الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية République Algérienne démocratique et populaire

وزارة التعليم الــعـالي و البحث العـلمــي Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique

> جسامعة سعد دحلب البليدة Université SAAD DAHLAB de BLIDA

> > كلية التكنولوجيا Faculté de Technologie

قسم الإلكترونيك Département d'Électronique



Mémoire de Projet de Fin d'Études

présenté par

Chakal AbdImoumene

&

Mammou Abdelhak

pour l'obtention du diplôme de Master en Électronique option Microélectronique, Microsystèmes, et Conception de Circuits

Thème

Etude et simulation des structures à base de GalnAs/GaAs et GalnAsN/GaAs pour le photovoltaïque

Proposé par : Aissat Abdelkader et El-Bey Moussa

Année Universitaire 2012-2013

Ce travail a été effectué au laboratoire LATSI département d'électronique l'université de Saad Dahleb –Blida.

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

Tous mes remerciements à monsieur le professeur **Aissat Abdelkader** pour m'avoir encadré, de la confiance qu'il m'a témoigné au cours de cette année et d'avoir dirigé mes travaux de thèse mais surtout pour leurs esprits paternel. à mes promoteurs **EL BEY .M & Bestam R**, pour leurs entières dispositions, et leurs judicieux conseils, leurs patiences et leurs gentillesses.

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

Mes remerciements vont egalement à mes enseignantes de spécialité microsystèmes Mm bougherira H et Mm bougherira N, Mm naceur, Mm Assad pour leurs conseils scientifiques et leurs disponibilités sans limite.

Je tiens également à remercier tous ceux qui ont participé de près ou de loin à la réalisation de ce travail.

Dédicaces

Avec amour et fierté, je dédie ce modeste travail

A mes chers parents, que ALLAH les bénisse dans son vaste paradis.

A mes adorables frères Samir et Yacine qui ont été toujours présent à mes côtés.

A mes sœurs F.Zohra, Hafssa, Imen et Nassima qui me soutient toujours.

A tout ma famille : paternelle et maternelle

A mon chère binôme Abd-elhak qu'avec il j'ai partagé des moments inoubliables pendant et en dehors du travail.

A tous mes amis Walid, Taki, yahia, Madjid, Mossaab, Zaki, Abdallah, Fathi, Mohamed, Ali, Nounou, Zinou et à toute ma promotion je leurs dédie à tous ce travail en signe de ma sincère amitié.

A mes enseignants et responsables.

<<Abdelmoumene>>

Dédicaces

Avec amour et fierté, je dédie ce modeste travail

A mes très chère parents pour leur soutient morale, qui ont été toujours présent a mes cotes.

A mes frère surtout BOUALEM et mes sœurs.

A tous ma famille : paternelle et maternelle.

A mon chère binôme Abdelmoumene qu'avec il j'ai partagé des moments inoubliables pendant et en dehors du travail.

A tous mes amis Mohamed, I lyesse,Kamel, Oussama,Samir, youcef, fares, zaki, z.Mohamed, Mossab, Fethi, sad-med, I slem, Hadad, Hmed, Omar, M.Alag, I ssam, cousin, Mohdadi, Mounir, Merouane, et a toute ma promotion, particulièrement Ali

A mes enseignants et responsables.

<< Abdelhak >>

م**نخص:**

يشمل هذا العمل النمذجة والمحاكات لكل من هيكلين إعتمادا على نصف نواقل لتطبيقات الكهر وضوئية, قمنا بدراسة تأثير تركيز (الأنديوم) و (الأنديوم والأزوت) على مختلف المعايير لسبيكتي GalnAs و GalnAsN تواليا تتناضد على ركيزة GaAs ,وفي الواقع أن زيادة تركيز (الأنديوم) و (الأنديوم والأزوت) يقلل ونقص من فجوة السبيكتين , وهو ما يعتبر مهما للإمتصاص أكبر قدر ممكن من الطيف الشمسي, تتضمن الدراسة رسومات بيانية التي تبين مختلف التغيرات في العوامل التي تأثر على أداء كل من الهيكلين , الهيكل الأنسب لهذا العمل هو GalnAsN لأنه يملك المردودية الأحسن.

كلمات المفاتيح : الكهروضوئية ; GalnAsN ; GalnAs ; تتناضد ; ركيزة ; In ;N .

Résumé :

Ce travail comporte la modélisation et la simulation des deux structures à base de semi-conducteurs pour une application photovoltaïque. Nous avons étudié l'influence des concentrations « indium » et « indium et azote » sur les différents paramètres des deux alliages GalnAs et GalnAsN respectivement épitaxies sur substrat de GaAs. En effet l'augmentation des densités de « In » et « In,N » diminue le gap des deux alliages, ce qui est très intéressant pour absorber le maximum de spectre solaire. L'étude comprend des graphes donnant les variations des différents facteurs influant sur le rendement des deux strucures. La structure la plus appropriée pour ce travail est GalnAsN/GaAs car elle possède un meilleur rendement.

Mots clés : photovoltaïque; GalnAsN; GalnAs ; épitaxies ; substrat ; In ;N.

Abstract :

This work includes modeling and simulation of two structures based on semiconductors for photovoltaic application. We studied the influence of concentrations "indium" and "indium and nitrogen" on the various parameters of the two GalnAs alloys and GalnAsN respectively epitaxy on GaAs substrate. Indeed the increase in density of "In" and "In, N" decreases the gap of the two alloys, which is very interesting to absorb most of the solar spectrum. The study includes graphs showing changes in various factors affecting the performance of both strucures. The most appropriate structure for this work is GalnAsN / GaAs because it has better performance

Keywords : photovoltaic ; GalnAsN; GalnAs ; epitaxy ; substrate ; In ; N.

Listes des acronymes et abréviations

AM	nombre de masse d'air	
AM1	nombre de masse d'air (le plus court chemin soleil-terre)	
AM1.5	nombre de masse d'air (1.5 supérieur a AM1)	
BAC	Band anticrossing	
BC	Bande de valence	
BV	Bande de conduction	
CFC	Réseau cubique à faces centrées	
D	Diaphragme	
DBC	Décalage de la bande de conduction	
DBV	Décalage de la bande de valence	
EPL	Épitaxie en phase liquide.	
EPV	Épitaxie en phase vapeur.	
EJM	Épitaxie sous jets moléculaires.	
EPVOM	Épitaxie en phase vapeur aux organométalliques.	
EJMOM	Épitaxie sous jets moléculaires aux organométalliques	
FF	Facteur de forme	
HS	Hétérostructure	
HH	la bande des trous lourds	
LH	la bandes des trous legers	
MBC	Minimum de la bande de conduction	
MBE	Épitaxie par jet moléculaire (molecular beam epitaxy)	
MBV	Maximum de la bande de valence	
MOVPE	Metalorganic Vapor Phase Epitaxy, aussi appelé MOCVD	
MPQ	Multipuits quantique	
PV	photovoltaique	
PQ	Puits quantique	
STC	Les conditions normalisées d'ensoleiment (1000W/m2, 25 °C,	
	Spectre solaire AM 1,5)	
ZCE	Zone de Charge d'Espace	

a $a_{Epicouche}$ $a_{Substrat}$ a_{\perp} a_{\parallel} a_c	Paramètre de maille (relaxé) Paramètre de maille de la couche épitaxie. Paramètre de maille du substrat. Paramètre de maille de l'épicouche dans la direction de croissance Paramètre de maille de l'épicouche dans la direction parallèle potentiels hydrostatiques de déformation de la bande de conduction	
a_v	potentiels hydrostatiques de déformation de la bande de valence	
b	le potentiel de déformation tétragonale	
C _{ij}	Coefficients élastiques	
D_P	Constante de diffusion des trous	
Е _{нн}	Energie de la bande de trous lourds.	
E_{LH}	Energie de la bande de trous légers.	
E	Champ électrique	
Eg	Énergie du gap	
EQ	L'éfficacité quantique	
$E_g^{cont,com}$	Gap contraint en compression	
$E_g^{cont,ten}$	Gap contraint en tension	
E_{g}^{cont}	Gap contraint	
E _c L'énergie du bas de la bande de conduction		
$E_{\mathbf{v}}$	L'énergie du haut de la bande de valence	
$E_{V,moy}$	La bande de valence d'énergie moyenne	
e C	charge de l'électron	
eV É	Electronvolt	
hh 1 Ih T h C	Frous lourds Frous légers Constante de Planck	

h_c Epaisseur critique

- Im Courant qui correspondent à la puissance maximale fournie par la cellule photovoltaïque
- I_{CC} Courant de court-circuit.
- j_{dif} Courant de diffusion des porteurs minoritaires.
- j_{PH} Courant photo généré
- j(V) La caractéristique courant tension
- j₀ Le courant de diffusion des porteurs minoritaires
- k Est un coefficient égal à 1 dans le cas d'un super-réseau ; à 2 pour un puits quantique ; 4 dans le cas d'une couche unique
- L1 L'épaisseur du semi-conducteur
- L L'épaisseur critique
- L_P Longueur de diffusion des trous.
- **N** Indique un semi-conducteur dont les porteurs de charges majoritaires sont des électrons
- P Indique un semi-conducteur dont les porteurs de charges majoritaires sont des trous
- r Indice de réfraction
- *ŋ* Le rendement de la cellule photovoltaïque
- P La puissance
- Pm La puissance maximale
- Pc La puissance crête
- q la charge d'électron
- r L'indice de réfraction
- S La surface du photogénérateur.
- SC Semi-conducteur
- T Température
- UV Ultraviolet
- V volt

- Vm Tension qui correspond à la puissance maximale
- Vco Tension de circuit ouvert
- Wc Watts-crête
- y Teneur en azote (N) dans GaAs1-yNy
- x Teneur en indium(In) dans InxGa1-xAs(N)
- Δ_a Désaccord paramétrique
- Y Coefficient de Poisson
- \mathcal{E}_{\parallel} Tenseur de la déformation parallèle.
- \mathcal{E}_{\perp} Tenseur de la déformation perpendiculaire
- Δ_0 Energie de décalage des bandes des trous spin-splittée.
- µm micromètre
- α Coefficient d'absorption
- ε Fonction diélectrique complexe
- ε La contrainte
- α Coefficient d'absorption
- $\lambda \qquad \ \ Longueur \ d'onde \ des \ photons \ incident$

 $\Delta E_{V,moy}^{hyd}$ Le décalage énergétique de centre de gravité de la bande de valence en K=0 induits par la contrainte hydrostatique

 ΔE_c^{hyd} Le décalage énergétique de centre de gravité de la bande conduction en K=0 induits par la contrainte hydrostatique

 ΔE_{hh}^{cisa} Le décalage énergétique induit par la contrainte de cisaillement des trous lourds

- ΔE_{lh}^{cisa} Le décalage énergétique induit par la contrainte de cisaillement constituant des trous légers
- \mathcal{E}_{\parallel} La composante parallèle perpendiculaire du tenseur de la déformation
- \mathcal{E}_{\perp} La composante perpendiculaire du tenseur de la déformation
- Δ_0 Energie de décalage des bandes des trous spin-splittée.

Table des matières

Introduction générale :			
СН	APITRI	E 1 Généralité :	4
1.1	Introdu	uction	4
1.2	Histori	que du photovItaique	5
1.3	Le mar	ché économique	7
	1.3.1	Le marché mondiale photovoltaïque	7
	1.3.2	L'efficacité des cellules solaires	9
1.4	La con	version photovoltaïque	10
	1.4.1	L'interaction photon / semiconducteur	10
	1.4.2	Principe de fonctionnement d'une cellule pv	12
1.5	La cellu	ule solaire	12
	1.5.1	Schéma électrique équivalent d'une cellule solaire	13
	1.5.2	Caractéristique électrique d'une cellule pv	14
		a Vco :Tension de circuit ouvert	14
		b lcc :Courant de court-circuit	15
		c Pm: Point de puissance maximale	15
		d FF : Facteur de forme	15
		e Puissance-crete et rendement	15
1.6	Matéri	aux utiles pour la fabrication des cellules solaires	16
	1.6.1	Le silicium	16
	1.6.2	Les semiconducteurs	17
1.7	Conclu	sion	18
СН	APITRI	E 2 Les matériaux a bas des semi-conducteurs III-V	19
2.1	Introdu	uction	
2.2	Les alli	ages	
2.3	Les par	ramètres de maille d'un alliage III-V	
2.4	Proprie	été physique des semi-conducteurs	22
	2.4.1	Structure cristalline	22
	2.4.2	Structure de bande	23
2.5	Les hét	érostructures	23
2.6	Notion	de couche contrainte et épaisseur critique	24
	2.6.1	Couche contrainte	24
	2.6.2	Epaisseur critique	26
2.7	Effet de	e la contrainte sur les semi-conducteur III-V	27
	2.7.1	Effet de la contrainte sur la structure de bandes	27
	2.7.2	Effet de la contrainte sur le gap	29

2.8 Mécanis	sme de conduction	33
2.9 Conclus	ion	35
CHAPITRE	3 Simulation de la cellule solaire	
2.1 Introdu	ction	26
3.1 IIIII0000 3.2 Simulat	ion des deux structures	
3.2 JITTUIAU 2.2.1	Parametre de maille du ternaire Ga. In As	
3.2.1	Le désaccorde de maille	
3.2.2	L'énaisseur critique be	
324	L'effet de la contrainte sur le gan	40
3.2.4	L'effet de la contrainte sur le coefficient d'absorption	
326	L'efficacité quantique	43
327	Caractéristique photovoltaïque	44
01217	a Caractérstique courant-tension	44
	b La puissance	45
	c Tension de circuit ouvert et courant de court-circuit	
	d Facteur de Forme	
	e Rendement de la structure Ga _{1-x} In _x As /GaAs	
3.3 Simulati	on de la structure Ga _{1-x} In _x As1 _{-y} N _y /GaAs	
3.3.1	Parametre de maille du guaternaire	49
3.3.2	L'etude de la contrainte	50
3.3.3	L'épaisseur critique hc	51
3.3.4	L'effet de la contrainte sur le gap	52
3.3.5	L'effet de la contrainte sur le coefficient d'absorption	53
3.3.6	L'efficacité quantique	55
3.3.7	Caractéristique photovoltaïque	57
	a Caractérstique courant-tension	57
	b La puissance	59
	c Tension de circuit ouvert et courant de court-circuit	62
	d Facteur de Forme	65
	e Rendement de la structure Ga _{1-x} In _x As /GaAs	68
3.4 Compa	raison entre les deux structures étudies	70
3.4.1	Tableaux récapitulatifs des résultats des simulations	70
3.4.2	Interprétation des résultats	70
	3.5Conclusion	73
Conclusio	n générale	74
Annex		75
Bibliograp	ohie	78

Liste des figures

CHAPITRE 1 Généralité4	
Figure 1.1: Normes de mesures du spectre d'énergie lumineuse émis par le sole	il,
notion de la convention AM	.5
Figure 1.2 : Spectres Solaires relevés dans plusieurs conditions selon la conventio	n
AM. Source NREL solar spectrum	.5
Figure 1.3: le photovoltaïque dans le monde	.6
Figure 1.4 : Exploitation de l'énergie solaire dans le monde	.7
Figure 1.5 : Variation du coût de l'énergie solaire en États-Unis	.8
Figure 1.6 : Répartition de la production actuelle et future par pays	.8
Figure 1.7: l'efficacité et le coût pour la première, deuxième et troisième génération	n
photovoltaïque	.9
Figure 1.8 : Les meilleures efficacités de cellules de recherches1	0
Figure 1.9 : Transitions inter-bandes d'électrons dans un semi-conducteur. Le cas	a)
correspond à un semi-conducteur à gap direct, le cas b) à un gap indirect1	1
Figure 1.10 : Schéma de la structure d'une cellule photovoltaïque illustration	n
(a) phénomène de photogénération (b) collecte des porteurs pour différente	es
longueurs d'ondes1	2
Figure 1.11: Schéma électrique équivalent d'une cellule photovoltaïque1	3
Figure1.12 : Courbe courant-tension de la cellule photovoltaïque14	1
CHAPITRE 2 Les matériaux a bas des semi-conducteurs III-V1	9
Figure 2.1 : Evolution de l'énergie de bande interdite et du paramètre cristall	in
des alliages des composés III-V2	21
Figure 2.2 : Maille élémentaire de la structure zinc blende2	22
Figure 2.3 : Vue de dessus de la structure zinc blende2	22
Figure 2-4 : Diagrammes de bandes d'énergie GaAs, GaN et InN en phase cubique2	23
Figure 2-5 : Configuration des bandes de conduction et de valence dans ur	ıe
hétérostructure de type I (a) et une hétérostructure de type II (b)2	<u>2</u> 4

Figure 2.6 : Couche totalement contrainte a) cas (a _{Epicouche} > a _{Substrat}) Compression, b)
cas (a _{Epicouche} < a _{Substrat}) allongement25
Figure 2.7 : Propagation de dislocation dans la couche épitaxieé épaisse
Figure 2.8 : Structure de bande d'un semiconducteur à gap direct a) non contrainte b)
contrainte en compression c)contrainte en tension28
CHAPITRE 3 Simulation de la cellule solaire
Figure 3.1 : variation du paramètre de maille de ternaire Ga _(1-x) In _x As en fonction de la
concentration de l'indium
Figure 3.2 : variation du désaccord de maille entre le ternaire et le substrat
Ga _(1-x) In _(x) As/GaAs
Figure 3.3: variation de l'épaisseur critique Hc en fonction de la concentration
d'indium
Figure 3.4 : Variation du gap en fonction de la concentration d'indium40
Figure 3.5: Variation du coefficient d'absorption en fonction de l'énergie incidente. 41
Figure 3.6: Variation du coefficient d'absorption en fonction de la longueur d'onde42
Figure 3.7 : la variation de l'efficacité quantique en fonction de la longueur
d'onde43
Figure 3.8 : caractéristique courant- tension du ternaire GalnAs44
Figure 3.9 : variation de la puissance en fonction de la tension45
Figure 3.10 : la tension de circuit ouvert et le courant de court-circuit en fonction de
la concentration de l'indium46
Figure 3.11 :variation du facteur de forme en fonction de la concentration d'indiu47
Figure 3.12 : variation du rendement en fonction de la concentration d'indium48
Figure 3.13 : variation des paramètres de maille de la structure GalnAsN en fonction
de la composition x de l'indium et y de l'azote49
Figure 3.14 : Variation du désaccord de maille en fonction des concentrations
d'indium et de l'azote dans le quaternaire50
Figure 3.15 : L'épaisseur critique en fonction de la composition x de l'indium et y de
l'azote
Figure 3.16 : variation du gap de l'alliage Ga(1-x)In _x As _y N _(1-y) sur le GaAs en fonction

des concentration d'indium et d'azote52
Figure 3.17: variation du coéfficient d'absorption en fonction des concentration
d'indium et d'azote53
Figure 3.18 : variation de l'efficacité quantique en fonction de la longueur d'onde55
Figure 3.19: caractéristique courant- tension du quaternaire GalnAsN
Figure 3.20 : la puissance dans le quaternaire en fonction de la tension60
Figure 3.21 : variation du courant de court-circuit et tension du circuit ouvert62
Figure 3.22 : variation du facteur de forme en fonction de la concentration d'azote et
d'indium
Figure 3.23 : variation de rendement en fonction de la concentration d'azote et
d'indium

Liste des tableaux

CHAPITRE 2 Les matériaux a bas des semi-conducteurs III-V	19
Tableau 2.1 : Extrait de la classification périodique des éléments	19
Tableau 2.2 : paramètre de maille des alliages binaires	22
Annex	75
Tableaux récapitulatifs des résultats des simulations	75
Tableau de Mendeleïev	77

La demande en énergie est sans cesse en augmentation suite au développement de l'industrie, du transport et de la croissance à travers le monde. Selon la majorité des prévisionnistes, la consommation d'énergie primaire commerciale devrait doubler d'ici 2030, puis tripler aux environs de 2050. C'est pour cette raison que la production d'énergie est une problématique centrale de notre société avec des retombées à tous les niveaux (économique, géopolitique, environnemental, social...) [1].

Actuellement, la production mondiale d'énergie repose à plus de 85% sur les énergies fossiles (pétrole, charbon, gaz naturel, uranium) [2]. Cependant, ces dernières sont disponibles en quantité limitée et leurs délais d'épuisement sont estimés à quelques décennies. De plus, la combustion des énergies fossiles entraîne l'augmentation des émissions de gaz à effet de serre qui confronte la planète aux phénomènes de réchauffement climatique. La production d'électricité repose sur les énergies fossiles (pétrole, charbon, gaz). Les sources d'énergies renouvelables sous leurs multiples formes : hydroélectrique, solaire photovoltaïque, biomasse, géothermie profonde... permettent de produire cette énergie électrique sans dégrader l'environnement et elles constituent des ressources pratiquement inépuisables.

La quantité totale d'énergie reçue par le rayonnement solaire au niveau du sol pendant une semaine dépasse l'énergie productible par l'ensemble des réserves mondiales de pétrole, de charbon, de gaz et d'uranium [1]. Si l'on prend l'exemple du soleil, une surface de 145000km² (4% de la surface des déserts arides) de panneaux photovoltaïques (PV) suffirait à couvrir la totalité des besoins énergétiques mondiaux [3]

De plus, ces systèmes exigent peu d'entretien, sont fiables, modulables, non polluants et silencieux. La conversion photovoltaïque consiste à convertir directement l'énergie lumineuse en énergie électrique. Cette transformation est effectuée par les cellules solaires. La première cellule à homojonction en silicium a été fabriquée en 1954 au Laboratoire BELL avec un rendement voisin de 6%. En 1960, ce rendement a été porté à une valeur supérieure à 10% pour les cellules solaires à base de silicium monocristallin. De nombreux travaux de recherche sur l'amélioration du rendement de conversion ont été publiés. Jusqu'à 1972, les applications des cellules solaires étaient réservées à un seul usage à cause de leur prix de revient très élevé et leur faible rendement [4].

Une cellule photovoltaïque est un composant électronique qui, exposé à la lumière (photons), génère de l'électricité. Le courant obtenu est fonction de la lumière incidente. L'électricité produite est un courant continu et elle est en fonction de l'éclairement de la cellule photovoltaïque. Les cellules les plus répandues sont constituées de semi-conducteurs, principalement à base de silicium (Si) et plus rarement d'autres semi-conducteurs tels que Séléniure de cuivre et d'indium. Elles se présentent généralement sous la forme de fines plaques d'une dizaine de centimètres de côté, prises en sandwich entre deux contacts métalliques, pour une épaisseur de l'ordre de 200 µm. Les cellules sont réunies dans des modules solaires photovoltaïques ou panneaux solaires, en fonction de la puissance recherchée.

Cependant, il est à noter que l'augmentation du rendement a été considérée plus déterminante que la réduction du coût, car toute amélioration des performances et toute optimisation des paramètres influe sur le prix du watt crête Wc produit. Dans ce cas, l'objectif essentiel est l'augmentation du rendement. Ceci explique et justifie les recherches concernant l'étude des programmes numériques de conception, de modélisation et de simulation [4].

Les travaux présentés à travers cette mémoire sont orientés vers l'étude et la simulation des structure à base de GalnAs/GaAs, GalnAsN/GaAs pour le photovoltaïque et l'amélioration du rendement de ces deux structure ; ce rapport se décompose de la façon suivante :

Le premier chapitre donne la présentation du fonctionnement de la cellule photovoltaïque. Le principe de la conversion photovoltaïque est rappelé, les Caractéristiques électriques et les Matériaux utiles pour la fabrication des cellules solaires.

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

Le troisième chapitre est axé sur la simulation et la comparaison des deux structures GalnAs/GaAs, GalnAsN/GaAs afin de déterminer la plus performante pour les applications photovoltaïques (optoélectronique).

1.1 Introduction

Le soleil décharge continuellement une énorme quantité d'énergie radiante dans le système solaire, et la terre intercepte une toute petite partie de l'énergie solaire rayonnée dans l'espace. Une moyenne de 1367 watts atteint chaque mètre carré du bord externe de l'atmosphère terrestre (pour une distance moyenne Terre-soleil de 150 Millions de km), c'est ce que l'on appelle la constante solaire égale à 1367W/m².

La part d'énergie reçue sur la surface de la terre dépend de l'épaisseur de l'atmosphère à traverser. Celle-ci est caractérisée par le nombre de masse d'air AM.

Le rayonnement qui atteint le niveau de la mer à midi dans un ciel clair est de 1000 W/m2 et est décrit en tant que rayonnement de la masse d'air "1" (ou AM1). Lorsque le soleil se déplace plus bas dans le ciel, la lumière traverse une plus grande épaisseur d'air, perdant plus d'énergie. Puisque le soleil n'est au zénith que durant peu de temps, la masse d'air est donc plus grande en permanence et l'énergie disponible est donc inférieure à 1000 W/m2. Les scientifiques ont donné un nom au spectre standard de la lumière du soleil sur la surface de la terre : AM1.5G ou AM1.5D.

Le nombre "1.5" indique que le parcours de la lumière dans l'atmosphère est 1.5 fois supérieur au parcours le plus court du soleil, c'est-à-dire lorsqu'il est au zénith (correspondant à une inclinaison du soleil de 45° par rapport au zénith).

Le « G » représente le rayonnement "global" incluant rayonnement direct et rayonnement diffus. Le rayonnement diffus concerne tout le rayonnement dont la trajectoire entre le soleil et le point d'observation n'est pas géométriquement rectiligne et qui est dispersé ou réfléchi par l'atmosphère ou bien le sol. En considérant ceci, on obtient une référence du spectre global AM1.5G avec une puissance de 1000W/m², et la lettre « D » tient compte seulement du rayonnement direct [5].



Figure 1-1 : Normes de mesures du spectre d'énergie lumineuse émis par le soleil, notion de la convention AM [5].



Figure 1-2 : Spectres Solaires relevés dans plusieurs conditions selon la convention AM. [5]

1.2 Historique du photovoltaïque

C'est en 1839 qu'Edmond Becquerel découvre le processus de l'utilisation de l'ensoleillement pour produire du courant électrique dans un matériau solide. En 1873 Willoughby Smith découvre la photoconductivité du sélénium, et en 1875, Werner Von Siemens expose devant l'académie des sciences de Berlin un article sur l'effet photovoltaïque dans les semiconducteurs, en 1877 W.G. Adams et R.E. Day développent une jonction solide à base de sélénium dont le rendement était de l'ordre de 1%. Cependant, la première véritable vision de l'énergie photovoltaïque est due à Charles Fritts, qui, en reprenant les travaux d'Adams et Day, a cherché à établir un développement industriel des cellules au sélénium. En 1883 Fritts pensait pouvoir faire concurrence aux technologies de production électrique naissantes de l'époque, sa vision était que chaque bâtiment pouvait être équipé de cellules solaires et être indépendant de la distribution centralisée. Albert Einstein a découvert, en travaillant sur l'effet photoélectrique, que la lumière n'avait pas qu'un caractère ondulatoire, mais que son énergie était portée par des particules [6], les photons. L'énergie d'un photon est donnée par la relation :

$E = h. c/\lambda$

Où h est la constante de Planck, *c* la vitesse de la lumière et λ sa longueur d'onde. Ainsi, plus la longueur d'onde est courte, plus l'énergie du photon est grande. Cette découverte value à Albert Einstein le prix Nobel en 1905.

Cependant, au cours des années 80, la technologie photovoltaïque terrestre a progressé régulièrement par la mise en place de plusieurs centrales de quelques mégawatts, et même est devenue familière des consommateurs à travers de nombreux produits de faible puissance y faisant appel : montres, calculatrices, balises radio et météorologiques, pompes et réfrigérateurs solaires [5].



10 filiales, 40 distributeurs, 80 pays

Figure 1-3: le photovoltaïque dans le monde [5].

1.3 Analyse économique

1.3.1 Le marché mondial photovoltaïque

Le marché de l'énergie solaire représente actuellement plus de 10 milliards de dollars par an, et l'industrie à un taux de croissance de 30% à 40% par an, comme il est indiqué sur la figure 1.4. Malgré cette croissance régulière du marché du PV, on notera qu'en 2010 toute la capacité mondiale utilisée est environ 32.9 Mwaat, ce qui est équivalent à 0.09% seulement de l'utilisation mondiale d'énergie. Le coût de l'électricité solaire aux Etats-Unis est autour de 0.20\$/kWh, soit environ deux fois plus que son concurrent fossile 0.12 \$/kWh. Ce prix élevé de l'électricité générée par le soleil est principalement dû au coût de fabrication élevé de la cellule solaire et des coûts d'installation [7].



Figure 1.4 : Exploitation de l'énergie solaire dans le monde [7].



Figure 1.5 : Variation du coût de l'énergie solaire en États-Unis [7].



Figure 1.6 : Répartition de la production actuelle et future par pays [8].

1.3.2 L'efficacité des cellules solaires

Pour que l'énergie solaire obtienne économiquement une bonne position à long terme, il faut que l'efficacité de conversion d'énergie du PV soit encore plus grande avec un coût de fabrication plus faible. Ceci mène au concept de troisième génération PV, qui a une capacité de conversion supérieure à celle des cellules à simple jonction, tout en maintenant l'avantage du coût des cellules solaires en couche mince de deuxième génération. Cette troisième génération PV avec un prix de (0.10\$/KWh) réalise les visions futuristes comme indiqué sur la (figure1.7), qui est équivalent au prix de l'électricité de base fossile au Etats Unis. En Algérie cette énergie sera rentable en 2030 comme indique les prévisions de la (figure 1.5). Cependant pour les régions de Sud où les distances entre les localités sont très grandes, cette énergie sera immédiatement rentable grâce à l'économie du coût de transport de l'énergie fossile. Le développement des cellules solaire à haute efficacité est représenté sur la (Figure1.8) [7].



Figure 1.7: l'efficacité et le coût pour la première, deuxième et troisième génération photovoltaïque [7].



Figure 1.8 : Les meilleures efficacités de cellules de recherches [9].

1.4 La conversion photovoltaïque

La conversion photovoltaïque est la transformation directe d'une énergie électromagnétique en énergie électrique continue. Cette énergie électromagnétique est le plus souvent le rayonnement solaire. En ce sens, l'énergie photovoltaïque utilise la fusion nucléaire. Pour des applications photovoltaïques, c'est le nombre de photons par unité de longueur d'onde qui est réellement utile puisque ce sont les photons qui créent des paires électron-trou. Par exemple, avec un rendement quantique de 1, chaque photon crée une paire électron-trou. Par conséquent, le nombre de photons en fonction de la longueur d'onde est l'information pratique à connaître dans les applications photovoltaïques.

1.4.1 L'interaction photon/semi-conducteur

L'écart entre la bande de valence et de conduction, ou *gap*, représente une caractéristique fondamentale des semiconducteurs. La figure *I.9* présente les différentes transitions possibles selon la nature du gap. Dans le cas ou gap est

indirect « le silicium », les transitions électroniques entre les extrema des bandes sont obliques, donc non radiatives puisqu'elles impliquent un changement du vecteur d'onde de l'électron. Les électrons du sommet de la bande de valence peuvent toutefois être directement excités vers le minimum relatif central de la bande de conduction grâce à un photon de plus grande énergie. Pour que la transition s'effectue dans le gap indirect, il faut qu'un phonon soit au préalable absorbé (ou émis) par l'électron, afin que le vecteur d'onde de ce dernier corresponde au maximum de la bande de valence, pour absorber un photon (cf. figure I.9. (b)). Notons que la valeur du gap indirect du silicium est de 1,12 *eV* à 300 *K* (ce qui correspond à une longueur d'onde de 1107 nm) [10].

Quand le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence coïncident dans l'espace des k, il s'agit d'un gap direct. Les transitions inter bandes s'effectuent verticalement, et sont donc radiatives (cf. figure I.9. (a)). Ceci illustre le fonctionnement des semi-conducteurs binaires, tels que le GaAs, beaucoup utilisés en optoélectronique.



Figure 1.9 : Transitions inter-bandes d'électrons dans un semi-conducteur. Le cas a) correspond à un semi-conducteur à gap direct, le cas b) à un gap indirect [10].

1.4.2 Principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque

Le principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque est illustré sur la (figure 1.10). Les photons incidents créent des porteurs dans chacune des régions N, P et la zone de charge d'espace. Le comportement de ces porteurs libres diffère suivant le lieu de leur création. Dans les zones électriquement neutres N et P, les photoporteurs minoritaires diffusent, ceux qui atteignent la région de charge d'espace sont propulsés par le champ électrique E vers la région où ils deviennent majoritaires. Ces photoporteurs contribuent donc au courant par leur diffusion, ils créent un photocourant de diffusion. Dans la zone de charges d'espaces, les paires électrons-trous créées par les photons sont dissociées par le champ électrique E, l'électron est propulsé vers la région type N et le trou vers la région de type P. ces porteurs donnent naissance à un photocourant de génération. Ces deux contributions s'ajoutent pour créer un photocourant résultant l_{ph}.[7 - 1]



Figure 1.10 : Schéma de la structure d'une cellule photovoltaïque illustration (a) phénomène de photogénération (b) collecte des porteurs pour différentes longueurs d'ondes [1].

1.5 La cellule solaire

La structure la plus simple d'une cellule photovoltaïque comporte une jonction entre deux zones dopées différemment du même matériau (homojonction) ou entre deux matériaux différents (hétérojonction).

1.5.1 Schéma électrique équivalent d'une cellule solaire

La figure 1.11 correspond propose un modèle électrique de la cellule photovoltaïque. Pour tenir compte des limitations de la cellule et calculer le courant réellement délivré à la charge du circuit extérieur, on introduit un modèle comportant une résistance série et une résistance parallèle. Ce modèle est représenté par le schéma électrique suivant (Figure 1.11) [4].



Figure 1.11: Schéma électrique équivalent d'une cellule photovoltaïque

L'équation du courant devient :

$$I = Iph - I1 - I2 - Ip$$
(I.1)
$$I = Iph - I01 \left(\exp\left(\frac{q(V - IRS)}{n1kT}\right) - 1 \right) - I02 \left(\exp\left(\frac{q(V - IRS)}{n2kT}\right) - 1 \right) - \frac{V - IF}{Rp}$$

Le schéma électrique équivalent d'une cellule solaire est ainsi composé d'une source de courant et de deux diodes en parallèle. La source de courant modélise le courant photogénéré lph. La première diode (facteur d'idéalité n1 \approx 1) correspond au courant de diffusion dans la base et l'émetteur. I01 est le courant de saturation dû à ce phénomène. I2 est le courant de génération/recombinaison où l'effet tunnel dans la zone de charge d'espace, avec I02 le courant de saturation et n2 le facteur d'idéalité de la seconde diode (n2 \approx 2) [4].

(1.2)

1.5.2 Caractéristiques électriques d'une cellule photovoltaïque

Une cellule photovoltaïque est caractérisée par des données issues de l'observation de sa caractéristique **I(V)** - le courant en fonction de la tension sous illumination qui débite un certain courant, sous une différence de potentiel (ou « tension » en langage courant).

Nous allons décrire ici cette relation courant-tension (Figure 1.12) qui conditionne le fonctionnement électrique du photogénérateur.



Figure 1.12 : Courbe courant-tension de la cellule photovoltaïque.

Plusieurs paramètres importants caractérisent la courbe couranttension d'une cellule photovoltaïque [11] :

a Vco : Tension de circuit ouvert

Si l'on place une photopile sous une source lumineuse constante, sans aucun récepteur, elle peut générer à ses bornes une tension continue maximale, dite tension de circuit ouvert Vco ou tension à vide.

On la mesure à l'aide d'un voltmètre. Cette tension est de l'ordre de 0,7 V pour une cellule élémentaire (elle varie avec la technologie et l'éclairement). Un photogénérateur étant une association de cellules élémentaires, la tension à vide V*co* sera typiquement égale à

Où *n* est le nombre de cellules.

Par exemple, Vco = 4,2 V si n = 6 cellules en série.

La tension maximale que cette photopile peut délivrer sous l'éclairement considéré est de 4,2 V. Mais, dans cet état, la photopile ne débite aucun courant et ne peut alimenter aucun récepteur.

C'est sous une tension inférieure que la photopile sera utilisée, afin qu'elle débite tension **et** courant pour alimenter le récepteur.

b Icc : Courant de court-circuit :

À l'inverse du point de circuit ouvert, lorsqu'on place le photogénérateur en court-circuit, il débite son courant maximal, mais aucune tension. C'est le courant que l'on peut mesurer en branchement direct sur un ampèremètre.

On appelle ce courant maximal à tension nulle courant de court-circuit.

c Pm : Point de puissance maximale :

L'utilisation optimale d'une photopile consiste à alimenter une charge sous la tension maximale et à un courant maximal.

En effet, suivant la formule P = UI, pour que la puissance soit maximale : il faut être dans les conditions où le produit UI est maximal : c'est le point de charge idéal de la photopile, ou point de puissance maximale Pm (figure précédente).

Im et Vm : courant et tension qui correspondent à la puissance maximale Pm fournie par la cellule photovoltaïque avec :

$$P_m = I_m * V_m$$

d FF : facteur de forme :

Le nom "facteur de forme" (fill factor) dérive de la représentation graphique. Il est défini par la relation suivante :

$$\mathsf{FF} = \frac{\mathrm{Im} \ast \mathrm{Vm}}{\mathrm{Icc} \ast \mathrm{Vco}}$$

Il est égal au rapport de la surface du rectangle Pm défini par la Figure1.10, sur celle du rectangle dont les cotés mesurent VCO et ICC. Plus ce paramètre est élevé, meilleure est l'efficacité de conversion.

e Puissance-crête et rendement:

La puissance maximale est fonction de l'éclairement. Lorsqu'il s'agit de la puissance maximale dans les conditions normalisées d'ensoleillement STC (1 000W/m2, 25 °C, spectre solaire AM 1,5), on parle alors de watts-crête (Wc) ou de puissance- crête.

Le rendement **n** de la cellule qui correspond au rapport entre la puissance électrique maximale fournie par la cellule et la puissance solaire incidente :

$$\eta = \frac{Im * Vm}{P \text{ incidente}} = \frac{FF * Icc * Vco}{P \text{ incidente}}$$

Ce rendement peut être amélioré en augmentant le facteur de forme, le courant de court-circuit et la tension à circuit ouvert. Le rendement de conversion est un paramètre essentiel. En effet, la seule connaissance de sa valeur permet d'évaluer les performances de la cellule.

$$\eta = \frac{Pm}{E * S}$$
$$[\eta] = \frac{W}{(W/m^2).m^2}$$

Où **S** est la surface du photogénérateur.

E est la puissance maximale dans les conditions normalisées d'ensoleillement.

On peut calculer ce rendement pour différents éclairements, mais le plus souvent, c'est dans les conditions STC qu'il est donné. On le calcule donc avec la puissance crête :

$$\eta = \frac{Pc}{1000 * S}$$

Exemple de calcul :

Prenons un panneau en silicium polycristallin de 40 Wc (2,35 A/17 V) d'une surface de 360 cm^2 :

$$\eta = \frac{40}{1000 * 0.36} = 0.11$$

Ce panneau a un rendement (surface totale) de 11 % sous 1 000 W/m2.

1.6 Matériaux utiles pour la fabrication des cellules solaires

1.6.1 Le silicium [10]

C'est le semi-conducteur le plus utilisé et est disponible en quantité incalculable à la surface de la terre, puisque présent dans le sable sous forme de silice et de silicates : il s'agit du silicium (Si). C'est ce silicium qui compose les circuits intégrés, utilisés massivement dans l'électronique.

L'industrie photovoltaïque est concentrée à plus de 90% sur l'utilisation du silicium comme matériau de base. Ce semi-conducteur présente en effet, différents avantages : il est abondant à la surface du globe car facilement extrait à partir du sable ; il n'est pas toxique ; il possède un oxyde naturel (SiO₂) présentant d'excellentes propriétés électroniques et il peut se doper facilement (avec le phosphore ou le bore). Son seul véritable inconvénient est :

- Gap indirect à 1,1 eV. Ceci entraîne une absorption du rayonnement plus faible qu'avec un matériau à gap direct : pour absorber 90% du spectre solaire, il faudra utiliser une épaisseur de 100 µm pour le silicium, alors que seulement 1 µm de GaAs suffit.
- la largeur de bande interdite du silicium fait qu'il n'est pas le mieux adapté pour capter la part optimale du spectre solaire (entre 1 et 1,7 eV) : le GaAs, avec une largeur de bande interdite de 1,38 eV, permet d'accéder à des rendements théoriques plus élevés.

1.6.2 Les semiconducteurs III-V

Les premiers travaux sur les alliages III-V-N ont vu le jour il y a quarante ans [1-4]. Ces alliages ont été préparés souvent par des techniques de croissance dans des conditions proches de l'équilibre, par épitaxie en phase liquide ou vapeur (EPL-EPV), essentiellement pour obtenir des couches massives.

La difficulté d'incorporation de l'azote s'explique par des considérations thermodynamiques qui prédisent une solubilité limitée de l'azote dans les matériaux III-V (solubilité infinitésimale ~1014 cm⁻³ dans le GaAs à 650 °C) sous des conditions proches de l'équilibre. Pour ces concentrations faibles, on parle du dopage iso-électronique par l'azote.

Le progrès des techniques de croissance hors équilibre comme l'épitaxie (EJM) et l'épitaxie SOUS iets moléculaires en phase vapeur aux organométalliques (EPVOM) dans les années quatre-vingt ont permis la réalisation d'hétérostructures semi-conductrices à base de GaAsN 00 InGaAsN. Des concentrations record ont été enregistrées pour GaAsN en utilisant l'épitaxie sous jets moléculaires aux organométalliques (EJMOM); cette technique a permis d'atteindre une concentration d'azote de l'ordre de 10%. Concernant l'InGaAsN, l'équipe de croissance de Hohnsdorf a réussi à incorporer 4,5 % d'azote avec 16 % d'indium.

Les alliages III-V-N sont devenus un tremplin vers une nouvelle famille de semiconducteurs à faible gap qui ouvrent de nombreuses applications potentielles, matérialisées très rapidement par le développement des dispositifs lasers à base de GalnAsN et le développement des cellules solaires à base des multi puits quantiques GalnAsN/GaAs.

1.7 Conclusion

Ce chapitre, nous a permis de comprendre le principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque et de déduire la caractéristique courant tension et les matériaux utiles pour la fabrication des cellules solaires.

Chapitre 2 Les matériaux a base semi-

conducteurs III-V

2.1 Introduction

Les matériaux semi-conducteurs III-V sont des corps composés formés à partir d'un élément de la III colonne et d'un élément de la V colonne de la classification périodique de Mendeleïev. Ils sont obtenus, soit par tirage de monocristaux massifs, soit par croissance épitaxiale de couches minces [11], le tableau 2-1 regroupe un extrait de cette classification (les chiffres en haut et en bas représentent respectivement le nombre atomique et la masse atomique)

	IV	V
_{10.81} ⁵ B	_{12.01} ⁶ C	_{14.01} ⁷ N
_{26.98} ¹³ AI	_{28.09} ¹⁴ Si	_{30.97} ¹⁵ P
69.74 ³¹ Ga	_{72.59} ³² Ge	_{74.92} ³³ As
_{114.82} ⁴⁹ ln	_{118.69} ⁵⁰ Sn	_{121.75} ⁵¹ Sb

Tableau 2-1 : Extrait de la classification périodique des éléments [12].

2.2 Les alliages

L'intérêt pratique des semi-conducteurs III-V est encore considérablement renforcé par la possibilité de réaliser des alliages par substitution partielle de l'un des éléments par un autre élément de la même colonne. On sait par exemple obtenir des alliages ternaires, ou quaternaires qui sont identifié de la façon suivante [12] :

- Ternaires : S'il y a substitution de 2 atomes sur l'un des sous réseaux, soit, A x A[/] (1 - x)B Exemple: Ga x In(1-x) P D, lorsque la composition exacte compte peu, on écrit tout court GalnP.
- Quaternaires 1+3: S'il y a substitution de 3 atomes sur des sous réseaux soit : A x A[/] y A^{//} (1-x-y) B. Exemple Ga x In y AI (1-x-y) As.
- Quaternaires 2+2 : S'il y a substitution de 2 atomes sur chacun des deux sous-réseaux, soit : A x A (1-x) B y B (1-y). Exemple Ga x In (1- x) P y As (1 -y).

La plupart des solutions solides ainsi réalisées sont complètes, la loi de Vegard (relation linéaire entre le paramètre de réseau et la composition) est approximativement suivie, et on observe une évolution progressive et régulière des propriétés (dont la bande interdite et les paramètres cristallins) en fonction du taux de substitution.

Il est donc possible de former un solide dit ternaire ou quaternaire en « mélangeant » deux ou trois semi-conducteurs III-V. L'alliage semiconducteur se réalise pour obtenir des matériaux de largeur de bande interdite variante ainsi que les propriétés optiques simultanément avec l'incorporation d'azote et d'indium, La figure (2.2) montre la variation d'énergie de gap des semi-conducteurs III-V en fonction du paramètre de maille de telle façon que la diminution de ce dernier implique une augmentation d'énergie de gap.



Figure 2.1 Evolution de l'énergie de bande interdite et du paramètre cristallin des alliages des composés III-V [13]

2.3 Le paramètre de maille d'un alliage III-V

Le paramètre de maille d'un alliage à base des semi-conducteurs III-V dépend fortement de la nature des éléments chimiques mis en jeu. Ainsi dans les cas des structures ternaires et quaternaires, l'incorporation d'indium dans la maille cristalline de GaAs augmente le paramètre de maille *a* du ternaire et l'incorporation de l'azote dans le quaternaire décroit ces paramètres de maille afin de créer un alliage quaternaire [14].

Il est donc possible de calculer les paramètres de maille d'un solide dit ternaire ou quaternaire en utilisent la loi de vegard [15]:
Cas d'un quaternaire :
$$a_{(Ga_{(1-x)}In_xAs_{(1-y)}N_y)} = xya_{(InN)} + (1-x)ya_{(GaN)} + y(1-x)ya_{(GaN)} + y(1-x)ya_{(GAN)$$

$$x(1-y)a_{(InAs)} + (1-x)(1-y)a_{(GaAs)}$$
(2.1)

Cas d'un ternaire : $a_{(Ga_{(1-x)}In_xAs)} = xa_{(InAs)} + (1-x)a_{(GaAs)}$ (2.2)

Le tableau 2.2 [16] donne le paramètre de maille des alliages binaires semiconducteurs III-V utilisés dans ce travail.

	GaAS	InAs	GaN	InN
a(A°)	5.653	6.058	4.5	4.98

Tableau 2.2 : paramètre de maille des alliages binaires.

2.4 Propriété physique des SC III-V

2.4.1 Structure cristalline

Les semiconducteurs III-V cristallisent dans la structure zinc blende ou würtzite. Dans notre étude, c'est la structure zinc blende représentée sur les figures 2.2 et 2.3 qui nous intéressent. Elle est caractérisée par deux sous-réseaux à faces centrées décalés l'un par rapport à l'autre d'un quart de la diagonale principale du cube élémentaire [14].



Figure 2.2 : Maille élémentaire de la structure zinc blende. [14]



Figure 2.3 : Vue de dessus de la structure zinc blende.[14]

2.4.2 Structure de bande

Les composés à gap direct ont des transitions électriques les moins énergétiques entre la bande de valence et la bande de conduction et peuvent se faire avec conservation du vecteur d'onde K (sans l'intervention des phonons) comme L'arséniure de gallium et le nitrure de galium et le nitrure de l'indium [12].



Figure 2-4 : Diagrammes de bandes d'énergie GaAs, GaN et InN en phase cubique [12] [17].

2.5 Les hétérostructures [18]

Différents types de semiconducteurs, tels que les composés III-V ou II-VI et leurs alliages respectifs, peuvent être épitaxies les uns sur les autres pour former différents types d'hétérostructures.

Considérons une hétérostructure constituée d'une couche de semiconducteur SC1 d'épaisseur L1 en sandwich entre deux couches d'un semiconducteur SC2 tel que Eg1<Eg2.

Le diagramme énergétique de la structure est représenté sur la figure (2.5). Dans le cas de la figure (2-5-a), les extrema des bandes de valence et de conduction sont situés dans le même matériau, c'est-à-dire dans la même région de l'espace ; ces hétérostructures sont dites de type I. Dans le cas de la figure (2-5-b), ces extrema sont spatialement séparés, ces hétérostructures sont dites de type II.

Il est évident que ces deux types d'hétérostructure présentent des propriétés différentes. Si des porteurs sont injectés dans la structure, ces porteurs sont confinés dans les puits de potentiel que constituent les extrema des bandes. Dans l'hétérostructure de type I les électrons et les trous sont piégés dans le même semiconducteur (SC1), et leurs recombinaisons seront importantes. Tandis que dans l'hétérostructure de type II les électrons et les trous sont spatialement séparés et ces recombinaisons seront beaucoup moins probables.



Figure 2-5 : Configuration des bandes de conduction et de valence dans une hétérostructure de type I (a) et une hétérostructure de type II (b) [17].

2.6 Notion de couche contrainte et épaisseur critique

2.6.1 Couche contrainte

Lors de l'épitaxie d'un matériau sur un substrat de paramètre de maille différent, un désaccord paramétrique est généré, ce désaccord peut être rattrapé de deux façons différentes [19]:

- Dans le cas où les couches épitaxiées sont suffisamment fines, la maille du matériau épitaxié se déforme de manière élastique de telle sorte que le paramètre de maille

s'accorde au paramètre du substrat dans la direction parallèle à l'interface. Dans la direction perpendiculaire à l'interface de croissance le réseau se déforme en s'allongeant ou se comprimant selon que le paramètre de maille de la couche est plus petit ou plus grand que celui du substrat, dans ce cas la couche est considérée comme étant totalement contrainte (figure2.6).



Figure 2.6 : Couche totalement contrainte a) cas (a_{Epicouche}> a_{Substrat}) compression,

b) cas (a_{Epicouche} < a_{Substrat}) allongement.

Dans le cas d'une couche épitaxieé plus épaisse, la déformation de la maille du matériau ne suffit plus à équilibrer l'énergie mécanique engendrée par la croissance.
Le désaccord est alors rattrapé par la génération de dislocations à l'interface de croissance. Ces dislocations se propagent du substrat vers l'interface de croissance et la couche commence à relaxer.



Figure 2.7 : Propagation de dislocation dans la couche épitaxieé épaisse.

2.6.2 Epaisseur critique h_c

L'épaisseur au-delà de laquelle la couche épitaxieé commence à relaxer est appelée épaisseur critique. Cette épaisseur critique dépend des propriétés mécaniques des matériaux (coefficients élastiques C_{ij}), ainsi que du degré de désaccord paramétrique Δ_a (équation 2.3) entre le substrat et la couche épitaxieé. Si l'épaisseur de la couche épitaxie dépasse la valeur de l'épaisseur critique, les mailles ne subissent plus les contraintes mécaniques imposées par le substrat et le paramètre de maille atteint celui du matériau massif. Le réseau est totalement relaxé [20].

 $\Delta a = \frac{aepit-asub}{aepit}$ (2. 3)

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

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

a_{epit} : Paramètre de maille de la couche épitaxieé.

- Δ_a : Désaccord paramétrique.
- Y : Coefficient de Poisson donné par :

$$Y = \frac{C_{12}}{C_{11} + C_{12}} \tag{2.5}$$

 C_{ij} : Les coefficients élastiques (cm⁻²).

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

2.7 Effet de la contrainte sur les semi-conducteurs III-V

2.7.1 Effet de la contrainte sur la structure de bandes

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



Figure 2.8 : Structure de bande d'un semiconducteur à gap direct a) non contrainte b) contrainte en compression c)contrainte en tension

2.7.2 Effet de la contrainte sur le gap

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

$$\mathcal{E}_{\parallel} = \frac{a_{\parallel} - a}{a} \tag{2.6}$$

$$\mathcal{E}_{\perp} = \frac{a_{\perp} - a}{a} \tag{2.7}$$

Pour une structure totalement contrainte:

$$a_{\parallel} = a_{sub} \tag{2.8}$$

$$\mathcal{E}_{\perp} = -2 \times \frac{\mathcal{C}_{12}}{\mathcal{C}_{11}} \times \mathcal{E}_{\parallel}$$
(2.9)

En absence de contrainte, les bandes de trous lourds et de trous légers sont isotropes et dégénérées au centre de la zone de Brillouin, et la bande de trous spinsplittée est située à une énergie Δ_0 en dessous de ces deux bandes. Le centre de gravité de la bande de valence d'énergie moyenne $E_{V,moy}$ se trouve par conséquent à $\frac{\Delta_0}{3}$ en dessous du haut de la bande de valence en k=0 (figure 2.8.a).

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

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

*E*_{*LH*}: Energie de la bande de trous légers.

 Δ_0 : Energie de décalage des bandes des trous spin-splittée.

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

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

La contrainte de cisaillement, qui lève la dégénérescence des états énergétiques des trous lourds et des trous légers en k = 0.

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

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

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

$$\Delta E_{V,moy}^{hyd} = a_{\nu} (2\mathcal{E}_{\parallel} + \mathcal{E}_{\perp})$$
(2.11)

 $\Delta E_c^{hyd} = a_c (2\mathcal{E}_{\parallel} + \mathcal{E}_{\perp}) \tag{2.12}$

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

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

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

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

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

avec :

$$\delta E^{cisa} = 2.b.\left(\mathcal{E}_{\parallel} + \mathcal{E}_{\perp}\right) \tag{2.16}$$

où b est le potentiel de déformation tétragone.

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

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

$$E_{v} = E_{v,moy} + \frac{\Delta_{0}}{3} + \Delta E_{v,moy}^{hyd} + max \left(\Delta E_{hh}^{cisa}, \Delta E_{lh}^{cisa}\right)$$
(2.17)

 E_c : L'énergie du bas de la bande de conduction est :

$$E_{c} = E_{v,moy} + \frac{\Delta_{0}}{3} + E_{g} + \Delta E_{c}^{hyd}$$
(2.18)

Dans ces expressions $E_{v,moy}$, l'éclatement Spin-orbite Δ_0 et l'énergie de gap sont relatifs au matériau non contraint. via les équations (2.17) et (2.18) on peut déterminer l'équation du Gap contraint E_g^{cont} :

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

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

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

Dans le cas d'une couche soumise à une contrainte en tension la bande des trous lourds est au-dessous de la bande des trous légers (figure 2.8.c) et l'on a :

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

Donc l'équation (2.19) devient pour une couche en compression :

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

Et pour une couche en tension :

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

La détermination du Gap contraint nécessite la connaissance du Gap non contraint E_g et l'éclatement spin-orbite Δ_0 de la couche relaxée, les constantes élastiques C_{ij} de la couche, les potentiels de déformation hydrostatique a_c et a_v , ainsi que le potentiel de déformation tétragone b.

Dans le cas où la couche contrainte est une solution solide ternaire (exemple $A_{(1-x)}B_xC$), ces paramètres peuvent être déterminés par interpolation linéaire, sauf pour les énergies E_g et Δ_0 qui sont déterminées par l'expression suivante :

$$E_{A_{(1-x)}B_xC} = (1-x)E_{AC} + xE_{BC} - x(1-x)C_{AC-BC}$$
(2.22)

avec :

E : est E_g ou Δ_0 .

C_{AC-BC} : Terme de Boeing.

2.8 Mécanisme de conduction

La densité de courant dans la structure, est donnée par [24]:

$$\vec{j} = \vec{J}_{PH} - \vec{J}_{dif} \tag{2.24}$$

avec

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

j_{PH}: Courant photo généré.

Le courant de diffusion des porteurs minoritaires est donné par [23]:

$$j_{dif} = j_0 \left(1 - e^{\frac{qV}{KT}} \right) \tag{2.25}$$

avec :

$$j_0 = \frac{qni^2 D_P}{N_D L_P} + \frac{qni^2 D_n}{N_a L_n}$$
(2.26)

D_P: Constante de diffusion des trous.

L_P: Longueur de diffusion des trous.

 D_n : Constante de diffusion des trous.

- L_n : Longueur de diffusion des trous.
- N_a , $N_D\colon la \ densit \acute{e} \ de \ dopage$.
- V: Tension de polarisation.

ni : la concentration en porteurs du semi-conducteur intrinseque .

Le courant photo généré est donné par[24] :

$$j_{ph} = q \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} F * EQ \, d\lambda \tag{2.27}$$

avec :

$$q = 1.6 * 10^{-19} C \tag{2.28}$$

(2.29)

 λ = la longueur d'onde de spectre solaire.

$$F = 1.24 / \lambda.$$
 (2.30)

On remplace (2.25) et (2.27) dans l'équation (2.24) la caractéristique courant tension à l'obscurité de la structure MIS est exprimée par :

$$j(V) = q \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} F * EQ \, d\lambda + j_0 \left(1 - e^{\frac{qV}{KT}}\right)$$
(2.31)

2.9 Conclusion :

Dans ce chapitre nous avons rappelé les notions fondamentales des semiconducteurs III-V et leurs propriétés, ainsi les différents types de la structure cristalline. Puis nous nous sommes penchés sur l'étude des propriétés des puits quantiques qui découlent des hétérostructures et plus particulièrement les puits quantiques sous contrainte.

Le chapitre suivant est consacré à l'étude et la simulation des deux structure GalnAs/GaAs, GalnAsN/GaAs et leur propriété.

3.1 Introduction

La réalisation des structures photovoltaïques est précédée par une étape essentielle c'est la simulation numérique qui doit comporter les caractéristiques et les propriétés de ces structures. Le passage par cette étape nous permet de minimiser les inconvénients et d'améliorer les performances de nos cellules solaires.

Ce chapitre est basé à la simulation et la détermination des caractéristiques des deux structures GalnAs/GaAs et GalnAsN/GaAs afin d'avoir les pourcentages appropriés des éléments qui rentrent dans la composante. Ces simulations nous permettent aussi de faire une comparaison concluante entre les deux structures afin de choisir la meilleure entre elles pour la réalisation des cellules photovoltaïques.

3.2 Simulation de la structure Ga (1-x) ln(x) As/GaAs

3.2.1 Paramètre de maille du ternaire Ga (1-x) In(x) As

On utilise la loi de Végard donnée par l'équation (2.2) Pour déterminer l'effet de la concentration d'indium sur le paramètre de maille de l'alliage In_(x)Ga (1-x) As.

La figure (3.1) montre la variation du paramètre de maille $Ga_{(1-x)}In_xAs$ en fonction de la composition x de l'indium. On constate que le paramètre de maille de la structure $Ga_{(1-x)}In_xAs$ augmente de 7.5% sur tout l'intervalle [0 1], cette augmentation est due à la force de torsion appliquée sur le paramètre de maille du GaAs, car on constate, pour x=0, le paramètre de maille de la structure est égal à celui du GaAs. En ajoutant l'indium qui est caractérisé par un paramètre de maille plus grand que celui du GaAs

dans l'alliage, l'InAs impose sa maille au GaAs, donc ce dernier subi une force de torsion et augmente le paramètre de maille jusqu'à 6.08 A°, pour x=1.



Figure 3.1 : variation du paramètre de maille de ternaire $Ga_{(1-x)}In_xAs$ en fonction de la concentration de l'indium .

3.2.2 Le désaccord de maille

Nous avons utilisé l'équation (2.3) pour calculer le désaccord de maille, la figure (3.2) nous montre la variation du désaccord de maille entre le ternaire et le substrat $Ga_{(1-x)}In_{(x)}As/GaAs$ en fonction de la variation des concentrations de l'indium dans le ternaire, on remarque une croissance du désaccord sur tout l'intervalle [0, 1] de concentration de l'indium.



Figure 3.2 : variation du désaccord de maille entre le ternaire et le substrat $Ga_{(1-x)}In_{(x)}As/GaAs$

3.2.3 Epaisseur critique hc

Pour calculer l'épaisseur critique du système on utilise le modèle le plus classique, celui de K. Koksal et B. Gonul [21] donné par l'équation (2.4), la figure (3.3) nous montre une diminution de l'épaisseur critique avec l'augmentation de la concentration d'indium, on remarque que les meilleurs résultats sont obtenus pour les faibles concentrations d'indium.



Figure 3.3 : variation de l'épaisseur critique Hc en fonction de la concentration d'indium

3.2.4 L'effet de la contrainte sur le gap

Nous avons utilisé l'équation (2.19) pour calculer l'énergie de gap contraint, la figure (3.4) montre la variation du gap de l'alliage $Ga_{(1-x)}In_{(x)}As$ contraint sur le GaAs, on remarque une réduction de la largeur de la bande interdite avec l'augmentation de la concentration d'indium, et comme nous avons une seule contrainte (contrainte en tension), on remarque que le gap des trous lourds(Eg_{hh}) est toujours inférieur à celui des trous légers (Eg_{Lh}).



Figure 3.4 : Variation du gap en fonction de la concentration d'indium.

3.2.5 L'effet de la contrainte sur le coefficient d'absorption

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

Le modèle suivant désigne le coefficient d'absorption α :

$$\alpha$$
= 2.2*10^6.* $\sqrt{(E - Eg)./E)}$ (3.1)
E=1.24./ λ

 λ : est la longueur d'onde du spectre solaire.



Figure 3.5: Variation du coefficient d'absorption en fonction de l'énergie du photon incidente.

A cause de la décroissance du gap en fonction de la concentration d'indium, une augmentation du coefficient d'absorption est obtenue (Figure 3 .5).On remarque aussi une saturation du coefficient d'absorption avec l'augmentation de l'energie du photon incident, cette saturation peut etre expliquée ; qu'avec une forte énergie incidente l'excitation des électrons devient plus large, c-a-d tous les électrons de la bande de valence ont l'énergie nécessaire pour se deplacer vers la bande de conduction.



Figure 3.6: Variation du coefficient d'absorption en fonction de la longueur d'onde du photon incident

On remarque que pour les énergies inferieurs a 0.4 eV le coefficient d'absorption est nul quelle que soit la concentration d'indium car cette énergie est insuffisante pour que les électrons puissent franchir la bande interdite de l'alliage ternaire ,dés que l'énergie dépasse cette valeur le coefficient d'absorption augmente d'une maniére forte (Figure 3.6).

3.2.6 L'efficacité quantique

Nous avons simulé l'efficacité quantique en fonction de la longueur d'onde des photons incidents pour plusieurs concentrations d'indium à partir de l'équation suivante EQ [24] :

$$EQ = (1-r)(1-e^{-\alpha L})$$
 (3.2)

r : l'indice de réfraction.

 α : coefficient d'absorption.

L : l'épaisseur critique.



Figure 3.7 : la variation de l'efficacité quantique en fonction de la longueur d'onde des photons incidents

On remarque que hors l'intervalle $\lambda \in [0.4 \ 0.8] \ \mu m$ de longueur d'onde des photons incident, l'efficacité quantique est nul quelle que soit la concentration d'indium, dès que λ dépasse 0.4 μ m l'efficacité quantique augmente d'une manier forte, On remarque dans l'intervalle précédent une croissance de l'efficacité quantique avec l'augmentation des concentrations d'indium.

3.2.7 Caractéristiques photovoltaïques

a Caractéristique courant-tension

La simulation représentée par la figure (3.8) calculée par l'équation (2.30) illustre la caractéristique courant-tension de la structure étudiée pour plusieurs concentrations d'indium. Une amélioration d'amplitude de la densité de courant a été observée avec l'augmentation de la concentration d'indium, cette amélioration entraine un accroissement de la puissance délivrée par cette structure figure (3.8) et (3.9).



Figure 3.8 : caractéristique courant- tension du ternaire GalnAs.

b La puissance



Figure 3.9 : variation de la puissance en fonction de la tension

c Tension de circuit ouvert et courant de court-circuit

La figure (3.10) montre la simulation de la tension de circuit ouvert donné par Vco [7] : $V_{CO} = \frac{Eg}{q} - \frac{kt}{q} \left(\frac{JO}{Jcc}\right)$ (3.3)

et le courant de court-circuit. On observe une augmentation du courant de courtcircuit avec la croissance de concentration d'indium et une diminution de la tension de circuit ouvert.



Figure 3.10 : Variation de la tension de circuit ouvert et le courant de court-circuit en fonction de la concentration de l'indium

d Facteur de forme

On rappelle que l'expression du facteur de forme : $FF = \frac{\text{Im}*\text{Vm}}{\text{Icc}*\text{Vco}}$ (3.4)

est égale au rapport de la surface du rectangle Pm défini par la figure (1.6) et (3.8), sur celle du rectangle dont les côtés mesurent VCO et ICC. Puis que il y 'a une croissance de puissance avec l'augmentation d'indium figure (3.8), cette croissance entraine un accroissement du facteur de forme qui détermine la qualité électrique de la cellule. on observe une augmentation qui varie de 39.25% à 42.3% du facteur de forme en fonction de la concentration d'indium figure (3.11).



Figure 3.11 : variation du facteur de forme en fonction de la concentration d'indium

e Rendement de la structure Ga_(1-x)In_(x)As/GaAs

Nous avons utilisé la formule suivant : $R = \frac{Im*Vm}{P \text{ incidente}} = \frac{FF*Icc*Vco}{P \text{ incidente}}$ (3.5) pour calculer le rendement de la structure étudiée, la figure (3.12) montre la variation du ce rendement en fonction de la concentration d'indium. Un rendement variant entre 7.5 et 18.2 est obtenu, on remarque que le rendement augmente avec l'augmentation de la concentration d'indium.



Figure 3.12 : variation du rendement en fonction de la concentration d'indium.

3.3 Simulation de la structure Ga (1-x) In(x) As(1-y) N(y) /GaAs

3.3.1 Paramètre de maille du quaternaire

On utilise la loi de Végard donnée par l'équation (2.1) Pour déterminer l'effet des concentrations d'indium et d'azote sur les intervalles [0,0.4] et [0, 0.05] respectivement dans le quaternaire $Ga_{(1-x)}In_{(x)} As_{(1-y)} N_{(y)}$, on constate un accroissement de 0.16 Angström sur tout l'intervalle des concentrations d'indium, et un décroissement d'environ 0.05 Angström sur tout l'intervalle des concentrations d'azote. (Figure 3.13).



Figure 3.13 : variation des paramètres de maille de la structure GalnAsN en fonction de la composition x de l'indium et y de l'azote.

3.3.2 L'étude de la contrainte

A partir de l'équation (2.3) on a calculé le désaccord de maille de notre structure $Ga_{(1-x)}In_x As_{(1-y)}N_y/GaAs$ par rapport à la variation de la densité d'indium et d'azote dans l'alliage $Ga_{(1-x)}In_x As_{(1-y)}N_y$ (figure 3.14). Avec les concentrations d'indium qui appartiennent à l'intervalle [0, 14%[le désaccord de maille est positif ce qui implique une contrainte en compression et pour la concentration 14% d'indium le désaccord et nul ce qui implique un accord de maille, et avec l'augmentation de la concentration d'indium plus que 14%, le désaccord de maille est négatif ce qui traduit l'apparition d'une contrainte en tension à l'interface de contact de l'alliage et le substrat.



Figure 3.14 : Variation du désaccord de maille en fonction des concentrations de l'indium et de l'azote dans le quaternaire.

3.3.3 Epaisseur critique h_c



GalnAsNGaAs

Figure 3.15 : Variation de l'épaisseur critique en fonction de la composition x de l'indium et y de l'azote.

Remarque : on peut avoir des épaisseurs critique plus élevé mais avec certaines concentration d'indium et d'azote ou l'accord de maille est encore élevé exemple : $x=11\% y=3.9\% => Hc = 1.9 \ 10^6 \ A^\circ$.

On constate que l'indium augmente la contrainte et diminue l'épaisseur critique tandis que l'azote diminue la contrainte et augmenté l'épaisseur critique.

3.3.4 L'effet de la contrainte sur le gap

La figure (3.16) montre la variation du gap de l'alliage $Ga_{(1-x)}In_xAs_yN_{(1-y)}$ contraint sur le GaAs en fonction des concentrations d'indium et d'azote. On remarque une réduction de la largeur de la bande interdite avec l'augmentation de la concentration d'indium et d'azote, et une contrainte en compression sur l'intervalle [0 0.14] d'indium et sur toutes les concentrations d'azote. On peut distinguer cette contrainte par les niveaux énergétiques de la bande de valence c.-à-d. l'énergie des trous lourds(Eg_{hh}) est supérieure à celle des trous légers (Eg_{Lh}).

On constate sur l'intervalle [0.14 1] qu'il y a une contrainte en tension car on remarque que le niveau énergétique des trous légers (Eg_{lh}) est supérieur à celle des trous lourds (Eg_{hh}).



Figure 3.16 : Variation du gap de l'alliage $Ga_{(1-x)}In_x As_y N_{(1-y)}$ sur le GaAs en fonction des concentrations d'indium et d'azote .

3.3.5 L'effet de la contrainte sur le coefficient d'absorption

La figure 3.17 definit la variation du coéfficient d'absorption en fonction des concentrations d'indium et d'azote dans le matériau de la structure GalnAsN/GaAs.



figure 3.17 : variation du coéfficient d'absorption en fonction des concentrations d'indium et d'azote.

3.3.5 L'efficacité quantique

La figure (3.18) montre la variation de l'efficacité quantique en fonction de la longueur d'onde des photons incidents pour différents pourcentages d'azote et d'indium.



b) Gao.8In_{0.2} As_(1-y)N_y



Figure 3.18 : variation de l'efficacité quantique en fonction de la longueur d'onde des photons incidents.

On observe qu'avec l'incorporation d'azote et d'indium on a une amélioration dans l'efficacité quantique EQ [24] :

$$EQ = (1-r)(1-e^{-\alpha L})$$
 (3.2)

r : l'indice de réfraction.

 α : coefficient d'absorption.

L : l'épaisseur critique.

L'accroissement du coefficient d'absorption α avec l'incorporation d'azote et d'indium contribue une amélioration au niveau de l'efficacité quantique, et on remarque une augmentation dans l'intervalle de la longueur d'onde des photons incidents absorbe du spectre avec l'augmentation de concentration de l'indium.

3.3.6 Caractéristiques photovoltaïques

a Caractéristique courant-tension

Nous avons simulé la variation de la densité de courant en fonction de la tension pour différents pourcentages d'azote figure (3.19).




d) $Ga_{0.60}In_{0.40} As_{(1-y)}N_y$

Figure 3.19: caractéristique courant- tension du quaternaire GalnAsN.

On remarque qu'il y a une amélioration importante dans la densité de courant avec l'incorporation d'azote, et une légère amélioration avec l'introduction de l'indium.

b La puissance

Nous avons simulé la variation de la puissance en fonction de la tension pour différents pourcentages d'azote figure (3.20).



Tension (V)

b) Ga0.80In_{0.20} As_(1-y)N_y



d) $Ga_{0.60}In_{0.40}As_{(1-y)}N_y$

Figure 3.20 : Variation de la puissance dans le quaternaire en fonction de la tension

c Tension de circuit ouvert et courant de court-circuit

Nous avons simulé la variation de la Tension de circuit ouvert et courant de courtcircuit en fonction de la concentration d'azote figure (3.21).



b) Ga_{0.80}In_{0.20} As_(1-y)N_y



d) Ga_{0.60}In_{0.40} As_(1-y)N_y

Figure 3.21 : Variation du courant de court-circuit et tension du circuit ouvert en fonction de la concentration de l'azote.

-On remarque qu'avec l'incorporation d'azote et d'indium un accroissement dans le courant de court-circuit lcc et une diminution de la tension de circuit ouvert Vco [7] :

$$V_{\rm CO} = \frac{\rm Eg}{q} - \frac{kt}{q} \left(\frac{\rm Jo}{\rm Jcc}\right)$$
(3.3)

L'augmentation des concentrations d'azote et d'indium produit un abaissement dans le gap de nos structures, ce qui permet d'absorber plus de photons incidents qui participent dans la création de nouvelles paires électron-trou, une amélioration importante dans le courant de court-circuit, et aussi une diminution de la tension de circuit ouvert.

d Facteur de forme

Nous avons simulé la variation du Facteur de forme en fonction de la concentration d'azote figure (3.22).



b) $Ga_{0.80}In_{0.20}As_{(1-y)}N_y$



Figure 3.22 : variation du facteur de forme en fonction des concentrations d'azote et d'indium.

On remarque un accroissement important du facteur de forme avec l'incorporation d'azote tandis que l'incorporation d'indium contribue avec une légère amélioration ; et Puisqu'il y a une croissance dans la puissance avec l'incorporation d'azote et d'indium figure (3.20), cette croissance entraine un accroissement du facteur de forme qui détermine la qualité électrique de la cellule.

e Rendement

Nous avons simulé la variation du rendement en fonction de la concentration d'azote figure (3.23).



a) $Ga_{0.90}In_{0.10} As_{(1-y)}N_y$





Figure 3.23 : variation du rendement en fonction de la concentration d'azote et d'indium.

On observe un accroissement important du rendement avec l'incorporation d'azote tandis que l'incorporation d'indium contribue avec une légère amélioration. Puis que il y 'a une croissance du facteur de forme avec l'incorporation d'azote et d'indium figure (3.23), cette croissance entraine un accroissement du rendement de nos structures.

3.4 Comparaison entre les deux structures étudiées

3.4.1 Tableaux récapitulatifs des résultats des simulations

Les tableaux (annexe) résume les résultats des deux structures obtenues par simulation pour plusieurs concentrations d'indium concernant le ternaire et d'indium et d'azote concernant le quaternaire (contrainte ε , Hc l'épaisseur critique, gap trous lourd, gap trous léger, coefficient d'absorption, courant de court-circuit, tension de circuit ouvert Vco, puissance maximale, FF et finalement le rendement).

3.4.2 Interprétation des résultats

Lorsqu'on a étudié le paramètre de maille de la structure GalnAs/GaAs on a constaté une augmentation d'environ 0.43 Angström sur tout l'intervalle des concentrations de l'indium, alors que quand nous avons varié les concentrations d'indium et d'azote dans le quaternaire $Ga_{(1-x)}In_xAs_yN_{(1-y)}$, on constate une accroissement de 0.16 Angström sur tout l'intervalle des concentrations d'indium, et un décroissement d'environ 0.05 Angström sur tout l'intervalle de concentration d'azote.

Lorsqu'on a étudié La contrainte de la structure GalnAs/GaAs on a constaté une augmentation de 7 % sur tout l'intervalle des concentrations de l'indium, alors que quand nous avons varié les concentrations d'indium et d'azote dans le quaternaire GalnAsN/GaAs, on constate une augmentation de la contrainte de 2.7% sur tout l'intervalle des concentrations d'indium, et dans l'intervalle de l'azote une augmentation d'environ 0.7%. Et pour la concentration 14% d'indium le désaccord est nul ce qui implique un accord de maille.

Pour l'épaisseur critique, Une diminution de l'épaisseur critique avec l'augmentation de la concentration d'indium a été observée dans la structure GalnAs/GaAs tandis que les meilleurs résultats sont obtenus pour x < 26% en Indium, et pour la structure GalnAsN/GaAs, on a remarqué que la contrainte réduit la valeur de l'épaisseur critique, pour cette structure les meilleures valeurs de l'épaisseur sont obtenues pour x variant de 0 à 14% et sur tous l'intervalle de y là où la contrainte est en compression. Alors la présence de l'azote diminue la contrainte ce qui implique une augmentation de l'épaisseur critique.

On peut aussi constater une réduction de la largeur de la bande interdite avec l'augmentation de la concentration d'indium lors de la variation du gap de l'alliage $Ga_{(1-x)}In_{(x)}As$ contraint sur le GaAs, car nous avons une seule contrainte (contrainte en tension), car le gap des trous légers (Eg_{Lh}) est toujours supérieur à celui des trous lourds (Eg_{hh}). Alors que dans la structure GalnAsN/GaAs on a remarqué une réduction de la largeur de la bande interdite avec l'augmentation de la concentration d'indium et une contrainte en compression sur l'intervalle d'indium [0 0.14] est présente. On peut distinguer cette contrainte par les niveaux énergétiques de la bande de valence c.-à-d. la bande des trous lourds(Eg_{hh}) est supérieur à celui des trous légers (Eg_{Lh}), une augmentation du coefficient d'absorption est obtenue.Il y a une saturation du coefficient d'absorption avec l'augmentation de l'energie du photon incident, cette saturation peut etre expliquée ; qu'avec une forte énergie incidente l'excitation des électrons devient plus large, c-a-d tous les électrons de la bande de valence ont l'énergie nécessaire pour se deplacer vers la bande de conduction

On constate sur l'intervalle [0.14 1] de la concentration d'indium qu'il y a une contrainte en tension car on remarque que le niveau énergétique des trous légers (Eg_{Lh}) est supérieur à celui des trous lourds (Eg_{hh}).

Pour l'absorption et l'efficacité quantique on peut dire que dans la structure GalnAs/GaAs à cause de la décroissance du gap en fonction de la concentration d'indium, une augmentation du coefficient d'absorption est obtenue qui contrubue dans l'amélioration de l'efficacité quantique. On dit aussi qu'il y a une saturation du coefficient d'absorption avec l'augmentation de l'energie du photon incident, cette saturation peut etre expliquée ; qu'avec une forte énergie incidente l'excitation des électrons devient plus large c-a-d tous les électrons de la bande de valence ont l'énergie nécessaire pour se deplacer vers la bande de

conduction. Alors que pour la structure GalnAsN leur coéfficient d'absorption est bien augmente avec l'icorporation d'azote et d'indium, et qui atteignent des valeurs mieux que la structure ternaire.

On dit qu'il y a une augmentation de la puissance causée par une saturation du courant délivré par la structure GalnAs/GaAs et cette saturation est due au fort décroissement du gap pour des concentrations d'indium intéressantes, alors que pour la structure GalnAsN/GaAs on peut dire qu'il y a une amélioration dans le courant délivré par cette structure qui entraine un accroissement de la puissance. On obtient des valeurs entre 45.87 et 52.58 mA/Cm² pour des concentrations de 3% à 4 % d'azote et 40% d'indium.

Le facteur de forme de la structure GalnAs/GaAs varie entre 39% et 42.3% alors que celui de la structure GalnAsN/GaAs croit de 35.6% à 41.42%

Le rendement de la structure GalnAs/GaAs varie entre 7.5% et 18.25%, alors que celui de la structure GalnAsN/GaAs augmente de 8.9% à 22%

Après avoir simulé la structure GalnAsN pour des différant concentration de x et y, on constate que le meilleur rendement « 22% » est délivré par la structure $Ga_{1-x}In_xAs_{1-y}N_y$ est obtenue pour une concentration de x= 40% et y= 5%.

Donc au vu de tous ces paramètres, on peut dire à l'issue de notre étude que la structure la plus appropriée pour un meilleur emploi dans le domaine du photovoltaïque est la structure du Ga_{0.60}In_{0.40}As_{0.95}N_{0.05}/GaAs.

3.5 Conclusion :

Dans ce chapitre, nous nous sommes intéressés à l'étude et aux simulations des deux structures GalnAs/GaAs et GalnAsN/GaAs afin de faire une comparaison concluante entre elles et de choisir la meilleure entre elles pour un bon rendement et efficacité.

- Pour la structure GalnAs/GaAs on a trouvé qu'il y'a une seule contrainte en tension, le facteur de forme varie entre 39% et 42.3% et un rendement qui varie entre 7.5% et 18.25%.
- Pour la structure GalnAsN/GaAs on a trouvé qu'il y'a deux contrainte une en compression et une autre en tension, le facteur de forme varie entre 35.6% à 41.42% et un rendement qui varie de 8.9% à 22%.

Donc la structure la plus appropriée à l'utilisation des cellules photovoltaïques est la structure $Ga_{1-x}In_xAs_{1-y}N_y$ /GaAs avec les concentrations de (l'indium) x = 40% et de (l'azote) y = 5% => « $Ga_{0.60}In_{0.40}As_{0.95}N_{0.05}$ /GaAs ».

Dans le cadre de ce travail, nous avons étudié deux structures de puis quantique GalnAs/GaAs et GalnAsN/GaAs qui forme les cellules photovoltaïques.

Dans un premier temps, nous avons présenté le principe de fonctionnement des cellules solaires, les Caractéristiques électriques et les matériaux utiles pour la fabrication des cellules solaires.

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

Dans le troisième chapitre nous avons simulé les deux structures afin de pouvoir les comparer, on a trouvé que la structure GalnAsN/GaAs possède deux contrainte une en compression et une autre en tension, son facteur de forme varie entre **35.6%** à **41.42%** et son rendement qui varie entre **8.9%** à **22%**.

Alors que la structure GalnAs/GaAs a une seule contrainte en tension, le facteur de forme varie entre **39% et 42.3%** et un rendement qui varie de **7.5% et 18.25%**.

Donc la structure la plus appropriée à l'utilisation des cellules photovoltaïques est la structure **GalnAsN/GaAs**.

Tableau de Mendeleïev :



Figure : Tableau périodique de Mendeleïev [25].

[1] Pierre PAPET THÈSE : Nouveaux concepts pour la réalisation de cellules photovoltaïques à contacts interdigités sur substrats minces en silicium cristallin « INSA » L'Institut National des Sciences Appliquées de Lyon (2007).

[2] Bailly, I, Thèse "Cellules Photovoltaïques Organiques", l'Université Bordeaux,(2010).

[3] A. T.SINGO Thèse 'Système d'alimentation photovoltaïque avec stockage hybride pour l'habitat énergétiquement autonome', université Henri Poincaré, Nancy-I, 2010.

[4] Hachemi. H. Magister : Contribution des nc-Si confinés a l'intérieur des couches antireflets dans l'amélioration de la réponse spectrale des cellules solaire conventionnelles. Université de Tlemcen (2011).

[5]DJERIOUAT.K. Magister : Optimisation du rendement des cellules photovoltaiques a heterojonctions GaInP /GaAs Université de Tlemcen (2011).

[6] A. Luque, S. Hegedus. Handbook of Photovoltaic Science and Engineering Universidad Polit ecnica de Madrid, Spain University of Delaware, USA(2003).

[7] Bestam. R. Magister : Modélisation et simulation d'une structure a base de semiconducteur III-V pour le photovoltaïque. Université de be Blida (2011).

[8]Prof. Jean-Marie Tarascon. Publication : Le photovoltaïque principes et filières inorganiques, organiques, hybrides (2011).

[9]http://regard-sur-la-terre.over-blog.com/article-en-chine-a-dunhuang deploiement- des-panneaux-solaires-115152544.html.

[10] Ouddah. M. Magister : Etude du silicium poreux destine aux cellules solaires. Université de Constantine (2009).

[11] Rachid Maraï. Livre : Cellules Solaires Les bases de l'énergie photovoltaïque.EDSF « Editions Technique et scientifiques françaises »

[12] Benaïcha Mouna Magister: Etude des matériaux semi-conducteurs III-V Application à la conversion photovoltaïque. Université Colonel Hadj Lakhder Batna (2007).

[13]GIOVANNI GHIONE Semiconductor Devices for High-Speed Optoélectroniques Cambridge University Press (2009).

[14] Bouragba. T. Thèse : Propriétés de puits quantiques GalnAsN/GaAs. Université Blaise Pascal (2006).

[15] Hector Cotal, C. F., "III–V Multijunction Solar Cells for Concentrating Photovoltaics". Energy & Environmental Science, 174–192, (september 2008).

[16]JOURNAL OF APPLIED PHYSICS Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys.

[17] Fabrice ENJALBERT THESE: Etude des hétérostructures semi-conductrices
III-nitrures et application au laser UV pompé par cathode à micropointes. Université
Joseph Fourier – Grenoble 1

[18] Henry Mathieu. Hervé Fanet. Physique des semiconducteurs et des composants électroniques 6^{iem} édition . paris .2009

[19] Renard, C., "Hétérostructures Antimoniures/Arséniures pour les Applications Optoélectroniques dans le Moyen Infrarouge ", universite paris VII, (30 septembre2005).

[20] Bethoux, J.-M., "Relaxation des Contraintes dans les Hétérostructures

Epaisses (AI,Ga)n : une Piste Originale pour la Réalisation de Diodes

Electroluminescentes à Cavité Résonante'', Université de Nice Sophia-Antipolis, (24 septembre 2004).

[21] K. Koksal, B. G., "Critical Layer Thickness of Galn(n)As(sb) qws on GaAs and InP Substrates for (001) and (111) Orientations". the European Physical Journal (5 may 2009), 211–218.

[22] Ghione, G., "Semiconductor Devices for High-Speed Optoelectronics", Politecnico Ditorino, Italy, Cambridge University Press, (2009).

[23]Gilles.Martel Cours physique solide du solide des composants optonique a base de semiconducteurs. Université de Rouen.

[24] J.C. Rimada . Microelectronics Journal 38(2007) 513–518 Conversion efficiency enhancement of AlGaAs quantum well solar cells.

[25]http://www.futura-sciences.com/uploads/tx_oxcsfutura/tableau-periodiquemendeleiev-fs.gif