précise du comportement des porteurs dans des conditions variées ;
- ✚ **Mobilité des porteurs par le modèle de Masetti :** La mobilité des porteurs est un paramètre clé qui détermine la vitesse à laquelle les électrons et les trous se déplacent dans le semiconducteur. Le modèle de Masetti offre une description précise de la mobilité en tenant compte des interactions entre les porteurs et les phonons (vibrations du réseau cristallin) ;
- ✚ **Modèle de dérive-diffusion :** Ce modèle est utilisé pour calculer la densité de courant des électrons et des trous. Il prend en compte les effets de la dérive (due au champ électrique) et de la diffusion (due au mouvement des porteurs) sur le transport des charges ;
- ✚ **Equations de Poisson :** Cette équation décrit le potentiel électrique dans le semiconducteur. Elles sont essentielles pour comprendre les processus de charge et le fonctionnement global du dispositif ;
- ✚ **Efficacité quantique externe (EQE):** L'EQE est un paramètre crucial qui caractérise l'efficacité du dispositif à convertir la lumière incidente en électrons collectés. Son expression permet d'évaluer le rendement optoélectronique du dispositif et d'identifier les facteurs limitant ses performances.

Ces fonctionnalités intégrées permettent d'effectuer des simulations avancées, prenant en compte les interactions complexes entre les porteurs de charge, les pièges et les niveaux d'énergie dans les semi-conducteurs. En utilisant le logiciel Atlas, on peut ainsi explorer de manière approfondie le comportement des dispositifs photovoltaïques, analyser leurs performances et optimiser leur conception pour maximiser leur efficacité énergétique. Voici l'ensemble des relations importantes utilisées lors de cette simulation.

L'énergie de la bande interdite du matériau $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x$ est exprimée comme suit [14]:

$$E_{g(\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x)} = E_{g_{\text{GaAs}}} \cdot (1 - x) + E_{g_{\text{GaP}}} \cdot x - b \cdot x \cdot (1 - x) \quad (\text{IV.1})$$

où :

- E_{gGaAs} et E_{gGaP} : Les énergies de bande interdite de GaAs et GaP à température ambiante, respectivement ;
- b : Le paramètre de flexion (bowing) de $GaAs_{1-x}P_x$ ($b = 0,1$ eV).

Les deux relations de l'énergie de bande interdite, sans (IV.2) et avec contrainte (IV.3), respectivement, du matériau $Si_{1-y}Ge_y$ sont données par [15] :

$$E_g(Si_{1-z}Ge_z) = \begin{cases} 1.17 - 0.47z + 0.24z^2, & z < 0.85 \\ 5.88 - 9.58z + 4.43z^2, & z \geq 0.85 \end{cases} \quad (IV.2)$$

$$E_g(Si_{1-z}Ge_z) = 1.17 - 0.94z + 0.34z^2 \quad (IV.3)$$

Le paramètre de de maille de réseau du matériau ternaire $GaAs_{1-x}P_x$ en fonction de la composition x est calculé en utilisant la loi de Vegard :

$$a_{GaAs_{1-x}P_x} = a_{GaAs} \cdot (1-x) + a_{GaP} \cdot x \quad (IV.4)$$

où :

- $a_{GaAs_{1-x}P_x}$: Paramètre de maille de $GaAs_{1-x}P_x$;
- a_{GaAs} : Paramètre de maille de GaAs pur ;
- a_{GaP} : Paramètre de maille de GaP pur.

La contrainte générée entre $GaAs_{1-x}P_x$ et $Si_{0.12}Ge_{0.88}$ peut être définie en utilisant la différence de leurs paramètres de maille :

$$\varepsilon_1 = \frac{a_{Si_{0.12}Ge_{0.88}} - a_{GaAs_{1-x}P_x}}{a_{GaAs_{1-x}P_x}} \quad (IV.5)$$

Tandis que, la contrainte générée entre $Si_{1-z}Ge_z$ et Ge peut être définie comme suit :

$$\varepsilon_2 = \frac{a_{Ge} - a_{Si_{1-z}Ge_z}}{a_{Si_{1-z}Ge_z}} \quad (IV.6)$$

IV.4 Etude physique

En examinant les variations de contrainte, dans un premier temps entre les couches formées par les matériaux $Si_{1-z}Ge_z$ et Ge et de l'autre côté entre les deux couches GaAsP et SiGe, on peut identifier les compositions de phosphore qui minimisent la contrainte entre les couches tout en maintenant des propriétés énergétiques souhaitables, telles qu'une énergie de bande interdite appropriée pour l'application visée.

IV.4.1 Cas des matériaux $\text{Si}_{1-z}\text{Ge}_z$ / Ge

La figure (IV.2) présente une analyse bidimensionnelle des propriétés des hétérostructures $\text{Si}_{1-z}\text{Ge}_z/\text{Ge}$. L'axe secondaire illustre la corrélation entre la concentration en germanium (z) et l'énergie de bande interdite (E_g), tandis que l'axe principal quantifie la contrainte interfaciale entre les couches de $\text{Si}_{1-z}\text{Ge}_z$ et Ge. Les courbes de l'énergie de bande interdite sont représentées pour deux scénarios distincts :

- **Matériau relaxé (sans contrainte) :** $E_g(z)$ est modélisée par l'équation (IV.2) ;
- **Matériau contraint :** $E_g(z)$ est décrite par l'équation IV.3, prenant en compte les effets de la déformation sur la structure de bandes.

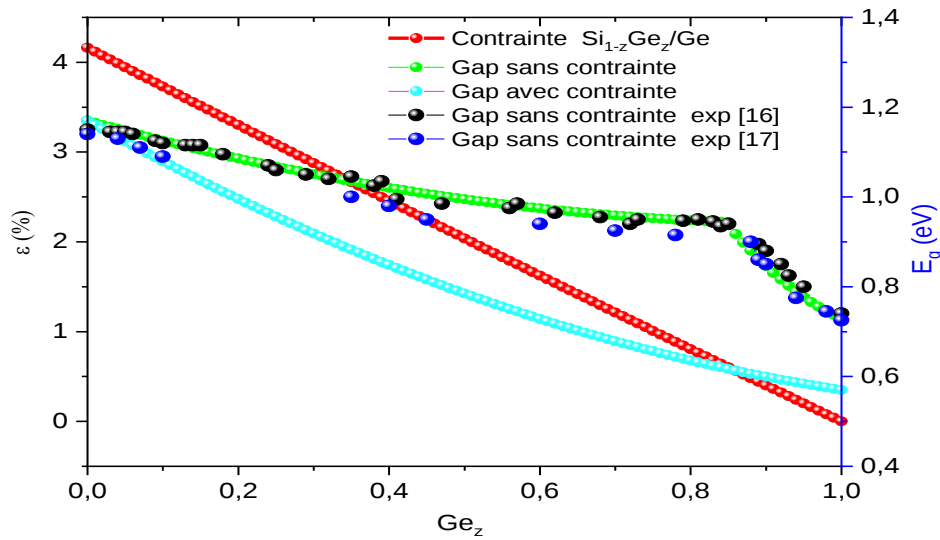


Figure (IV.2) : Variations de contrainte entre $\text{Si}_{1-z}\text{Ge}_z$ et énergie de bande interdite du SiGe en fonction de la composition de germanium.

Les valeurs théoriques obtenues pour le cas relaxé ont été validées par comparaison avec des données expérimentales issues des publications [16-18], démontrant une concordance satisfaisante.

Les résultats de la simulation démontrent une excellente concordance avec les données expérimentales, renforçant ainsi la validité du modèle théorique utilisé. La courbe en bleu ciel représente l'évolution de l'énergie de bande interdite du SiGe sous contrainte en fonction de la concentration en germanium.

On observe une modulation significative de cette énergie, s'étendant de 1,12 eV à 0,67 eV pour des concentrations en Ge variant de 0 à 100%. Parallèlement, la courbe rouge illustre la relation entre la concentration en Ge et la contrainte interfaciale. Notamment, pour une concentration de 88% en Ge, la contrainte demeure modérée, n'excédant pas 0,48%. Cette analyse paramétrique a permis d'optimiser la composition de l'alliage SiGe. Une concentration de 88% en germanium a été identifiée comme optimale, correspondant à une énergie de bande interdite de 0,88 eV dans l'état non contraint, offrant ainsi un compromis favorable entre les propriétés électroniques désirées et la gestion des contraintes mécaniques dans l'hétérostructure.

IV.4.2 Cas des matériaux $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x/\text{Si}_{0.12}\text{Ge}_{0.88}$

La figure (IV.3) présente une analyse multidimensionnelle de l'hétérostructure $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x/\text{Si}_{0.12}\text{Ge}_{0.88}$, mettant en évidence la corrélation entre la concentration de phosphore (x) et deux paramètres critiques : la contrainte interfaciale et l'énergie de bande interdite (E_g).

Les simulations révèlent une relation monotone croissante entre la concentration de phosphore et l'énergie de bande interdite. Spécifiquement, E_g augmente de 1,42 eV à 2,26 eV lorsque x varie de 0 à 1, démontrant ainsi la capacité de modulation des propriétés optoélectroniques de cet alliage par le contrôle de sa composition.

La fiabilité du modèle théorique est corroborée par une excellente concordance entre les valeurs simulées de l'énergie de bande interdite pour le matériau non contraint ($\varepsilon=0$) et les données expérimentales rapportées par H. Noos et al. [19]. Cette validation renforce la crédibilité de l'approche de modélisation adoptée pour l'étude de cette hétérostructure. L'analyse paramétrique de la contrainte en fonction de la concentration en phosphore offre des perspectives prometteuses pour l'optimisation de la composition de l'alliage. Notamment, une concentration de phosphore de 47% a été identifiée comme un point d'intérêt particulier, où la déformation interfaciale reste inférieure à 1,5%.

Cette valeur de contrainte est considérée comme acceptable pour la fabrication d'une structure épitaxiale stable, offrant ainsi un compromis favorable entre les propriétés électroniques désirées et la stabilité mécanique de l'hétérostructure.

Cette étude fournit donc des lignes directrices précieuses pour la conception et l'optimisation de dispositifs optoélectroniques basés sur l'hétérostructure $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x/\text{Si}_{0.12}\text{Ge}_{0.88}$, en permettant un ajustement fin des propriétés du matériau tout en maintenant l'intégrité structurelle du système.

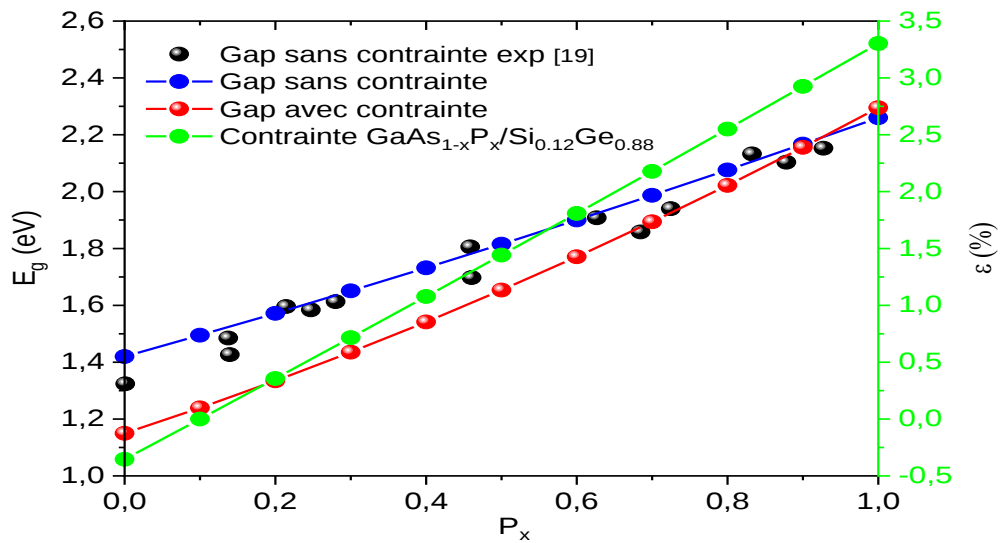


Figure (IV.3) : Variations de contrainte entre de $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x/\text{Si}_{0,12}\text{Ge}_{0,88}$ et énergie de bande interdite du GaAsP en fonction de la composition de phosphore.

IV.5 Résultats de simulation de la cellule 3J à base de matériau III V

IV.5.1 Effet de la concentration du phosphore

Les figures (IV.4) et (IV.5) présentent une analyse des caractéristiques électriques de la cellule photovoltaïque proposée en fonction de la concentration de phosphore dans l'alliage $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x$. Ces graphiques illustrent les relations courant-tension (JV) et puissance-tension (PV), révélant l'influence significative de la composition de l'alliage sur les performances du dispositif. L'analyse des courbes met en évidence une corrélation inverse entre la concentration de phosphore et les paramètres électriques clés. Lorsque x augmente de, on observe une diminution de la densité de courant J_{cc} de $\Delta J_{cc} = 9,6 \text{ mA/cm}^2$, compensée par une augmentation concomitante de la tension de V_{co} d'environ 16,82 V. Cette tendance souligne le compromis intrinsèque entre le courant et la tension dans l'optimisation des cellules solaires à hétérojonction.

De manière notable, l'augmentation de la concentration en phosphore entraîne une amélioration substantielle de la densité de puissance maximale de sortie. Cette observation suggère que l'élargissement de la bande interdite induit par l'incorporation de phosphore favorise une meilleure conversion photovoltaïque, probablement en réduisant les pertes par thermalisation et en améliorant la collecte des porteurs de charge.

L'analyse paramétrique identifie une concentration optimale de phosphore d'environ 47% comme point de fonctionnement idéal, maximisant la puissance de sortie du dispositif. Cette conclusion corrobore les résultats de l'étude physique présentée dans la figure (IV.3), où cette même concentration a été associée à un état de contrainte mécanique favorable (déformation < 1,5%) dans l'hétérostructure.

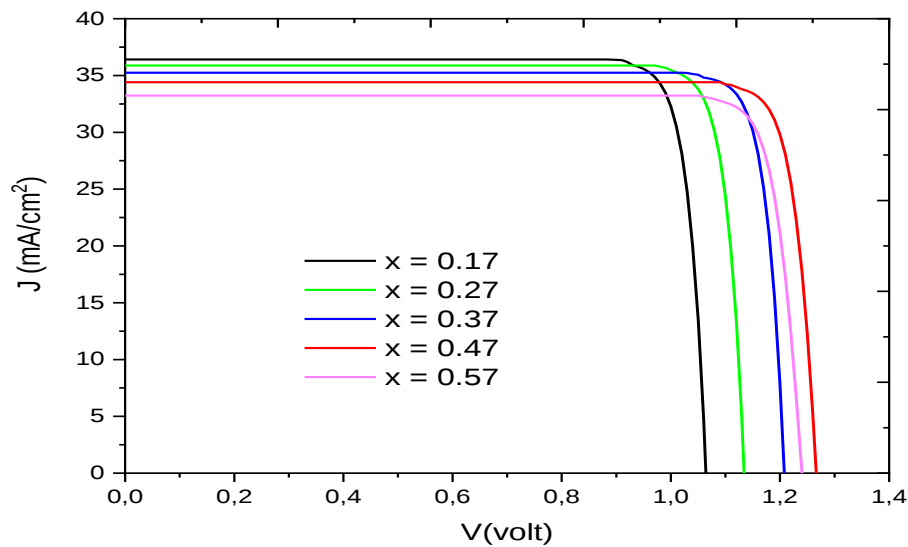


Figure (IV.4) : J-V de la cellule 3J pour différentes concentrations en P.

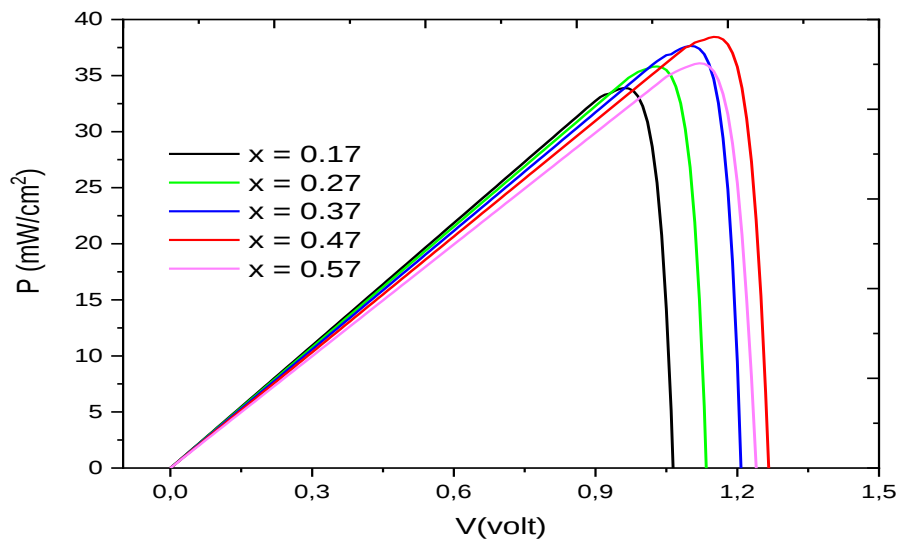


Figure (IV.5) : P-V de la cellule 3J pour différentes concentrations de P.

Cette convergence entre l'optimisation des propriétés électriques et la gestion des contraintes mécaniques à $x \approx 47\%$ valide l'approche globale adoptée dans la conception de cette cellule photovoltaïque, démontrant une synergie entre les considérations structurales et fonctionnelles dans l'ingénierie des matériaux semi-conducteurs pour applications photovoltaïques avancées.

IV.5.2 Effet de l'épaisseur de l'absorbeur $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x$

L'étude paramétrique illustrée par les figures (IV.6.a) et (IV.6.b) révèle l'impact significatif de l'épaisseur de l'absorbeur $\text{GaAs}_{0.53}\text{P}_{0.47}$ sur les performances de la cellule 3J.

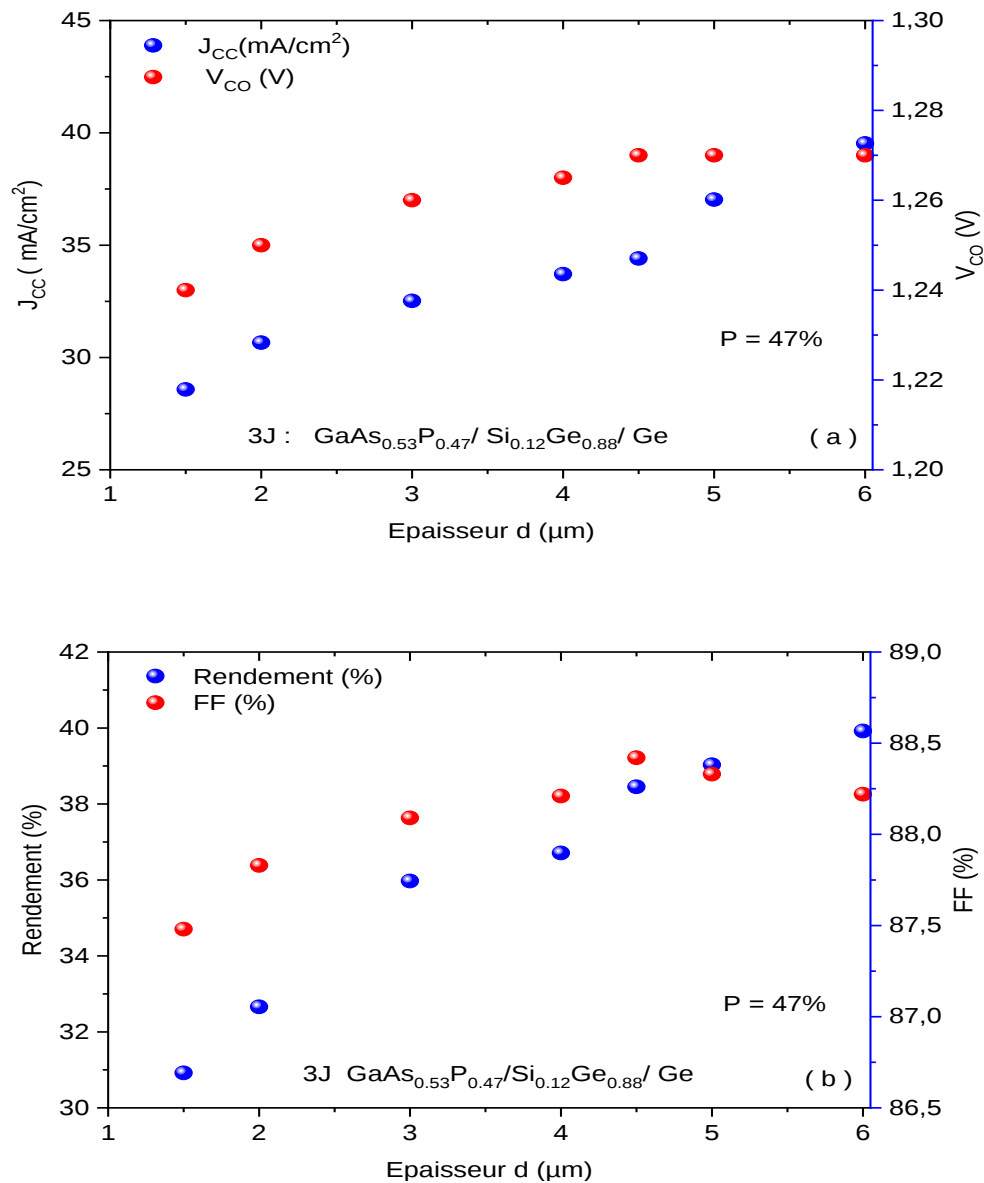


Figure (IV.6) : Variations des paramètres de la cellule proposée en fonction de l'épaisseur (d) de la couche absorbante GaAsP ,

a) Effet de d sur le J_{cc} et le V_{co} , b) Effet de d sur le FF et η .

Une augmentation de l'épaisseur de 1,5 à 6 μm entraîne une amélioration substantielle de la densité de courant J_{cc} , qui passe de 28 à 39 mA/cm^2 , soit un gain remarquable de 11 %. En revanche, la tension V_{co} montre une sensibilité moindre, avec une augmentation modeste de 2.4 % sur la même plage d'épaisseurs. Le facteur de forme et le rendement bénéficient également de l'accroissement de l'épaisseur, le FF augmente légèrement de 87,48% à 88,22%, tandis que le rendement connaît une amélioration spectaculaire, passant de 30,92% à 39,92%, soit un gain de 9%. L'analyse des données identifie une épaisseur optimale de 4,5 μm pour l'absorbeur GaAsP, offrant un ensemble de paramètres de sortie optimisés : $J_{cc} = 34,41 \text{ mA}/\text{cm}^2$, $V_{co} = 1,27 \text{ V}$, $FF = 88,42\%$, et $\eta = 38,45\%$.

IV.5.3 Comparaison entre J-V de la cellule 3J et de ses sous cellules individuelles

La figure (IV.7) offre une analyse comparative des caractéristiques J-V de la cellule solaire 3J et de ses trois sous-cellules constitutives : $\text{GaAs}_{0.53}\text{P}_{0.47}$, $\text{Si}_{0.12}\text{Ge}_{0.88}$ et Ge. Cette comparaison permet d'évaluer la contribution de chaque couche à la performance globale du dispositif et d'identifier les facteurs limitants.

Cette analyse comparative met en lumière l'interdépendance complexe des sous-cellules dans une architecture multijonction et souligne l'importance d'une conception équilibrée pour optimiser la performance globale.

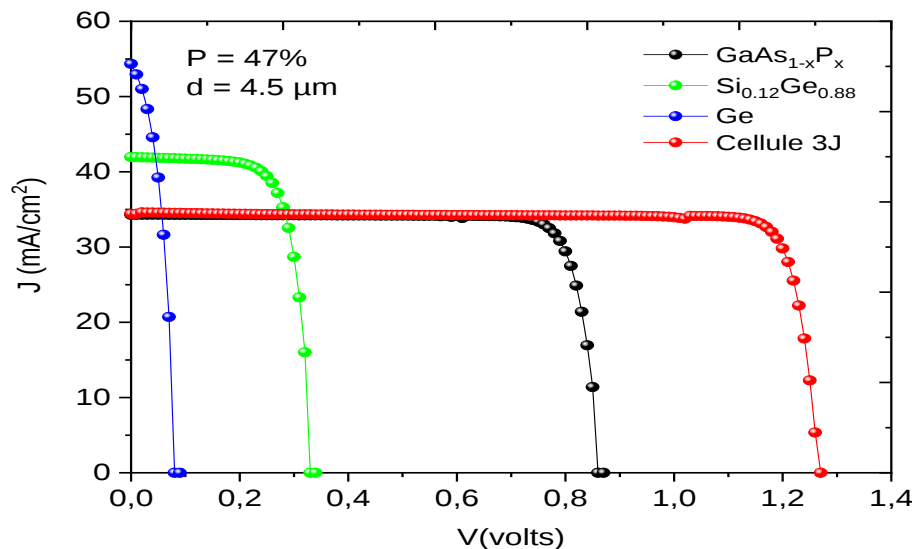


Figure (IV.7) : Comparaison entre J-V de la cellule solaire 3J et de ces trois cellules solaires individuelles.

L'analyse des courbes révèle que la densité de courant J_{cc} de la cellule 3J globale est limitée par la sous-cellule produisant le courant le plus faible, atteignant environ 34,29 mA/cm^2 .

Ce phénomène est caractéristique des cellules multijonctions connectées en série, où le courant total est contraint par la jonction la moins performante en termes de génération de courant.

La tension V_{co} de la cellule 3J, atteignant 1,27 V, correspond à la somme des V_{co} de ces trois sous cellules individuelles. Cette additivité des tensions est une conséquence directe de la configuration en série des sous-cellules, illustrant l'avantage principal des architectures multijonctions dans l'augmentation de la tension de sortie.

La sous-cellule inférieure en Ge, caractérisée par la plus petite bande interdite, démontre la densité de courant la plus élevée. Cette performance s'explique par sa capacité à absorber efficacement une large gamme de photons, y compris ceux de basse énergie ayant traversé les couches supérieures. La majorité des photons atteignant cette sous-cellule possèdent une énergie égale ou supérieure à sa bande interdite, contribuant ainsi à une génération de courant substantielle.

À l'inverse, la sous-cellule supérieure en GaAsP, avec la bande interdite la plus large, présente la tension V_{co} la plus élevée. Cette caractéristique résulte de son absorption sélective des photons de haute énergie, permettant la génération de porteurs de charge avec une différence de potentiel plus importante. Cette sous-cellule joue un rôle crucial dans la maximisation de la tension de sortie du dispositif global.

IV.6 Comparaison avec des cellules expérimentales 2J

L'analyse comparative présentée dans la figure (IV.8) met en lumière les avantages et les défis de notre cellule solaire à triple jonction (3J) par rapport aux cellules tandems expérimentales rapportées dans la littérature [20,21].

IV.6.1 Caractéristiques EQE

La figure (IV.8) illustre une comparaison du spectre EQE de notre cellule 3J simulée avec deux cellules solaires 2J expérimentales issues des travaux de M. Diaz et *al* [20] et L. Wang et *al* [21]. L'analyse révèle que pour les longueurs d'onde comprises entre 0,25 et 0,78 μm , l'EQE simulé surpasse les deux spectres expérimentaux. Au-delà de 0,78 μm , alors que les EQE expérimentaux chutent à zéro, notre EQE simulé maintient des valeurs raisonnables, s'étendant dans le domaine du proche infrarouge jusqu'à 0,9 μm avant de tendre vers zéro.

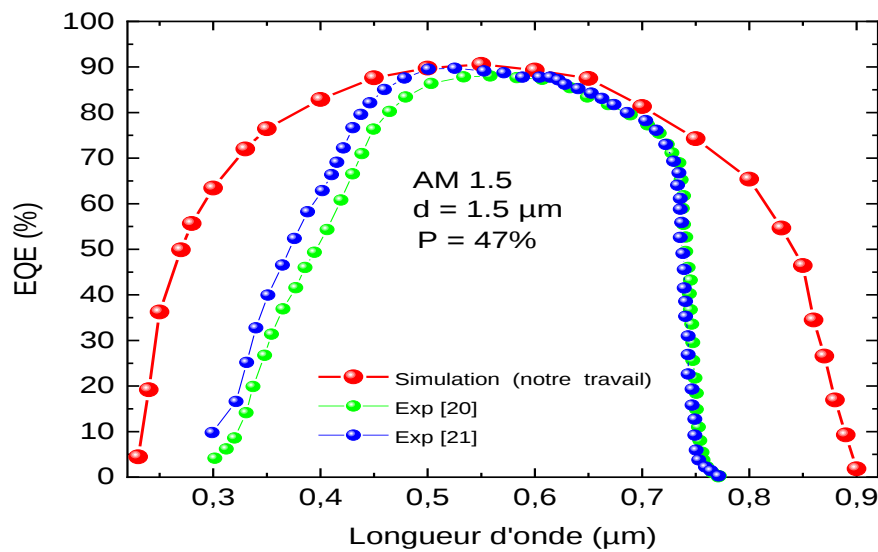


Figure (IV.8) : Comparaison entre EQE de notre structure avec deux cellules expérimentales [20, 21].

Cette extension spectrale indique que les photons entre 0,78 et 0,9 μm sont efficacement absorbés, contribuant ainsi à un courant supplémentaire. En conclusion, le spectre EQE de notre structure proposée se révèle supérieur aux EQE expérimentaux [20,21] sur l'ensemble du spectre solaire.

IV.6.2 Caractéristiques JV

La figure (IV.9) illustre une comparaison des caractéristiques I-V de notre cellule 3J simulée avec des cellules solaires 2J expérimentales [12,20]. Notre structure 3J démontre une densité de courant J_{sc} supérieure à celle de la cellule tandem expérimentale de K. J. Schmieder et al [12], témoignant d'une absorption spectrale plus efficace, probablement due à l'ajout de la sous-cellule en germanium.

Cependant, la tension V_{co} de notre dispositif simulé est inférieure à celle observée expérimentalement, suggérant des opportunités d'optimisation au niveau des interfaces et de la qualité des matériaux. Malgré cette différence de V_{co} , notre cellule 3J affiche des performances globales remarquables, avec des améliorations relatives du rendement par rapport aux résultats expérimentaux, de l'ordre de 62,64% de Schmieder et al [12] et d'environ de 36,91% de Martin Diaz et al [20], respectivement.

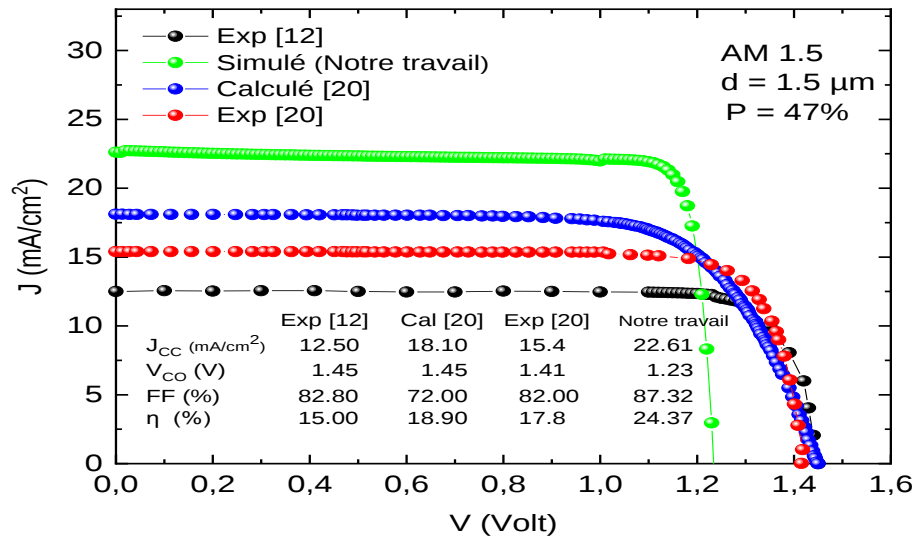


Figure (IV.9) : Comparaison entre les propriétés électriques de notre structure avec deux cellules expérimentales.

Ces résultats soulignent d'une part l'efficacité de l'approche à triple jonction et l'impact significatif de l'intégration du germanium comme troisième sous-cellule et d'autre part, elles corroborent l'amélioration précédemment observée lors de la comparaison des caractéristiques EQE. Cette comparaison valide non seulement le potentiel de notre structure 3J mais identifie également des axes d'amélioration pour de futures optimisations, notamment en ce qui concerne l'augmentation de la tension de circuit ouvert, afin de maximiser davantage l'efficacité de conversion photovoltaïque.

IV.7 L'effet de l'incorporation de l'azote dans la cellule 3J

De manière similaire de l'approche étudiée dans le chapitre III concernant les cellules tandem 2J, nous allons examiner l'effet de l'ajout d'azote sur notre cellule 3J. Nous avons maintenu la structure présentée dans la figure (IV.1), en remplaçant le matériau GaAsP par GaAsPN.

L'analyse de la figure (IV.10) met en évidence une relation proportionnelle entre la contrainte à l'interface $\text{GaAs}_{1-x-y}\text{P}_x\text{N}_y$ / $\text{Si}_{0.12}\text{Ge}_{0.88}$ et les teneurs en phosphore et azote. Une composition de 47% en phosphore induit une contrainte d'environ 2%, jugée acceptable. Cette valeur, déjà identifiée comme optimale dans les travaux précédents, peut être maintenue pour la suite de l'étude.

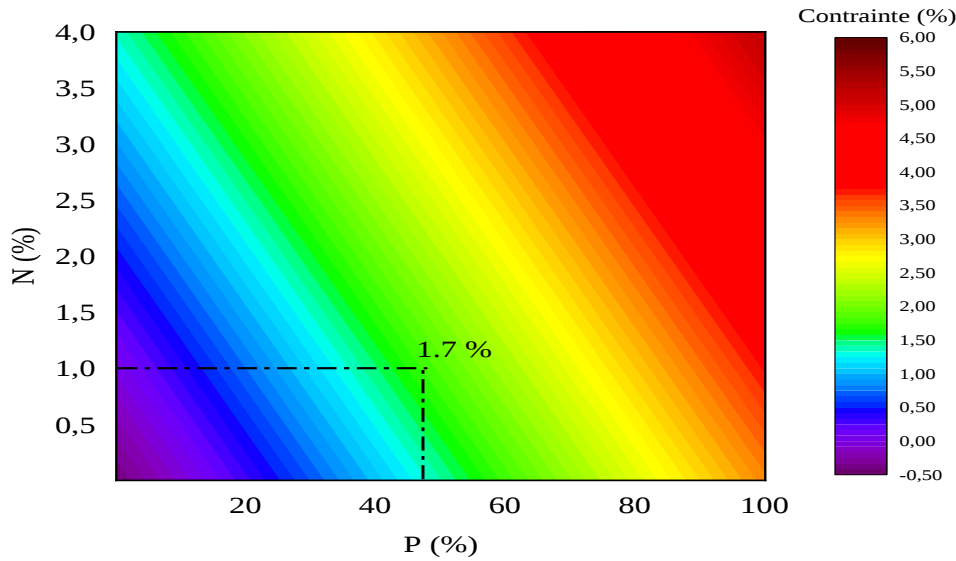


Figure (IV.10) : Variations de contrainte entre $\text{GaAs}_{1-x-y}\text{P}_x\text{N}_y / \text{Si}_{0.12}\text{Ge}_{0.88}$ en fonction de la composition de phosphore et azote.

La figure (IV.11) illustre la caractéristique puissance-tension de cette nouvelle structure 3J pour différentes compositions d'azote ($y=0.01$, $y=0.02$ et $y=0.03$) dans la couche absorbante de la cellule supérieure. Les résultats, détaillés dans le tableau (IV.1), révèlent qu'une augmentation de la fraction en azote entraîne une légère diminution de la puissance. Par exemple, on observe une puissance de 39 mW/cm^2 pour $N=0\%$ contre 31 mW/cm^2 pour $N=3\%$. Cette baisse pourrait s'expliquer par une diminution du facteur de forme FF accompagnée d'une légère réduction de la tension V_{co} . L'efficacité optimale d'environ $36,6\%$ a été atteinte avec une composition y de 0.01 .

Tableau (IV.1) : Paramètres caractéristiques de nouvelle cellule 3J pour x égale à 47% .

N fraction (%)	1	2	3
$J_{\text{CC}} (\text{mA/cm}^2)$	34.49	34.38	34.37
$V_{\text{Co}} (\text{V})$	1.20	1.13	1.05
FF (%)	88.38	87.90	87.36
Rendement η (%)	36.60	34.03	31.60

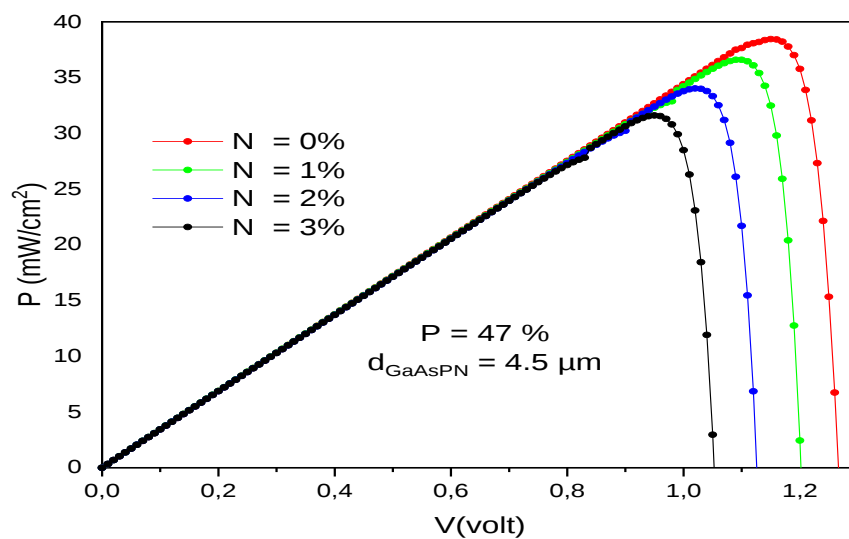


Figure (IV.11) : Caractéristiques P-V en fonction de N.

Pour valider l'optimalité de la concentration de 47% en phosphore, nous avons analysé les caractéristiques électriques de la cellule photovoltaïque proposée en fonction de la teneur en phosphore, avec une concentration d'azote fixée à 1%. Les résultats présentés dans le tableau (IV.2) corroborent ceux de la section IV.5.1. Cette concordance confirme la cohérence de nos conclusions où la valeur de 47% de phosphore demeure optimale, tant dans les deux parties du chapitre 3 que dans les deux parties du chapitre 4. Cette constance renforce la fiabilité de nos résultats à travers l'ensemble de l'étude.

Tableau (IV.2) : J-V de la cellule 3J pour différentes concentrations en P à N égale à 1%.

P (%)	17	27	37	47	57
J_{CC} (mA/cm^2)	37.74	36.03	35.30	34.49	33.36
V_{CO} (V)	0.86	1.03	1.12	1.20	1.24
FF (%)	86.53	87.21	87.84	88.38	87.65
Rendement η (%)	31.44	32.47	34.61	36.60	36.20

De façon analogue à la section IV.5.3, la figure (IV.12) présente une analyse comparative des caractéristiques J-V de la cellule solaire 3J et de ses trois sous-cellules : $\text{GaAs}_{0.52}\text{P}_{0.47}\text{N}_{0.01}$, $\text{Si}_{0.12}\text{Ge}_{0.88}$ et Ge. Cette comparaison évalue la contribution de chaque couche à la performance globale et identifie les facteurs limitant.

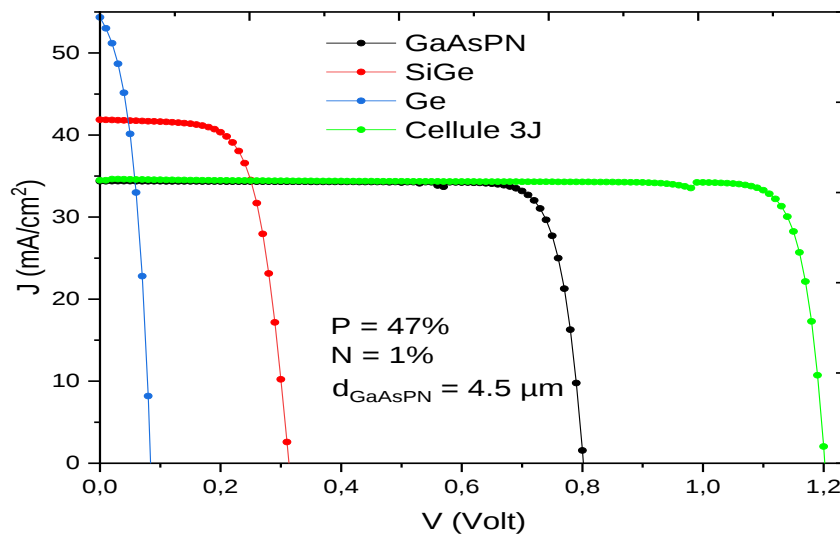


Figure (IV.12) : Comparaison entre J-V de la cellule solaire 3J et de ces trois cellules solaires individuelles.

L'examen des courbes révèle que la densité de courant J_{cc} de la cellule 3J est limitée par la sous-cellule générant le courant le plus faible, atteignant environ $34,49 \text{ mA/cm}^2$. La tension V_{co} de la cellule 3J, s'élevant à $1,2 \text{ V}$, résulte de la somme des V_{co} des trois sous-cellules individuelles.

IV.8 Conclusion

Dans ce dernier chapitre, nous avons mené une étude approfondie des cellules solaires tandem 3J à travers des simulations numériques et des optimisations. La première partie s'est concentrée sur une structure $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x/\text{SiGe}/\text{Ge}$. Par le biais d'ajustements précis, notamment une épaisseur d'environ $4,5 \mu\text{m}$ et une fraction de phosphore de 47% , nous avons réussi à atteindre une efficacité maximale remarquable d'environ $38,45\%$. Dans la seconde partie, nous impliquons des simulations numériques et une optimisation, avec un accent particulier sur l'impact de différentes compositions d'azote. Nos résultats ont révélé qu'une augmentation de la teneur en azote tend à entraîner une légère diminution de la puissance et du rendement. L'efficacité optimale pour cette nouvelle configuration a été établie à environ $36,6\%$, obtenue avec une composition d'azote (y) de 1% .

Cette approche comparative entre les deux structures nous a permis d'évaluer l'influence de l'incorporation d'azote sur les performances des cellules solaires 3J, offrant ainsi des perspectives intéressantes pour l'optimisation future de ces dispositifs photovoltaïques avancés.

Références

- [1] S. Essig, C. Allebé, T. Remo, J.F. Geisz, et M. A. Steiner, « Raising the one-sun conversion efficiency of III–V/Si solar cells to 32.8% for two junctions and 35.9% for three junctions », *Nat. Energy*, vol. 2, n° 9, p. 17144, août 2017, doi: 10.1038/nenergy.2017.144.
- [2] M. Yamaguchi, K.-H. Lee, K. Araki, et N. Kojima, « A review of recent progress in heterogeneous silicon tandem solar cells », *J. Phys. Appl. Phys.*, vol. 51, n° 13, p. 133002, avr. 2018, doi: 10.1088/1361-6463/aaaf08.
- [3] G. Hamon, N. Vaissiere, R. Cariou, et R. Lachaume, « Plasma-enhanced chemical vapor deposition epitaxy of Si on GaAs for tunnel junction applications in tandem solar cells », *J. Photonics Energy*, vol. 7, n° 2, p. 022504, avr. 2017, doi: 10.1117/1.JPE.7.022504.
- [4] S. Bernardes, R. A. M. Lameirinhas, J. P. N. Torres, et C. A. F. Fernandes, « Characterization and Design of Photovoltaic Solar Cells That Absorb Ultraviolet, Visible and Infrared Light », *Nanomaterials*, vol. 11, n° 1, p. 78, janv. 2021, doi: 10.3390/nano11010078.
- [5] R. Lachaume, R. Cariou, J. Decobert, M. Foldyna, et G. Hamon, « Performance Analysis of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{epi-Si}(\text{Ge})$ Tandem Solar Cells: A Simulation Study », *Energy Procedia*, vol. 84, p. 41-46, déc. 2015, doi: 10.1016/j.egypro.2015.12.293.
- [6] J.P. Connolly, D. Mencaraglia, C. Renard, et D. Bouchier « Designing III–V multijunction solar cells on silicon », *Prog. Photovolt. Res. Appl.* 22(7), 810, 2014. <https://doi.org/10.1002/pip.2463>
- [7] M. A. Green, « Silicon wafer-based tandem cells: The ultimate photovoltaic solution? », présenté à SPIE OPTO, A. Freundlich et J.-F. Guillemoles, Éd., San Francisco, California, United States, mars 2014, p. 89810L. doi: 10.1117/12.2044175.
- [8] A.Bahi. Azzououm, A. Aissat, et J. P. Vilecot, « Optimization of $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x/\text{Si}$ Tandem Dual-Junction Solar Cells » International Conference on Communications and Electrical Engineering (ICCEE), IEEE, 1, 2018.
- [9] T. Masuda, J. Faucher, et M. L. Lee, « Molecular beam epitaxy growth of germanium junctions for multi-junction solar cell applications », *J. Phys. Appl. Phys.*, vol. 49, n° 46, p. 465105, nov. 2016, doi: 10.1088/0022-3727/49/46/465105.
- [10] G. Sun, F. Chang, et R. A. Soref, « High efficiency thin-film crystalline Si/Ge tandem solar cell », *Opt. Express*, vol. 18, n° 4, p. 3746, févr. 2010, doi: 10.1364/OE.18.003746.
- [11] E. M. T. Fadaly, A. Dijkstra, J.R. Suckert, et D. Ziss, « Direct-bandgap emission from hexagonal Ge and SiGe alloys », *Nature*, vol. 580, n° 7802, p. 205-209, avr. 2020, doi: 10.1038/s41586-020-2150-y.

- [12] K. J. Schmieder, A. Gerger, M. Diaz, et Z. Pulwin, « GaAsP on SiGe/Si material quality improvements with in-situ stress sensor and resulting tandem device performance », *Mater. Sci. Semicond. Process.*, vol. 39, p. 614-620, nov. 2015, doi: 10.1016/j.mssp.2015.05.058.
- [13] Y. Liu, M. Ahmadpour, J. Adam, J. Kjelstrup-Hansen, H.-G. Rubahn, et M. Madsen, « Modeling Multijunction Solar Cells by Nonlocal Tunneling and Subcell Analysis », *IEEE J. Photovolt.*, vol. 8, n° 5, p. 1363-1369, sept. 2018, doi: 10.1109/JPHOTOV.2018.2851308.
- [14] C. Bosio et J. L. Staehli, « Direct-energy-gap dependence on Al concentration in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ » *Phys Rev B* 38(5), 3263, 1988.
- [15] Y.M. Haddara, P. Ashburn, et D. M. Bagnall, « Silicon-Germanium: Properties, Growth and applications » Springer Handbook of Electronic and Photonic Materials, 2017.
- [16] R. Braunstein, A. R. Moore, et F. Herman, « Intrinsic Optical Absorption in Germanium-Silicon Alloys », *Phys. Rev.*, vol. 109, n° 3, p. 695-710, févr. 1958, doi: 10.1103/PhysRev.109.695.
- [17] S. Krishnamurthy, « Band structures of $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ alloys » *Phys. Rev. B*, 33(2), 1026, 1986.
- [18] J. Weber et M. I. Alonso, « Near-band-gap photoluminescence of Si-Ge alloys », *Phys. Rev. B*, vol. 40, n° 8, p. 5683-5693, sept. 1989, doi: 10.1103/PhysRevB.40.5683.
- [19] H. S. Im, C. S. Jung, K. Park, D. M. Jang, Y. R. Lim, et J. Park, « Band Gap Tuning of Twinned GaAsP Ternary Nanowires », *J. Phys. Chem. C*, vol. 118, n° 8, p. 4546-4552, févr. 2014, doi: 10.1021/jp500458j.
- [20] M. Diaz, L. Wang, D. Li, X. Zhao, B. Conrad, A. Soeriyadi, « Tandem GaAsP/SiGe on Si solar cells », *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, vol. 143, p. 113-119, déc. 2015, doi: 10.1016/j.solmat.2015.06.033.
- [21] L. Wang, D. Li, X. Zhao, B. Conrad, M. Diaz, A. Soeriyadi, et A. Lochtefeld, « Current and efficiency improvement for a GaAsP/SiGe on Si tandem solar cell device achieved by light trapping techniques », *Phys. Status Solidi RRL – Rapid Res. Lett.*, vol. 10, n° 8, p. 596-599, août 2016, doi: 10.1002/pssr.201600157.

CONCLUSION

GENERALE

Conclusion générale

L'intégration monolithique des semi-conducteurs composés III-V sur des substrats en silicium revêt une importance majeure pour les dispositifs électroniques, optoélectroniques et photovoltaïques de nouvelle génération

Notre étude explore les évolutions des technologies de cellules solaires pour les satellites, en se concentrant sur l'intégration des semi-conducteurs III-V sur des substrats en Si, avec des dispositifs tandem de nouvelle génération. Initialement, les cellules en GaAs ont remplacé les technologies plus anciennes dans les années 1980, en raison de leur performance accrue et de leur résistance aux radiations, bien qu'elles restent coûteuses. Les cellules hybrides III-V//Si apparaissent comme une alternative prometteuse, en particulier face aux défis économiques du secteur spatial.

Bien que, il existe plusieurs problèmes fondamentaux qui rencontrés lors de la croissance des semi-conducteurs III-V/Si. Plusieurs groupes des chercheurs ont proposé diverses approches pour réduire la densité TDD en dessous de la valeur nominale de 10^9 cm^{-2} . Ces approches incluent, les couches tampons graduées, les cycles thermiques, les substrats structurés. Bien que certaines aient réussi à réduire la TDD jusqu'à $2 \times 10^8 \text{ cm}^{-2}$ ou moins, ce qui permettant leurs utilisation pour des applications optoélectroniques telles que les cellules solaires, ces solutions souffrent de processus complexes et coûteux.

Une technique prometteuse est proposée dans ce travail consiste à utiliser les alliages III-V-N (nitrides dilués) qui semble être une meilleure solution comme des sous-cellules supérieures dans les cellules tandems. Les alliages quaternaires III-V-N, tels que InGaPN et GaAsPN, présentent une large plage de bande interdite réglable, couvrant de 1,5 à 2,0 eV, ce qui représente un bon accord avec les calculs théoriques qui estime, qu'ils peut atteindre une efficacité de conversion plus élevées avec des cellules solaires 2J contenant une cellule inférieure en silicium et une sous-cellule supérieure qui sélectionnant une énergie de bande interdite entre 1,5 et 2,0 eV.

Notre travail se concentre sur les cellules tandem III-V-N-Si, unissant les atouts des deuxième et troisième générations de cellules solaires. Les simulations numériques de la cellule 2J à base de $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x/\text{GaAs} : \text{Si}$ ont révélé une efficacité maximale de 28,20 %, obtenue avec une fraction de phosphore de 47 % à 300 K et un éclairement de 1000 W/m^2 .

Conclusion générale

En comparant cette structure avec une variante GaAsPN, l'incorporation d'azote a montré un compromis entre les propriétés électriques et optiques. On remarque d'autre part, que nos résultats sont en bon accord avec les travaux théoriques. L'augmentation de la teneur en azote entraîne une diminution du rendement, du V_{co} et du FF, malgré une augmentation du J_{cc} , ce qui correspond bien aux conclusions des études sur les cellules tandem à double jonction. Ces études montrent que l'efficacité maximale est obtenue lorsque le gap d'énergie est précisément ajusté, avec environ 1,7 eV pour la sous-cellule supérieure et 1,1 eV pour la sous-cellule inférieure en silicium. Dans notre cas, la concentration en azote qui permet de maintenir ce gap d'énergie optimal de GaAsPN est environ $N=1\%$, assurant ainsi de bonnes performances globales. Alors que, l'augmentation de la fraction en azote au-delà de cette valeur, bien qu'elle améliore l'absorption et augmente le J_{cc} , perturbe cet équilibre énergétique, ce qui explique la baisse de l'efficacité, du V_{co} et du FF.

La deuxième partie explore les cellules solaires tandem 3J. Une structure $GaAs_{1-x}P_x/SiGe/Ge$ a atteint une efficacité remarquable de 38,45 %, optimisée par une épaisseur de 4,5 μm et une fraction de phosphore de 47 %. Nous avons également étudié une configuration GaAsPN/SiGe/Ge, où une augmentation de la teneur en azote a conduit à une légère baisse de l'efficacité maximale à 36,6 % avec 1 % d'azote.

Cette étude comparative entre les différentes structures a permis d'évaluer l'influence de l'incorporation d'azote sur les performances des cellules solaires 2J et 3J, offrant des perspectives intéressantes pour de futures optimisations dans les dispositifs photovoltaïques. De plus, ces résultats ouvrent la voie à de nouvelles approches pour le développement de cellules solaires plus efficaces et économiquement viables pour l'industrie spatiale, répondant ainsi aux besoins croissants d'une technologie spatiale en constante évolution. Dans l'avenir, nous visons à étendre nos recherches aux cellules solaires basées sur de nouveaux alliages, pour modéliser et optimiser des cellules solaires à 4 et 5 jonctions.

PUBLICATIONS

1. A . Bahi. Azzououm, A. Aissat et J. P. Vilcot. “ Simulation and optimization of $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x/\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y/\text{Ge}$ triple junction solar cells ” Journal of Ovonic Research Vol. 20, No. 1, January - February 2024, p. 75 - 84. <https://doi.org/10.15251/JOR.2024.201.75>.

CONFERENCES

1. A. Aissat, A. Bahi Azzououm, F. Benyettou et A. Laidouci “ Optimization of Copper Indium Gallium Diselenide Thin Film Solar Cell (CIGS) ” Springer International Publishing AG 2018, Artificial Intelligence in Renewable Energetic Systems, Lecture Notes in Networks and Systems 35, https://doi.org/10.1007/978-3-319-73192-6_50.
2. Ahmed bahi azzououm, Abdelkader Aissat, Fethi Benyettou and Jean Pierre Vilcot, " Optimization of $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x/\text{Si}$ Tandem Dual-Junction Solar Cells " International Conference on Communications and Electrical Engineering (ICCEE)- El Oued, Algeria 978-1-7281-0112-5/18/\$31.00 ©2018 IEEE, DOI: 10.1109/CCEE.2018.8634480.
3. A. Bahi azzououm, A. Aissat et J. P. Vilcot " Theoretical Modeling and Optimization of $\text{GaAsPN}/\text{GaAs}$ Tandem Dual-Junction Solar Cells," Springer Nature Singapore Pte Ltd. 2021, Proceedings of the 2nd International Conference on Electronic Engineering and Renewable Energy Systems, Lecture Notes in Electrical Engineering 681, https://doi.org/10.1007/978-981-15-6259-4_35.