الجمهورية الجزائرية الديمقر اطية الشعبية République Algérienne démocratique et populaire

وزارة التطيم الــعـالي و البحث العـلمـي Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique

> جــامعة 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

Badaoui Fatima Zahra

&

Mouella Amira

pour l'obtention du diplôme de Master en Électronique option Micro-optoélectronique

Thème

Etude et simulation d'une structure à base de

GaInAsSb/Si pour le photovoltaïque

Proposé par : Mr. Aissat Abdelkader

Année Universitaire 2013-2014



*Médicaces* 

.A

Mes parents

Mes sœurs

Mon frère

Mes amis

Et Hla mémoire de mon grand-père el

Hadj Qachgar Med Salah que dieu

L'accueil dans son vaste paradis

Amira

# Je dédie ce mémoire:

A mes très chers parents qui sont toujours là pour moi, mon père qui je l'aime très fort et je n'oublierai jamais les mains de ma mère que dieu la protèges dans le paradis car avec ces mains elle a tout fait pour moi.

A mes chers frères et sœurs

A ma grande mère

A mes tantes et oncles

A chaque cousins et cousines

A mes meilleurs amis

Fatima Zahra

# Remerciement

C'est grâce a dieu qui nous a permis de finaliser notre travail et franchir les étapes les plus difficile et de réaliser un vœu très chère alhamdoulillah.

C'est du fond du cœur que nous remercions toute les personnes que nous allons citer pour nous avoir apporté leur bénédiction aide et encouragement et nous prions DIEU tout puissant de les préserver en leur souhaitant joie bonheur et prospérité.

Un grand merci à notre promoteur Monsieur Aissat Abdelkader, pour sa direction, ses orientations, sa grande patience et sa compréhension.

Nos sincères remerciements à Slami Ahmed pour son aide et toutes les

facilités qu'on a eu pour avancer dans notre travail et aussi pour sa patience et sa gentillesse. Egalement pour Belil wafaa

Nous remercions aussi tous a nos professeurs qui nous ont soutenu durant notre Formation à l'Université USDB, et tous ceux qui nous ont aidé dans l'élaboration de ce mémoire.

Un autre merci à nos camarades de l'option MOP qui n'ont cessé de nous encourager tout

Et un grand merci pour Ouanis nassim le soutien morale dans

les moments difficiles qui n'a pas cessé de

m'encourager et me soutenir

Merci enfin à nos parents, pour leurs soutient indéfectible.

*A toutes nos familles pour toute l'aide qu'ils nous ont apporté durons toute cette période.* 

#### ملخص:

طاقة الطيف الشمسي يمتد من 0.5 فولت إلى 3.5 فولت، واسعة جدا وسيتم تشغيلها من قبل أشباه الموصلات واحد، وبالتالي فإن الفكرة هي استخدام سبيكة تتألف من أربعة عناصر الكيميائية في الفجوات المختلفة ل لاستيعاب الحد الأقصى من الطيف الشمسي. ويركز هذا العمل على دراسة ومحاكاة لأشباه الموصلات هيكل القائمة على تطبيق الضوئية. درسنا تناضد على سي الركيزة بسبب الزيادة في إدماج GainAsSb الأول تأثير تركيز الإنديوم على معايير مختلفة من سبائك الإنديوم يقلل من الفجوة التي هي مهتمة جدا لاستيعاب معظم الطيف الشمسي مشابه لإدماج تكوين الأنتيمون منخفضة مما يؤدي إلى انهيار عصابة التكافؤ في شريطين نتيجة لهذا التجزؤ هناك انخفاض فجوة الحزمة التي تم الحصول عليها زيادة العائد النهائي ل29.55% عند تركيز 40% و 12% الإنديوم الأنتيمون

#### Résumé :

L'énergie du spectre solaire s'étend de 0.5 eV à 3.5 eV, un spectre trop large pour être exploité par un seul semi-conducteur, l'idée donc est d'utiliser un alliage composée de quatre éléments chimiques à des gaps différents afin d'absorber le maximum du spectre solaire. Ce travail porte sur l'étude et simulation d'une structure à base de semi-conducteur pour une application photovoltaïque. Nous avons étudié d'abord l'influence de la concentration d'indium sur les différents paramètres de l'alliage GalnAsSb épitaxie sur substrat de Si. En effet l'augmentation de l'incorporation d'indium diminue le gap ce qui est très intéressent pour absorber le maximum de spectre solaire. L'incorporation d'une faible composition d'antimoine provoque un éclatement de la bande de valence en deux sous bandes sous l'effet de cet éclatement il y a une réduction du gap d'où on obtient une augmentation du rendement finale jusqu'au 29.55% pour une concentration de 40% d'indium et 12% d'antimoine.

#### Abstract:

The energy of the solar spectrum extends from 0.5 eV to 3.5 eV, it is a rather wide spectrum to be exploited by a single semiconductor, so the idea is to use allays composed of four elements chemicals of different gap order to absorb the maximum of the solar spectrum. This work focuses on the study and simulation of a structure based semiconductor. We first studied the influence of the concentration of indium on the various parameters of the alloy GaInAsSb epitaxy on Si substrate because of the increase in the incorporation of indium reduces the gap which is very interested to absorb most of the solar spectrum that is similar to the incorporation of a low antimony composition which causes a collapse of the valence band into two bands as a result of this fragmentation there is a reduction the band gap. Thus, we obtained an enhancement of the efficiency until 29.55%

# Sommaire

Introduction générale	. 1
Chapitre I : Etat de l'art	
I.1 Introduction :	. 3
I.2 les semi-conducteurs :	. 3
I.2.1 Généralité :	. 3
I.2.2 Les semi-conducteurs III-V :	. 4
I.3 les composés binaires, ternaires et quaternaires :	. 5
I.3.1 Les composés binaires :	. 5
I.3.2 Les composés ternaires et quaternaires:	. 5
1.4 structure cristalline :	. 7
I.4.1 La structure zinc blende :	. 7
I.4.2 La structure wurtzite :	. 8
I.5 La contrainte :	. 9
I. 6 L'épaisseur critique :	10
I.7 la structure des bande d'énergie des semi-conducteurs III-V :	10
I.7.1 Les semi-conducteur à Gap direct et indirect :	11
I.7.2 Le doppage	13
I.7.3 Effet de température sur le Gap :	14
I.8 Les hétérostructures :	14
1.9 Les proprités optiques:	15
I.10 Photovoltaique :	16
I.10.1 L'effet Photovoltaique :	17
I.10.2 Rayonnement solaire et l'air masse :	17

I.10.2.1 Soleil :	17
I.10.2.2 L'air masse :	18
I.10.2.3 Spectre solaire :	18
I.11 Les différentes technologies de cellule photovoltaique :	20
I.11.1 Le silicium cristallin :	21
I.11.2 Les cellules à couche mince :	23
I.12 L'énergie solaire photovoltaique :	23
I.13 Fonctionnement d'une cellule photovoltaique :	24
I.14 Les constituants de base d'une cellule photovoltaique :	25
I.14.1 Contacts face avant et arriére :	26
I.14.2 La couche anti-reflet :	27
I.14.3 la texturation de surface :	27
I.14.6 Le champ BSF :	27
I.15 Conclusion :	28
I.15 Conclusion : Chapitre II : Etude de la structure GaInAsSb/Si	28
I.15 Conclusion : Chapitre II : Etude de la structure GaInAsSb/Si II.1 Introduction :	28 29
I.15 Conclusion :	28 29 29
I.15 Conclusion :	28 29 29 29
<ul> <li>I.15 Conclusion :</li></ul>	28 29 29 29 30
<ul> <li>I.15 Conclusion :</li> <li>Chapitre II : Etude de la structure GaInAsSb/Si</li> <li>II.1 Introduction :</li> <li>II.2 choix du substrat :</li> <li>II.2.1 Croissance sur Si :</li> <li>II.3 Etude des paramétres électroniques de l'alliage GaInAsSb :</li> <li>II.3.1 Le paramètre de maille :</li> </ul>	28 29 29 29 30 30
<ul> <li>I.15 Conclusion :</li></ul>	28 29 29 30 30 32
<ul> <li>I.15 Conclusion :</li></ul>	28 29 29 30 30 32 33
<ul> <li>I.15 Conclusion :</li> <li>Chapitre II : Etude de la structure GaInAsSb/Si</li> <li>II.1 Introduction :</li> <li>II.2 choix du substrat :</li> <li>II.2.1 Croissance sur Si :</li> <li>II.3 Etude des paramétres électroniques de l'alliage GaInAsSb :</li> <li>II.3.1 Le paramètre de maille :</li> <li>II.3.2 : La contrainte</li> <li>II.3.3: Epaisseur critique</li> <li>II.4.L'energie de la bande interdite :</li> </ul>	28 29 29 30 30 32 33 33
<ul> <li>I.15 Conclusion :</li> <li>Chapitre II : Etude de la structure GaInAsSb/Si</li> <li>II.1 Introduction :</li> <li>II.2 choix du substrat :</li> <li>II.2.1 Croissance sur Si :</li> <li>II.3 Etude des paramétres électroniques de l'alliage GaInAsSb :</li> <li>II.3.1 Le paramètre de maille :</li> <li>II.3.2 : La contrainte</li> <li>II.3.3: Epaisseur critique</li> <li>II.4.1 Détermination du gap non contraint sans éclatement :</li> </ul>	28 29 29 30 30 32 33 35 35
<ul> <li>I.15 Conclusion :</li></ul>	28 29 29 30 30 32 33 35 35 35

II.4.4 Effet de l'antimoine sur la bande de valence :	42
II.5. Propriétés optiques:	44
II.5.1 absorption :	44
II.5.1.1 Etude du coefficient d'absorption :	44
II.5.2. Indice de réfraction :	47
II.5.3 : Coefficient de réflexion	50
II.6 : CONCLUSION	52

# Chapitre III: Résultat et simulation

III.1. Introduction :	53
III.2.Les caractéristiques électriques :	53
III.2.1.Efficacité quantique externe :	53
III.2.2. caractéristique courant tension :	57
III.2.3. Tension de circuit ouvert VCO :	51
III.2.4. : courant de court circuit ICC	51
III.2.5.Puissance électrique p :	53
III.2.6.Facteur de forme FF :	57
III.2.7.Rendement de conversion η :	71
III.3 conclusion :	73
Conclusion générale	74

# **Liste Des Abréviation**

E	Energie de photon
h	constante de planque
С	la vitesse de la lumière dans le vide
λ	longueur d'onde
AM	Air mass (masse d'air)
x-Si:	Silicium poly- cristallin
CdTe	: tellurure de cadmium
ARC:	couches anti-reflet
In:	Indium
Sb:	Antimoine
As:	arsenic
Ga:	gallium
B <sub>C</sub> :	Bande de conduction
BV:	Bande de valence
E <sub>Inc</sub> :	Energie incident
α:	coefficient d'absorption
I <sub>obs</sub> :	courant d'obscurité
q:	charge élémentaire
K:	constant de Boltzmann
Is:	courant de saturation
n:	coefficient d'idéalité
I <sub>ph</sub> :	courant photocourant
$F(\lambda)$ :	spectre solaire

 $EQE(\lambda)$ : efficacité quantique externe

- Icc: courant de court-circuit
- Voc: tension à circuit ouvert
- FF: facteur de forme
- P<sub>max</sub>: puissance maximal
- $\eta$ : rendement de conversion
- P<sub>inc</sub>: puissance incident
- Rs: résistance séries
- Rp: résistance parallèle
- RS( $\lambda$ ): réponse spectral
- R ( $\lambda$ ): réflectivité de la cellule
- w: largeur de la couche active
- EQI: efficacité quantique interne
- A( $\lambda$ ): absorption dans les couches non active
- Eg: Energie de gap
- x: concentration d'indium
- y: concentration d'antimoine
- ε: déformation hydrostatique
- a<sub>s</sub>: paramètre de maille du substrat
- a<sub>c</sub>: paramètre de maille de la couche active
- $\gamma$ : coefficient de poisson
- C<sub>ii:</sub> tenseur d'élasticité
- E<sub>v, moy</sub>: centre de gravité de la bande de valence
- E<sub>HH</sub>: niveau d'Energie des trous lourd
- E<sub>LH</sub>: niveau d'Energie des trous léger
- $\Delta_0$ : Energie de spin orbite
- a<sub>v</sub>: potentiel de déformation dans la bande de valence
- a<sub>C</sub>: potentiel de déformation dans la bande de conduction

 $\Delta E^{sh}$ : décalage énergétique induit par la contrainte de cisaillement

b: potentiel de déformation tetragonale

VBAC: le modèle d'anticroisement de bandes de valence

- A<sub>MN</sub>: paramètre de couplage de l'azote
- $\Delta Ehh$ : décalage d'énergie de la bande de trou lourd
- $\Delta E_{hh}$ : décalage d'énergie de la bande de trou léger
- C: paramètre de Boeing
- E<sup>cont</sup><sub>g</sub>: Energie de gap contraint
- $E^{ncont}_{g}$ : Energie de gap non contraint
- n: indice de réfraction
- A, B, C, D, E: coefficients de Sellmeier
- R: coefficient de réflexion

# <u>Chapitre I</u> <u>Etat de l'art</u>

# **I.1** Introduction

Après les spectaculaires résultats enregistrés dans la technologie Silicium dans le domaine de la microélectronique, la recherche de composants électroniques présentant des propriétés de transport supérieures à celles du Silicium, conduit la plupart des grands laboratoires de recherches à s'intéresser à des nouveaux matériaux et en particulier les composés semi-conducteurs III-V (GaAs, InP, GaN, etc...). Les composants fabriqués à partir de ces semi-conducteurs, qui ont des propriétés physiques remarquables, jouent un rôle majeur dans les applications hyperfréquences, l'électronique de puissance, mais surtout dans le domaine de l'optoélectronique. Ce premier chapitre est consacré en premier lieu sur les notions fondamentales des semi-conducteurs III-V. Nous aborderons par la suite les notions nécessaires sur la source d'énergie exploitée dans le domaine photovoltaïque et les constituants de base de la cellule solaire qui est l'une des nombreuses applications des semi-conducteurs.

## I.2 Les semi-conducteurs

#### I.2.1 Généralités

Les semi-conducteurs sont des matériaux constitués du groupe IV de la classification périodique, ou d'une combinaison de groupes III et V (appelé semi-conducteurs III-V) ou d'une combinaison de groupe II et du groupe VI (appelé semi-conducteurs II-VI). La recherche sur les matériaux semi-conducteurs a commencé au début du 19<sup>ème</sup> siècle. Au fil des années de nombreux semi-conducteurs ont été étudiés. Parmi les plus célèbres, nous trouvons le silicium (Si) et le germanium (Ge) de la colonne IV du tableau périodique **[2]**.

Malgré sa grande domination dans le marché de la microélectronique grâce à sa disponibilité naturelle et son coût moins cher par rapport à d'autres matériaux, le silicium avec son gap indirect reste néanmoins peut efficace et présente des difficultés dans le domaine de l'optoélectronique, il n'y a donc pas une possibilité de réaliser des composants optiques performants avec de tels matériaux. Pour cela, l'utilisation de

3

nouveaux matériaux dans la fabrication des semi-conducteurs est devenue indispensable pour le développement dans ce domaine. Alors, plusieurs chercheurs ont travaillé dans ce cadre, et vers la fin des années 50, une nouvelle gamme de matériaux semi-conducteurs est née, c'est les semi-conducteurs III-V **[3]**.

#### I.2.2 Les semi-conducteurs III-V

Les matériaux semi-conducteurs III-V sont des corps composés formés à partir d'un élément de la colonne III et d'un élément de la colonne V de la classification périodique, Le tableau (I.1) montre un extrait de cette classification. Ces derniers ont des propriétés électroniques très intéressantes en électronique rapide et en optoélectronique. Toutefois, les semi-conducteurs III-V sont rapidement apparus comme les matériaux de choix pour des applications spécialisées. Notamment, l'arséniure de gallium (GaAs) et le phosphure d'indium (InP) se sont distingués par leur grande mobilité électronique qui permet d'obtenir des dispositifs à haute rapidité de commutation en circuiterie électronique, alors que leur bande interdite directe favorise les transitions optiques. Ces propriétés, communes à la plupart des matériaux III-V sont très prisées dans l'élaboration de dispositifs optoélectroniques [3]

B(5)	C(6)	N(7)
0.85	0.7	0.65
2.0	2.5	3.0
Al(13)	Si(14)	P(15)
1.25	1.1	1
1.5	1.8	2.1
Ga(31)	Ge(32)	As(33)
1.3	1.25	1.15
1.6	1.8	2.0
In	Sn	Sb
1.55	1.45	1.45
1.7	1.8	1.9

**Tableau I.1** : éléments de la classification périodique avec leurs rayons atomique et leursélectronégativités selon Pauling.

# I.3 Les semi-conducteurs binaires, ternaires et quaternaires

Il est donc possible de former un solide semi-conducteur dit ternaire ou quaternaire en mélangeant plusieurs éléments des colonnes III et V. Cependant, la structure de cet alliage n'est pas celle d'un cristal parfait, en raison de la distribution aléatoire des atomes sur chaque site de la structure zinc-blende. Afin de décrire les états électroniques de l'alliage, l'approximation du cristal virtuel est souvent utilisée; dans un tel modèle, le potentiel périodique est remplacé par une moyenne. Si on considère par exemple un solide AB<sub>1-x</sub>C<sub>x</sub>; l'atome A prend place dans les sites du premier sous réseau cubique faces centrées (CFC) de la structure zinc-blende, et les atomes B et C occupent aléatoirement, les sites du deuxième sous réseau CFC **[4]** 

#### I.3.1 Les composés binaires

Parmi tous les composés binaires possibles, tous n'ont pas le même intérêt potentiel. L'étude de leurs propriétés, et en particulier de la structure de bandes montre que les éléments les plus légers donnent des composés dont laquelle la bande interdite est large et indirecte, et dans laquelle la masse effective des électrons est élevée. Les composés contenant du bore, de l'aluminium ou de l'azote entrent dans cette catégorie; ils ont en général peu d'intérêt pour l'électronique rapide, qui demande des semi-conducteurs à forte mobilité de porteurs ou pour l'optoélectronique ou une structure de bande directe est nécessaire pour que les transitions optiques soient efficaces. A l'autre extrémité, les éléments lourds comme le thalium ou le bismuth donnent des composés à base de Galium (GaAs, GaSb) ou d'indium (InP, InAs, InSb) dont les propriétés sont les plus intéressantes [5].

#### I.3.2 Les composés ternaires et quaternaires

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 :

- Ternaires : S'il y a substitution de 2 atomes sur l'un des sous réseaux, soit, A<sub>x</sub> B<sub>1-x</sub> C Exemple: Ga<sub>x</sub> In<sub>1-x</sub> P, lorsque la composition exacte compte peu, on écrit tout court GaInP.
- Quaternaires 1+3 : S'il y a substitution de 3 atomes sur des sous réseaux soit :

$A_x B_y C_{1-x-y} D$	Exemple : Ga <sub>x</sub> In <sub>y</sub> Al <sub>1-x-y</sub> As.
-----------------------	-------------------------------------------------------------------

 Quaternaires 2+2 : S'il y a substitution de 2 atomes sur chacun des deux sous réseaux, soit : A<sub>x</sub> B<sub>1-x</sub> C<sub>y</sub> D<sub>1-y</sub> Exemple : Ga<sub>x</sub> In<sub>1-x</sub> P<sub>y</sub> As<sub>1-y</sub>.

Le diagramme de la figure (I.1) montre l'évolution de l'énergie de la bande interdite des alliages des composés III-V en fonction du paramètre de maille 'a' variant avec leur composition. les points du graphe montrent la position des composés binaires, et les lignes représentent l'évolution du gap 'Eg' et du paramètre cristallin en fonction de la composition des alliages ternaires et quaternaires . ce diagramme est donc très important car il permet de connaitre la composition de tout alliage ternaire ou quaternaire susceptible d'être déposé en couche mince, par épitaxie, sur un substrat comme silicium . Les matériaux III-V offrent donc une grande variété d'alliages permettant de moduler leurs propriétés électroniques.



Figure I.1 : L'évolution de l'énergie de bande interdite et du paramètre cristallin des alliages de composés III-V.

## **I.4 Structure cristalline**

Les matériaux semi-conducteurs sont exclusivement des solides cristallins. Leurs propriétés électroniques, optiques, mécaniques et thermiques sont donc liées à la géométrie particulière qui représente l'arrangement des atomes au sein du matériau: le réseau cristallin [6].

La plupart des semi-conducteurs cristallisent selon un système cubique. Le système cubique comprend trois réseaux différents possibles, selon la disposition des atomes comme l'indique la Figure (**I.2**) :

- ✓ Cubique simple : les atomes sont aux sommets du cube.
- ✓ Cubique centré : identique au cubique simple mais avec un atome au centre du cube.
- ✓ Cubique face centrée : identique au cubique simple mais avec un atome au centre de chaque face [7].





Figure I.2 : les réseaux possibles d'un cristal cubique

#### I.4.1 La structure Zinc blende

La plupart des matériaux III-V se cristallisent dans la structure sphalérite dite « Zinc blende » présentée sur la Figure (I.3). Cette structure, qui s'apparente à celle du diamant, est Constituée de deux sous-réseaux cubiques à faces centrées, l'un étant constitué des atomes de l'élément III, l'autre des atomes de l'élément V. Ces deux sous-réseaux sont décalés l'un par rapport à l'autre le long de la diagonale du cube, d'une quantité (a<sub>0</sub>/4, a<sub>0</sub>/4, a<sub>0</sub>/4), a<sub>0</sub> étant le paramètre cristallin, c'est-à-dire la langueur de l'arête du cube élémentaire. La maille élémentaire, à partir de laquelle on peut reconstituer le cristal entier par un ensemble de translations, est formée par un atome de chaque type **[8].** 



Figure I.3 : la structure Zinc-blende.

## I.4.2 La structure Würtzite

Dans les conditions ambiantes, la structure des nitrures-III est la Würtzite, une structure hexagonale. Cette structure est définie par trois paramètres, la largeur d'un côté hexagonale a, la hauteur de la maille élémentaire c, et le paramètre interne u décrivant la séparation des sous réseaux des anions et des cations selon l'axe c .Ce dernier est défini comme étant la longueur de la liaison cation-anion divisée par c. par exemple le GaN et l'InN.

La structure a une maille élémentaire hexagonale qui contient 4 atomes, c'est -à -dire chaque atome de N est entouré par 4 atomes de Ga disposés au sommet d'un tétraèdre et vice-versa ; Cette coordination tétraédrique provoque la symétrie polaire le long de l'axe hexagonale **Figure (I.4) [9].** 



Figure I.4 : Structure de Würtzite

## I.5 La contrainte

L'épitaxie de deux semi-conducteurs de même structure cristalline mais de paramètre de maille initialement différent, provoque une contrainte (**Figure 1.5**). Le matériau constituant la couche de plus grande épaisseur impose sa maille à l'autre au voisinage de l'interface de contact, donc pour les couches suffisamment fines, la maille du matériau épitaxiée se déforme de manière élastique selon le paramètre de la couche épitaxie par rapport à celui du substrat (plus petit ou plus grand), la déformation est soit un allongement « couche en tension », soit un rétrécissement « couche en compression ».



Figure 1.5: illustration des deux types de déformation

a) Couche en tension b) couche en compression

# I.6 Epaisseur critique

Lors de l'épitaxie d'un matériau sur un substrat de paramètre de maille différent, les couches contraintes commencent à relaxer, et génèrent des dislocations qui se propagent de l'interface de contact vers le quaternaire, qui s'accompagne d'une accumulation d'énergie élastique. Cette épaisseur limite est appelée épaisseur critique.

Au-delà de cette épaisseur critique, l'énergie élastique emmagasinée devient suffisante pour générer des défauts structuraux qui relaxent partiellement les contraintes dans le cristal. Le matériau tend alors à reprendre son paramètre de maille, et des dislocations apparaissent à l'interface (relaxation plastique) **[10].** 

L'épaisseur critique dépend directement de la différence du paramètre de maille entre le substrat et la couche (figure I-6).



Figure 1.6 : illustration d'une couche contrainte

a) en compression b) relaxée

# I.7 Structure des bandes d'énergie des semi-conducteurs III-V

Les bandes d'énergie donnent les états d'énergie possibles pour les électrons en fonction de leurs vecteurs d'onde. On les représente donc dans l'espace réciproque, et pour simplifier, dans les directions de plus hautes symétries de la première zone de Brillouin. Elles se décomposent en bandes de conduction la plus haute, la bande de valence la plus basse, et la bande interdite qui les sépare qui détermine principalement les propriétés de transport du semi-conducteur (Figure I.7) [11].



Figure I.7: Schéma de bande d'énergie d'un semi-conducteur

La bande de conduction est vide au zéro absolu, elle est séparée par une bande interdite  $E_g$  de la bande de valence remplie. Sous l'action d'une excitation externe, un électron de la bande valence peut recevoir, sous certaines conditions, l'énergie nécessaire pour passer à la bande de conduction **[12]**.

#### I.7.1 Les semi-conducteurs à Gap direct et indirect

Considérons le gap des différents semi-conducteurs. Le gap est par définition la largeur de la bande interdite, c'est-à-dire la différence d'énergie entre le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence. Les structures de bande représentées dans la Figure **(1.8)** font apparaître deux cas fondamentaux de semi-conducteur. Les semi-conducteurs à gap indirect, dont lesquels le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence sont situés en des points différents de l'espace des k et les semi-conducteurs à gap direct pour lesquels ces extrema sont situés au même point de l'espace des k (au centre de la zone de Brillouin, en k=0).

Dans les semi-conducteurs à gap direct, le minimum central de la bande de conduction correspond à des électrons de faible masse effective, donc très mobiles. Par contre ceux qui

ont un gap indirect, leur bande de conduction correspond à des électrons de grande masse effective, donc ayant une faible mobilité.



Figure I.8 : Structure de bande schématique d'un semi-conducteur à gap direct (à gauche) et à gap indirect (à droite).

Le tableau I.2 résume les deux types d'énergie de gap de quelques semi-conducteurs:

Semi-conducteur	Nature du gap
Si SiC Ge AlP AlAs AlSb	Indirect
GaAs GaSb InP InAs InSb CdTe ZnTe ZnO	Direct

Tableau I.2: les deux types d'énergie de gap de quelques semi-conducteurs

#### I.7.2 Le dopage

Pour augmenter la conductivité des semi-conducteurs on y introduit des impuretés. Ce procédé est appelé dopage. On prend par exemple le silicium Les quatre électrons de valence du silicium permettent de former quatre liaisons covalentes avec un atome voisin, à l'état pur, le silicium dit « intrinsèque » n'est pas très photoconducteur.

#### • Dopage de type N

On remplace un atome de silicium par un atome pentavalent tels que le phosphore P, l'arsenic As et l'antimoine Sb. Quatre d'entre eux assurent les liaisons avec les atomes voisins de silicium et le cinquième resté disponible va être excité vers la bande de conduction très facilement par l'agitation thermique. D'où le nombre d'électron libre qui va fortement augmenter : dans ce cas le nombre de trou est très inférieur au nombre d'électron libre. On obtient ainsi un cristal dopé N (négatif) **Figure (1.9).** 



Figure I-9 : Silicium de type n.

#### • Dopage de type P

De la même façon on introduit des atomes trivalents, ses trois électrons vont assurer les liaisons covalentes avec trois atomes voisins mais laisser un trou au quatrième. Ce trou se déplace de proche en proche dans le cristal pour créer un courant. Ici le nombre de trous est très supérieur au nombre d'électrons libres du cristal intrinsèque, on obtient donc un cristal dopé P (positif), les impuretés utilisées sont souvent du Bore.



Figure I-10 : Silicium de type p.

#### 1.7.3 Effet de température sur le Gap

La largeur de la bande interdite ou l'énergie de gap n'est pas constante, en effet, elle présente une variation avec la température. Dans la plupart des semi-conducteurs cristallisants dans la structure zinc-blende, les bandes interdites directes et indirectes diminuent quand la température s'élève. La relation qui nous donne cette variation est donnée par l'équation pseudo-empirique de Varshni **[13]**.

Eg (t) = Eg(0) 
$$-\frac{A.T^2}{B+T}$$
 (I.1)

Avec A et B sont les paramètres empiriques de Varshni.

# **I.8 Les hétérostructures**

Différents types de semi-conducteurs, 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 semi-conducteur SC1 d'épaisseur L1 en sandwich entre deux couches d'un semi-conducteur SC2 tel que Eg1<Eg2.

Le diagramme énergétique de la structure est représenté sur la Figure(I.11).

 Dans le cas de la (Figure I.11.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 I.11.b), ces extrema sont spatialement séparés, ces hétérostructures sont dites de type II.

Il est évident que ces deux types d'hétérostructures 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 semi-conducteur (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 **[14].** 





# I.9 Les propriétés optiques

Dans cette partie nous sommes intéressées à étudie les propriétés sur laquelle est basé la transformation de la lumière en énergie électrique.

Un rayon lumineux forme de photons entrant en contact sur un matériau solide subit trois manifestations optiques simultanées Figure (I.12) :

- L'absorption.
- La réfraction.
- La réflexion.



Figurel.12: Les trois événements optiques d'un rayon lumineux.

# I.10 Photovoltaïque

Le terme photovoltaïque provient de photo qui signifie lumière, et de voltaïque qui signifie électricité. Les cellules solaires photovoltaïques sont des semi-conducteurs capables de convertir directement la lumière en électricité. Cette conversion est appelée : effet photovoltaïque.

#### l'historique du photovoltaïque

Le scientifique français, Edmond Becquerel, fut le premier à découvrir en 1839 l'effet photovoltaïque. Il a trouvé que certains matériaux pouvaient produire une petite quantité de courant sous l'effet de la lumière. Einstein expliqua ce phénomène en 1912 (et obtient le prix Nobel de physique sur ses travaux en 1921). En 1954, trois chercheurs américains (Char pin, Pearson et Price) des laboratoires BELL mirent au point la première cellule photovoltaïque au silicium avec un rendement de 4%. D'abord une curiosité de laboratoire, les cellules photovoltaïques virent leur première application pour obtenir de l'énergie électrique pour un satellite Vauguard en 1958. Une première maison alimentée par des cellules photovoltaïques fut construite par l'université de Delaware aux états Unis en 1973. En 1983, l'australien Hans Tholstrup construit le "Quiet Achiever", première voiture alimentée par énergie photovoltaïque parcourant une distance de 4 000 km en Australie **[15].** 

Aujourd'hui la technologie photovoltaïque est en plein essor. Aux quatre coins du monde, de nombreuses possibilités d'exploitation sont étudiées, puis expérimentées dans l'espoir d'une commercialisation future.

#### 1.10.1 L'effet photovoltaïque

Lors de l'absorption de la lumière, la génération des paires électron-trou ainsi que la séparation de ces porteurs de charges constituent un processus important non seulement pour les mesures et la détection de lumière (photo-détecteurs) mais aussi pour la conversion de la lumière en énergie électrique (cellules solaires) **[16]**.

#### I.10.2 Spectre solaire et l'air masse

#### I.10.2.1 Le soleil

Le soleil est une étoile de forme pseudo-sphérique dont le diamètre atteint 1391000Km. Il est situé à une distance moyenne de 149598000Km de la terre Composé de matière gazeuse, essentiellement de l'hydrogène et de l'hélium. L'énergie lumineuse dite « extraterrestre » c'est à dire hors atmosphère a été évaluée avec précision par la NASA et vaut 1367w/m<sup>2</sup>. Il s'agit de l'irradiance reçue, ou rayonnement solaire instantané à un instant donné au-dessus de l'atmosphère terrestre, en incidence normale (c'est à dire sur un plan perpendiculaire à la direction du soleil). On appelle cette valeur « constante » solaire mais elle ne l'est pas tout à fait à cause des légères variations de la distance terre-soleil. Cette énergie qui descend en ligne droite vers notre planète ne peut pas nous parvenir sur la terre en intégralité car elle va subir des transformations en traversant l'atmosphère par absorption et par diffusion.

#### I.10.2.2 L'air masse

L'intensité lumineuse issue du soleil normalement incidente sur la surface de la Terre est appelée la constante solaire. Elle est approximativement d'une valeur de 1,4 kW/m<sup>2</sup> audessus de la couche atmosphérique et est réduite sur Terre à 1 kW/m<sup>2</sup> par réflexion et absorption des particules présentes dans la couche atmosphérique. Cette perte est appelée la« masse d'air » (AM). La désignation AMO correspond à une masse d'air nulle pour la lumière arrivant au-dessus de notre atmosphère à incidence normale. Le titre AM1 correspond lui à une même lumière arrivant à la surface terrestre. L'appellation AM1.5 désigne la masse d'air rencontrée pour la lumière arrivant à 48.2° sur la surface de la Terre, soit une lumière plus faible du fait que l'épaisseur de la couche atmosphérique traversée est plus grande.

De manière générale, l'indice m associée à la masse d'air (AM m) est calculé comme suit :  $m \approx 1/ \sin(\theta)$ . A étant l'angle entre l'incidence des rayons lumineux et l'horizontale à la terre. Figure (I.13)



Figure I.13 : Définition de l'air masse.

#### I.10.2.3 Spectre solaire

Le spectre du soleil est sa décomposition en longueurs d'onde. La lumière solaire est en effet composée de toutes sortes de rayonnements de couleurs différentes, caractérisées par leur gamme de longueur d'onde. Les photons, grains de lumière qui composent ce rayonnement électromagnétique, sont porteurs d'une énergie qui est reliée à leur longueur d'onde par la relation :

$$E = hv = \frac{hc}{\lambda}.$$
 (1.2)

Où :

- h est la constante de Planck
- v: la fréquence
- c : la vitesse de la lumière
- λ la longueur d'onde.

C'est cette relation mise à jour par Louis de Broglie en 1924 qui a confirmé la nature à la fois corpusculaire et ondulatoire de la lumière : présence de corpuscules « les photons » et propagation d'ondes avec une fréquence de vibration et une longueur d'onde.

Une courbe standard de la répartition spéciale du rayonnement solaire extraterrestre, compilée selon les données recueillies par les satellites est désignée sous le nom de AMO. Sa distribution en énergie est répartie comme suit :

- Ultraviolet UV 0,20< λ < 0,38 μm 6,4%</li>
- Visible
   0,38 < λ <0,78 μm 48%</li>
- Infra- Rouge IR 0,78< λ <10 μm 45,6%</li>



Figurel.14 : Spectre électromagnétique.

La (Figure I.15) montre quatre courbes liées à l'irradiation spectrale solaire qui est la puissance par unité de superficie par unité de longueur d'onde. La courbe supérieure qui représente le spectre solaire en dehors de l'atmosphère de la terre, est l'état de la masse d'air zéro (AMO) ; sa puissance vaut 1367 w/m<sup>2</sup>, cette condition peut être simulée par un corps noir à 5800k, montrée par la courbe en pointillée. Le spectre AMO est utilisé pour les applications (satellites et véhicules spatiaux). Le spectre AM1 représente la

lumière du soleil sur la surface de la terre quand le soleil est au zénith, la puissance d'incidence est environ 925 w/m<sup>2</sup>. Le spectre AM2 est obtenu pour un angle de 60° et à une puissance d'environ 691w/m<sup>2</sup>. L'air masse AM 1,5 est défini par l'angle 48.2°, au-dessus de l'horizon et une intensité de 844 w/m<sup>2</sup>, cet air masse est approprié par des applications terrestres.



Figure I.15 : Irradiance en fonction de la longueur d'onde AM.

# I.11 Les différentes technologies de cellules photovoltaïques

Deux grandes familles de technologies existent actuellement : la première à base de silicium cristallin comprenant le mono et le multi cristallin, couvre de l'ordre de 85% de la production mondiale. La deuxième famille, celle des couches minces, comprend les cellules au silicium amorphe, poly-cristallin ou monocristallin ; au tellure de cadmium, au cuivre indium sélénium, et à l'arséniure de gallium .en outre, d'autres technologies sont en cours d'expérimentation comme les cellules organiques, polymères ou à base de fullerènes Figure **(I.16) [17].** 



Figure I.16: Répartition des matériaux sur le marché mondial du photovoltaïque.

#### I.11.1 Le Silicium cristallin

Le Silicium est un élément parfaitement stable et non toxique, il constitue environ 28 % de l'écorce terrestre. Plusieurs technologies pour le photovoltaïque du silicium ont été développées. Ces technologies représentent actuellement 99 % du marché des modules Photovoltaïques **[18].** Il est actuellement le matériau le plus utilisé pour fabriquer des cellules photovoltaïques disponibles à un niveau industriel. Le silicium est fabriqué à partir de sable quartzeux (dioxyde de silicium). Celui-ci est chauffé dans un four électrique à haute température. Divers traitements du sable permettent de le purifier. Le produit obtenu est un silicium dit métallurgique, pur à 98% seulement. Il est ensuite purifié chimiquement et aboutit au silicium de qualité électronique qui se présente sous forme liquide, puis coulé sous forme de lingot suivant le processus pour la cristallisation du silicium, et découpé sous forme de plaquettes fines. Par la suite, ce silicium pur va être enrichi en éléments dopants (P, As, Sb ou B) afin de pouvoir le transformer en semi-conducteur de type P ou N.

On distingue deux catégories selon la technologie employée :

#### • Les cellules monocristallines

Ce matériau a été le premier à être utilisé. Les cellules au Si ont connu une large application constituant la quasi-totalité des cellules photovoltaïques. Le Si monocristallin est de très haute pureté et possède un gap indirect de 1.1 eV. Il présente également des qualités cristallines et électroniques excellentes permettant la fabrication des cellules à rendement important (20 - 23 %). Les lingots monocristallins sont produit par deux techniques: soit le tirage Czockralski (Cz) ou la purification par fusion de zone (Fz). Le produit sera ensuite découpé en plaquettes de 100 µm d'épaisseur. Cette étape entraine une perte importante (jusqu'à la moitié) du matériau. Les dispositifs au Si fabriqués par (Fz) donnent les meilleurs rendements. Pour la méthode (Cz) qui est moins onéreuse, les rendements sont légèrement inférieurs. Les avantages de l'utilisation du Si monocristallin sont : la très bonne stabilité et les durées de vie des dispositifs qui peuvent atteindre les 30 ans, ce qui amortira leurs coûts. Toutefois ce matériau présente plusieurs inconvénients liés à sa rigidité, sa disponibilité parfois limitée et à un coût de fabrication élevé. La recherche s'est dirigée vers une méthode de cristallogenèse plus simplifiée et économique basée sur le Si polycristallin **[18].** 

#### • Les cellules polycristallines

Le Si polycristallin (x-Si) est une autre forme de Si utilisée pour la production des cellules solaires photovoltaïques. Cette filière est la plus avancée, sa part du marché tend à augmenter excédant les 55.9 %. Ce matériau est fabriqué principalement à partir des sources de matériaux moins raffinées par des procédés de solidification. Le produit final est sous forme de lingot polycristallin qui sera découpé à l'aide d'une scie à fil. Ce découpage permet de diminuer les pertes dues à l'étape de découpe préjudiciable par la scie diamantée. Le x-Si se présente également sous forme de ruban. Des plaques minces de Si sont fabriquées en utilisant un ruban de carbone (C) qui passe par un bain de Si fondu .Les films de Si se déposent sur le ruban de carbone qui sera ensuite brulé pour avoir à la fin des plaques de Si. Dans ce cas, la vitesse de croissance extrêmement lente (quelques cm/min) pousse les industriels à abandonner cette technologie. Cependant, les cellules obtenues à partir du x-Si présentent des rendements légèrement faibles (15 %) mais conduisent à un coût plus réduit en comparaison avec le Si monocristallin. Grâce à l'utilisation de température élevée, le Si obtenu sous forme monocristallin ou polycristallin appartient à la filière des matériaux massifs où les rendements de conversion d'énergie sont nettement plus élevés mais au prix d'un coût de fabrication très élevé [18].

22

### I.11.2 Les cellules à couche mince

On distingue plusieurs technologies parmi lesquelles :

- Cuivre-indium-disélénium (CIS) ou cuivre-indium-gallium-sélénium (CIGS) : leur rendement est égal à 11 % (17 .1 % au laboratoire). 99 % d'absorption, dégradation minime, mais fabrication très délicate.
- Cadmium-tellure (CdTe) : rendement 10.5 % (15.8 % en laboratoire). Haute absorption, mais n'oublions pas que le cadmium est très toxique.
- Gallium Arsenic (GaAs): leur rendement dépasse les 25 % en laboratoire. Ces cellules, dont le prix est très élevé, sont très appréciées dans l'aérospatiale. Leurs principaux avantages sont :
  - une absorption très élevée. Ces cellules ne pas épaisses, ce qui traduit un gain en volume et en masse pour les sondes sur lesquelles le moindre gramme superflu est traqué.
  - ✓ leur puissance est, par rapport aux cellules simples au silicium, peu affectée par les augmentations de température que les sondes peuvent rencontrer [19].

# I.12 L'énergie solaire photovoltaïque

L'énergie solaire photovoltaïque : désigne l'électricité produite par transformation d'une partie du rayonnement solaire avec une cellule photovoltaïque. Plusieurs cellules sont reliées entre elles et forment un panneau solaire. (Ou module) photovoltaïque. Plusieurs modules qui sont regroupés dans une centrale solaire photovoltaïque sont appelés champ photovoltaïque. Le terme photovoltaïque peut désigner soit le phénomène physique-l 'effet photovoltaïque- ou la technologie associée **Figure (I.17) [15].** 



Cellule photovoltaïque Panneau photovoltaïque Champ photovoltaïque

Figure I.17 : image d'une cellule, panneau et champ photovoltaïque

# I.13 Fonctionnement d'une cellule photovoltaïque

Une cellule photovoltaïque est un dispositif qui permet de transformer l'énergie solaire en énergie électrique. Cette transformation est basée sur les trois mécanismes suivants :

- Absorption des photons (dont l'énergie est supérieure au gap) par le matériau constituant le dispositif.
- Conversion de l'énergie du photon en énergie électrique, ce qui correspond à la création de paires électron/trou dans le matériau semi-conducteur.
- Collecte des particules générées dans le dispositif.

Le matériau constituant la cellule photovoltaïque doit donc posséder deux niveaux d'énergie et être assez conducteur pour permettre l'écoulement du courant d'où l'intérêt des semi-conducteurs pour l'industrie photovoltaïque. Afin de collecter les particules générées, un champ électrique permettant de dissocier les pairs électron/trou créées est nécessaire. Pour cela on utilise le plus souvent une jonction PN. D'autres structures, comme les hétérojonctions et les Schottky peuvent également être utilisées.

Le fonctionnement des cellules photovoltaïques est illustré sur la figure I.18 :



Figure 1.18 : Schéma de la structure d'une cellule photovoltaïque illustration.

Les photons incidents créent des porteurs dans les zones N et P et dans la zone de charge d'éspace. Les photo-porteurs auront un comportement différent suivant la région :

- Dans la zone N ou P, les porteurs minoritaires qui atteignent la ZCE sont 'envoyés' par le champ électrique dans la zone P (pour les trous) ou dans la zone N (pour les électrons) où ils seront majoritaires. On aura un photo-courant de diffusion.
- Dans la zone de charge d'éspace, les pairs électrons/trou crées par les photons incidents sont dissociées par le champ électrique : les électrons vont aller vers la région N, les trous vers la région P. On aura un photo-courant de génération [20].

# I.14 Les constituants de base d'une cellule photovoltaïque

La cellule photovoltaïque est constituée de plusieurs couches, l'élément de base de ses structures est la jonction pn qui joue le rôle principal dans le dispositif solaire. Elle est le siège de la génération des porteurs et de leurs séparations.

La plupart des cellules solaires industrielles ont aujourd'hui un rendement compris entre 13% et 18%, tandis que les technologies utilisées en laboratoire permettent d'atteindre des rendements entre 20% et 24% en limitant les pertes optiques, les pertes par recombinaison et celles par résistance (Figure 1.19).



Figure I-19: Impact relatif des pertes optiques, résistives et par recombinaison pour une cellule silicium multi cristallin industrielle [21].

Bien que différentes structures soient envisageables pour l'élaboration des cellules photovoltaïques, des parties similaires sont présentées dans chaque composant. La structure d'une cellule photovoltaïque standard industrielle est présentée sur la **Figure I-20**.



Figure I-20 : Représentation simplifiée d'une cellule photovoltaïque standard

#### 1.14.1 Contacts face avant et arrière :

Les contacts constituent la structure de collecte qui récupère et envoie les porteurs photogénérés vers le circuit externe. Pour assurer efficacement ce rôle, les contacts doivent être ohmiques. De mauvais contacts, c'est-à-dire entraînant une forte résistance série, auront essentiellement une répercussion sur le facteur de forme de la cellule et sur le courant récupéré.
#### I.14. 2 La couche anti-reflet

La texturisation de la surface de la cellule permet de limiter les réflexions face avant. Pour réduire encore plus la réflexion, une couche antireflet (RAR) est ajoutée. L'indice et l'épaisseur de cette couche sont ajustés pour obtenir une lame quart d'onde, l'objectif étant de minimiser le coefficient de réflexion de la cellule en créant des interférences destructives.

#### I.14.3 La texturation de surface

La réflexion est à l'origine de pertes importantes pour la cellule. La texturisation est utilisée pour diminuer la réflectivité de la surface de la cellule. Cette opération vise à développer en surface un relief micrométrique, généralement de forme pyramidale **Figure(I.21).** Le relief créé permet d'augmenter la surface et induit des réflexions multiples sur les facettes des pyramides. La texturisation assure ainsi le piégeage d'un maximum de lumière réduisant les pertes liées à la réflectivité. Différents procédés sont utilisés pour réaliser la texturisation : attaques chimiques de la surface (KOH, NaOH, acides), texturisation mécanique, plasma ou laser. Ces méthodes peuvent faire passer la réflectivité effective de 40% à moins de 10%. Certains auteurs considèrent que la porosification de la surface de l'émetteur de la cellule est un autre moyen de texturisation de la surface, pouvant contribuer efficacement à la réduction de la réflectivité **[22].** 



Figure I- 21 : Schéma de principe des réflexions lumineuses sur une surface texturée.

#### I.14.4 Le champ BSF

Afin de collecter les paires électron-trou crées par les radiations de grandes longueurs d'ondes du spectre solaire, on réalise un champ électrique par transition abrupte de dopage, sur la face arrière de la cellule solaire, dans la zone même du contact ohmique. Ce champ électrique arrière s'appelle BSF (Back Surface Field). Les porteurs excédentaires ainsi crées au voisinage de cette zone, au lieu de s'y recombiner, sont repoussés vers la région de charge d'espace de la jonction. Ils participent au photocourant dans la mesure où la longueur de diffusion de ses porteurs de charge est plus importante que l'épaisseur totale de la couche de base de la cellule **[23]**.

Le BSF le plus utilisé dans l'industrie photovoltaïque consiste en une couche d'aluminium déposée sur la face arrière, suivie d'un traitement thermique conduisant à un alliage de silicium et d'aluminium. La largeur du BSF va de quelques micromètres à plus de 10µm **[24]**.

#### I.15 Conclusion :

Dans ce chapitre, nous avons donné les notions fondamentales des semi-conducteurs III-V, en suite nous avons expliqué le principe de l'effet photovoltaïque, nous avons rappelé quelques notions de base relatives aux rayonnements solaires tels que le spectre solaire et à la fin nous avons parlés sur les constituants de base d'une cellule photovoltaïque.

Le chapitre qui va suivre présente l'étude des caractéristiques électroniques de l'alliage GalnAsSb qui est actuellement un matériau très prometteur pour le photovoltaïque.

# <u>Chapitre II</u> <u>Etude de la structure</u> <u>GalnAsSb/Si</u>

#### **II.1 Introduction**

Des enjeux économiques et scientifiques importants sont à l'origine d'une compétition fait de semi-conducteurs III-V apparus comme les matériaux de choix pour des applications spécialisées. Notamment l'arséniure de gallium (GaAs), l'antimoine de gallium (GaSb), l'arséniure d'indium (InAs) et l'antimoine d'indium (InSb) se sont distingués par leur bande interdite directe et leur grande mobilité électronique. Cette dernière permet d'obtenir des dispositifs à haute rapidité de commutation en électronique, alors que leur bande interdite directe favorise les transitions optiques. Ces propriétés, communes à la plupart des matériaux III-V sont très prisées dans l'élaboration de dispositifs

Ce chapitre porte sur la diminution de l'énergie de la bande interdite de l'alliage GaInAsSb avec l'incorporation d'indium et d'antimoine. Nous allons étudier l'influence de l'incorporation de l'indium et du l'antimoine sur les caractéristiques de la structure GaInAsSb /Si : le gap, la contrainte, épaisseur critique, le coefficient d'absorption, le coefficient de réflexion et l'indice de réfraction.

#### II.2 Choix du Substrat

Le choix du substrat est une étape importante dans la réalisation d'une hétérostructure, et cela dépend de la nature du substrat, c'est-à –dire sa nature chimique (réactivité chimique), sa nature cristallographique, son orientation, sa morphologie de surface, sa pureté chimique, ainsi que ses propriétés mécano-thermiques (sa conductibilité thermique, son coefficient de dilatation, sa résistance aux contraintes mécano-thermiques sous gradient de température).

#### II.2.1 Croissance sur Si

Ses propriétés physiques, sa haute qualité cristalline et son faible coût font du silicium (Si) un substrat très attractif pour des composants à base de GaInAsSb. De plus, il ouvre la possibilité d'une intégration de composants optoélectroniques.

29

Le silicium a une structure cubique, en maille diamant. Sa structure peut être représentée par deux sous-réseaux cubiques à face centrée (cfc) interpénétrés et décalés d'une distance équivalente à un quart de la diagonale de la maille élémentaire ((av3)/4 avec a=5,43 Å). La Figure **(II.1)** présente la structure du cristal de silicium selon différentes directions.



Figure II.1: Schéma de la maille élémentaire du silicium selon différentes directions.

#### II.3 Etude des paramètres électroniques de l'alliage GaInAsSb

Les différents paramètres de l'alliage  $Ga_{1-x}In_xAs_{1-y}Sb_y$  qui est un quaternaire de type 2+2 est exprimée à partir de la loi de Vegard **[25]** :

 $p(x, y) = (1-x). (1-y).p_{GaAs} + (1-x). y.p_{GaSb} + x. (1-y).p_{InAs} + x. y.p_{InSb}$  II.1  $p_{GaAs}, p_{GaSb}, p_{InAs}, p_{InSb}$ : sont les différents paramètres des composés binaires constituant l'alliage.

#### II.3.1 Le paramètre de maille

Le paramètre de maille noté « *a* » se défini comme étant la distance séparant deux mailles consécutives. Lors de la réalisation d'alliages avec des semi-conducteurs différents, le paramètre de maille de l'alliage peut être considéré comme évoluant linéairement en fonction de la composition des différents binaires suivant la loi de Vegard (équation.II.1) qui est donnée par la relation suivante :

 $a (Ga_{1-x} \ln_x As_{1-y} Sb_y) = (1-x). (1-y). a_{GaAs} + (1-x).y.a_{GaSb} + x. (1-y). a_{InAs} + x.y.a_{InSb}$ II.2Les paramètres de maille des principaux semi-conducteurs sont donnés dans l'annexe B.

Nous avons tracé le paramètre de maille du quaternaire  $Ga_{1-x}In_xAs_{1-y}Sb_y$  en fonction des concentrations d'indium et d'antimoine sur la figure **(II.2).** Nous pouvons voir que l'indium et l'antimoine ont pour effet d'augmenter le paramètre de maille.



Figure II.2 : Variation du paramètre de maille du  $Ga_{1-x}In_xAs_{1-y}Sb_y$  en fonction de la concentration d'indium et de l'antimoine.

#### II.3.2 La contrainte

L'épitaxie du matériau GalnAsSb sur Si de paramètre de maille initialement différent provoque une contrainte. Le substrat de paramètre de maille  $a_s$  différent de celui de la couche épitaxiée  $a_e$ , impose sa maille à cette dernière, cette différence de maille provoque une déformation de la couche épitaxiée, soit en tension ou en compression par des déformations bi-axiales ( $\varepsilon_{yy}$  et  $\varepsilon_{zz}$ ) et uni-axiale ( $\varepsilon_{xx}$ ) [26].

Les déformations sont données par :

• Bi-axiale dans le plan de croissance :

$$\varepsilon_{//} = \varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \frac{a_s - a_e}{a_e}$$
 II.3

• Uni-axiale dans la direction de croissance :

$$\varepsilon_{\perp} = \varepsilon_{zz} = -2\frac{C_{12}}{C_{11}}\varepsilon_{xx}$$
 II.4

Où :

- ε : La déformation ou le désaccord de maille.
- a<sub>s</sub> : Le paramètre de maille du substrat (Si).
- a<sub>e</sub>: Le paramètre de maille de la couche épitaxiée (Ga<sub>1-x</sub>In<sub>x</sub>As<sub>1-y</sub>Sb<sub>y</sub>).
- C<sub>ii</sub> : Les coefficients d'élasticité.

A partir de l'équation de la loi de vegard (II-1) et les équations (II-3) ,(II-4) ; on a calculé le désaccord de maille dans le plan de la couche (figureII.3.a) et dans la direction de la croissance (figureII.3.b) par rapport à la variation des densités de l'indium et de l'antimoine dans l'alliage Ga<sub>1-x</sub>In<sub>x</sub>As<sub>1-y</sub>Sb<sub>y</sub>.On remarque sur la (figure II.3.a) que les valeurs de  $\varepsilon_{xx}$  sont toutes négatives parce que le paramètre de maille du substrat dans notre cas est inférieur à celui de la couche épitaxiée, donc on dit qu'on a une compression. Nous pouvons voir que la déformation biaxiale  $\varepsilon_{xx}$  diminue avec l'augmentation d'indium et d'antimoine, par contre, la déformation uniaxiale  $\varepsilon_{zz}$  augmente avec l'augmentation d'indium et d'antimoine.

La simulation de la contrainte est représentée dans la (figurell.3) suivante :



**a)** dans le plan de la couche.

**b)** dans la direction de croissance.

Figure II.3 : variation du désaccord paramétrique en fonction des concentrations d'indium et d'antimoine de la structure  $Ga_{1-x}In_xAs_{1-y}Sb_y$  /Si

#### II.3.3 L'épaisseur critique

L'épaisseur critique de la couche contrainte hc est l'un des paramètres les plus importants que nous devons le prendre en compte. Pour le calculer, on a utilisé le modèle le plus classique, celui de K. Koksa et B. Gonul, 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 la contrainte. La valeur de l'épaisseur critique hc 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 [27] :

$$h_{c} = \frac{a_{e}}{k\sqrt{2}\pi\Delta} * \frac{1 - 0.25\gamma}{1 + \gamma} * \ln\left(\frac{h_{c}\sqrt{2}}{a_{e}} + 1\right)$$
 II.5

Оù

 $\Delta$  : est le désaccord paramétrique :  $\Delta = \left| \frac{a_s - a_e}{a_s} \right|$ 

 $\gamma$ : est le coefficient de poisson donné par :  $\gamma = \frac{C_{12}}{C_{11} + C_{12}}$ **II.6** 

Où : C<sub>11</sub> et C<sub>12</sub> sont les constants élastiques obtenus par l'interpolation linéaire des binaires GaAs, GaSb, InAs, InSb .

ae : paramètre de maille de la couche relaxée.

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.



epaisseur critique

Figure II-4 : Variation de l'épaisseur critique en fonction des fractions d'indium et d'antimoine.

La variation de l'épaisseur critique en fonction des fractions d'indium et d'antimoine, nous constatons que l'antimoine et l'indium ont pour l'effet de diminuer l'épaisseur critique pour une contrainte compressive

#### II.4 L'énergie de la bande interdite

Les semi-conducteurs sont caractérisés par un écart en énergie entre la bande de conduction Bc et la bande de valence Bv appelé bande interdite ou gap. Plus cet écart est important, plus le matériau est isolant. Ce gap correspond à l'énergie nécessaire à fournir pour faire passer un électron de la bande de valence à la bande de conduction. L'apport énergétique nécessaire à la transition est le plus souvent fourni par un photon ou par une excitation électrique. C'est sur ces transitions qu'est basée la technologie des panneaux photovoltaïques.

#### II.4.1 Détermination du gap non contraint sans éclatement

Pour décrire l'évolution de l'énergie de la bande interdite du matériau massif non contraint sans éclatement de  $Ga_{1-x}In_xAs_{1-y}Sb_y$  en fonction de la composition d'indium et d'antimoine, nous avons utilisé la loi d'interpolation linéaire en prenant compte des paramètres de bowing des différents composés ternaires.

$$Eg_{Ga_{1-x}In_xAs_{1-y}Sb_y} = (1-x) (1-y) Eg_{GaAs} + (1-x) y Eg_{GaSb} + x (1-y) Eg_{InAs} + x y Eg_{InSb} - (1-x) x (1-y) C_{GaInAs}$$
  
-(1-x) x y C<sub>GaInSb</sub> - x y (1-y) C<sub>InAsSb</sub> - (1-x) y (1-y) C<sub>GaAsSb</sub> II.7



**Figure II.5** : Evolution du l'énergie du gap non contraint en fonction des concentrations d'indium et d'antimoine de la structure Ga<sub>1-x</sub>In<sub>x</sub>As<sub>1-y</sub>Sb<sub>y</sub> /Si

D'après la **Figure II.5** On constate que l'énergie du gap diminue avec l'augmentation des fractions d'indium et d'antimoine.

#### II.4.2 Effet de la contrainte sur le gap

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

- La composante hydrostatique, liée à la déformation selon l'axe de croissance (Oz), provoque un décalage du centre de gravité de la bande de valence ainsi que le centre de gravité de la bande de conduction.
- La composante de cisaillement, qui lève la dégénérescence des états énergétique des trous lourds et des trous légers en k=0.

Pour une couche épitaxiée soumise à une contrainte biaxiale de compression Figure (II.6.b), la composante hydrostatique augmente le gap moyen entre les bandes de conduction et de valence, alors que la composante de cisaillement rend les bandes de valence fortement anisotropes : la bande de plus haute énergie (improprement appelée bande HH) devient "lourde" selon  $k_{\perp}$  et " légère " selon  $k_{\perp}$  la bande d'énergie inferieure (improprement appelée bande LH) devient elle " légère " selon  $k_{\perp}$  et "lourde" selon $k_{//}$ .

Si la couche est soumise à une contrainte biaxiale de tension Figure **(II.6.c)**, le gap moyen diminue et les bandes de valences sont inversées par rapport à celle d'une couche en compression, la bande de plus haute énergie (bande LH) restant " légère " selon  $k_{\perp}$ , et "lourde" selon  $k_{//}$ . **[28]** 



En l'absence de contrainte les bandes de trous lourds et trous légers sont isotropes et dégénérées au centre de la zone de Brillouin, et la bande de trous spin-splittée est située à une énergie  $\Delta 0$  en dessous de ces deux bandes. Le centre de gravité de la bande de valence d'énergie moyenne  $E_{V,moy} = \frac{E_{HH}+E_{LH}+\Delta_0}{3}$  (II.8) se trouve par conséquent à  $\frac{\Delta_0}{3}$  au dessous du haut de la bande de valence en k=0 (figure précédente).

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

E<sub>LH</sub> : Energie de la bande de trous léger

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

Les décalages en énergie des centres de gravité de la bande de valence et de la bande de conduction en k=0 varient proportionnellement à la contrainte [28].

$$\Delta E_{\nu,moy}^{hy} = a_{\nu}(2\varepsilon_{//} + \varepsilon_{\perp})$$
 II.9

$$\Delta E_{c}^{hy} = a_{c}(2\varepsilon_{//} + \varepsilon_{\perp})$$
 II.10

Où  $a_C$  et  $a_v$  sont respectivement les potentiels hydrostatiques de déformation pour la bande de conduction et de valence.

Les décalages énergétiques induits par la contrainte de cisaillement pour chacune des bandes constituant la bande de valence sont les suivants **[28]**:

$$\Delta E_{hh}^{sh} = -\frac{1}{2} \delta E^{sh} \tag{II.11}$$

$$\Delta E_{lh}^{sh} = -\frac{1}{2}\Delta_0 + \frac{1}{4}\delta E^{sh} + \frac{1}{2}\left[\Delta_0^2 + \Delta_0\delta E^{sh} + \frac{9}{4}(\delta E^{sh})^2\right]^{1/2}$$
 II.12

$$\Delta E_{so}^{sh} = -\frac{1}{2}\Delta_0 + \frac{1}{4}\delta E^{sh} - \frac{1}{2}\left[\Delta_0^2 + \Delta_0\delta E^{sh} + \frac{9}{4}(\delta E^{sh})^2\right]^{1/2}$$
 II.13

Avec :

$$\delta E^{sh} = 2 * b * (\epsilon_{\perp} - \epsilon_{//})$$
 II.14

Où b est le potentiel de déformation tétragonale.

Les résultats de simulation que nous avons obtenus sont représentés dans la **figure II.7** et la **figureII.8** qui décrivent l'évolution des décalages énergétiques induits par la contrainte hydrostatique, et par la contrainte de cisaillement respectivement en fonction des fractions d'indium et d'antimoine.



**Figure II-7** : décalages énergétiques induits par la contrainte hydrostatique en fonction des concentrations d'indium et d'antimoine.



Figure II-8: décalages énergétiques induits par la contrainte de cisaillement pour chacune des bandes constituant la bande de valence en fonction des concentrations d'indium et d'antimoine.

#### II.4.3 Le gap contraint sans éclatement

En prenant comme référence énergétique  $E_{v, moy}$  (équation **II.8**), et compte tenu des équations (**II.11**), (**II.12**), (**II.13**), (**II.14**), on peut définir l'énergie du haut de la bande de valence et l'énergie du haut de la bande de conduction.

 $E_{\nu}$  : l'énergie du haut de la bande de valence est :

$$E_{v} = E_{v, mov} + \frac{\Delta_0}{3} + \Delta_c E_{v, mov}^{hyd} + \max \left( \Delta_c E_{hh}^{cisa} \right) \Delta E_{lh}^{cisa}$$

 $E_{c}$ : l'énergie du bas de la bande de conduction est :

Dans ces expressions  $E_{v, moy}$ , l'éclatement spin-orbite  $\Delta_0$  et l'énergie de gap sont relatifs au matériau non contraint. Via les équations (**II.15**) et (**II.16**) on peut déterminer l'équation du gap contraint  $E_q^{cont}$ :

$$E_g^{cont} = \mathsf{E}_c - \mathsf{E}_v = \mathsf{E}_g + \Delta. E_c^{hyd} - E_{v,moy}^{hyd} - \max\left(\Delta. E_{hh}^{cisa}, \Delta E_{lh}^{cisa}\right)$$
 II.17

Pour une couche soumise à une contrainte en compression la bande des trous lourds est audessus de la bande des trous légers :

$$\max \left(\Delta . E_{hh}^{cisa}, \Delta E_{lh}^{cisa}\right) = \Delta E_{hh}^{cisa}$$
 II.18

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 et l'on a :

$$\max \left(\Delta. E_{hh}^{cisa}, \Delta E_{lh}^{cisa}\right) = \Delta E_{lh}^{cisa}$$
 II.19

Donc l'équation (II.17) devient pour une couche en compression :

$$E_{g}^{cont} = E_{g}_{hh} = E_{g}^{ncont} + \Delta E_{c}^{hy} - \Delta E_{v,moy}^{hy} - \Delta E_{hh}^{sh}$$
 II.20

Et pour une couche en tension :

$$E_{g}^{cont} = Eg_{lh} = E_{g}^{ncont} + \Delta E_{c}^{hy} - \Delta E_{v,moy}^{hy} - \Delta E_{lh}^{sh}$$
 II.21

La détermination du Gap contraint nécessite la connaissance du Gap non contraint  $E_g$  et l'éclatement spin-orbite  $\Delta_0$  de la couche relaxée, les constantes élastiques  $C_{ij}$  de la couche. Les potentiels de déformation hydrostatique  $a_c$  et  $a_v$ , ainsi que le potentiel de déformation tétragone b. Ces paramètres sont répertoriés en annexe B pour les composés III-V binaires. Dans les figures **II-9** nous avons simulé la variation du gap contraint sans éclatement pour le cas d'une couche en compression calculé par l'équation **II-20** et celle d'une couche en tension calculé par l'équation **II-21**, respectivement.



**Figure II-9**: Evolution de l'énergie du gap contraint après éclatement pour le GalnAsSb en fonction des fractions d'indium et d'antimoine.

#### II.4.4 L'effet de Sb sur La bande de valence

Pour déterminer la configuration de la bande de valence après l'incorporation de l'antimoine, nous utilisons le modèle d'anticroisement de bandes de valence « VBAC ». Ce modèle est basé sur la fameuse méthode kp en considérant 6 états de valence du semiconducteur couplés avec six états de valence des atomes introduits « impuretés », la diagonalisation du hamiltonien mène vers 6 valeurs propres doubles et dégénérées correspondant à deux bandes : une bande supérieure E<sup>+</sup> et une bande inférieure E<sup>-</sup> qui sont le résultat de l'anticroisement des bandes de trous lourds (hh), des trous légers (lh) et du spin orbite (SO) **[29].** 

Nous avons utilisé ce modèle pour déterminer l'influence de l'antimoine sur la bande de valence. Pour cela nous l'avons appliqué avec l'énergie de localisation du Sb :  $E_{Sb}$  et le paramètre de couplage :  $C_{Sb}$  [29].

La résolution de l'équation aux valeurs propres en remplaçant le  $V_{MN}$  par  $V_{PQ}$  et  $E_N$  par  $E_{Sb}$  permet de déterminer les états propres des trous lourds et des trous légers : **[29]** 

$$E_{hh\pm}(k) = \frac{1}{2} \left| E_{Sb} + E_{hh}(k) \pm \sqrt{\left( E_{Sb} - E_{hh}(k) \right)^2 + 4V_{PQ}^2} \right|$$
 II-22

$$E_{lh\pm}(k) = \frac{1}{2} \left| E_{Sb} + E_{lh}(k) \pm \sqrt{\left( E_{Sb} - E_{lh}(k) \right)^2 + 4V_{PQ}^2} \right|$$
 II-23

$$V_{PQ} = C_{Sb} \sqrt{y}$$
 II-24

Où :

- E<sub>sb</sub> = -1 eV.
- C<sub>sb</sub> = 1.05 : Constante.
- y : Fraction d'antimoine.

Dans les **figure II-10 et II.11** nous avons présenté la simulation de l'éclatement de la bande de valence pour le GaAsSb en K=0 en fonction de la concentration de l'antimoine.



**Figure II-10** : Eclatement de la bande de valence en deux sous bandes  $E_{ghh}^+$  et  $E_{ghh}^-$  en fonction du pourcentage de l'antimoine selon le modèle VBAC.



**Figure II-11** : Eclatement de la bande de valence en deux sous bandes  $E_{glh}^+$  et  $E_{glh}^-$  en fonction du pourcentage de l'antimoine selon le modèle VBAC.

#### **II.5 Propriétés optiques**

Dans cette partie, nous nous sommes intéressés dans un premier temps à l'étude du coefficient d'absorption d'une manière générale ensuite, nous nous sommes penchées sur la simulation concernant le quaternaire GalnAsSb. Dans un second temps, en utilisant le modèle de Sellmeier, nous avons défini l'indice de réfraction qui a été utile pour aborder le coefficient de réflexion.

#### II.5.1 absorption

Seule la lumiere absorbée et restituée sous forme d'énergie électrique, le matériau photovoltaïque utilise différemment toutes les longueurs d'ondes du spectre solaire: il se caracterise par sa réponse spectrale, c'est-à-dire l'éfficacité avec laquelle il transforme l'énergie d'un rayonnement en énergie électrique. Cette efficacité dépend essentiellement des caractéristiques du matériau.

Le coefficient d'absorption détermine la distance dans un matériau à partir de laquelle une longueur d'onde particulière peut pénétrer avant qu'elle soit absorbée. [30]

#### II.5.1.1 Etude du coefficient d'absorption

Les électrons dans la bande de valence d'un semi-conducteur peuvent absorber des photons dont l'énergie est plus grande que l'énergie de la bande interdite (Eg), puis passer à la bande de conduction. Le coefficient d'absorption  $\alpha(E)$ , pour une énergie du photon E supérieure à l'énergie du gap est donné par la relation suivante [31]:

• Pour un semi-conducteur à gap direct :

$$\alpha(E) = \alpha_0 \frac{\sqrt{E - E_g}}{E}$$
 II-25

• Pour un semi-conducteur de gap indirect :

$$\alpha(E) = \alpha_0 \left(\frac{E - E_g}{E}\right)^2 \qquad \qquad \text{II-26}$$

Où :

- α(E) : Coefficient d'absorption en fonction de l'énergie du photon E,
- α<sub>0</sub> : Constante,
- E<sub>g</sub> : L'énergie de gap du matériau semiconducteur.

Nous avons représenté sur la **figurell.12** et la **figurell.13**, l'évolution du coefficient d'absorption ; une en fonction des fractions d'indium et d'antimoine pour différentes énergies des photons incidents fixes et l'autre en fonction des longueurs d'ondes des photons incidents pour différentes concentrations d'indium et d'antimoine.



**Figure II.12** : Variation du coefficient d'absorption en fonction des fractions d'indium et d'antimoine pour différentes énergies des photons incidents.

A cause de la décroissance du gap en fonction de la concentration d'indium, une augmentation du coefficient d'absorption est obtenue (**Figure II.12**). On remarque aussi une saturation du coefficient d'absorption avec l'augmentation de l'énergie du photon incident, cette saturation peut être expliquée qu'avec une forte énergie incidente l'excitation des électrons devient plus large, c.-à-d. tous les électrons de la bande de valence ont l'énergie nécessaire pour immigrer vers la bande de conduction.



b) Ga<sub>0.8</sub>In<sub>0.2</sub>As<sub>1-y</sub>Sb<sub>y</sub>



c) Ga<sub>0.7</sub>In<sub>0.3</sub>As<sub>1-y</sub>Sb<sub>y</sub>

**Figure II.13** : Variation du coefficient d'absorption en fonction de la longueur d'onde pour la structure Ga<sub>1-x</sub>ln<sub>x</sub>As<sub>1-y</sub>Sb<sub>y</sub>.

Nous constatons que l'absorption augmente avec l'augmentation des concentrations d'indium et d'antimoine, ce qui peut être expliqué par la quantité de photons absorbés qui ont une énergie grande à l'énergie du gap de matériau.

#### II.5.2 Indice de réfraction

L'indice de réfraction provient du phénomène de réfraction qui désigne le changement de direction de la lumière au passage d'un milieu à un autre.la notion d'indice de réfraction a d'abord été introduite empiriquement comme coefficient dans les lois de Snell Descartes. L'une des raisons pour laquelle nous étudions l'indice de réfraction est de réduire la réflectivité des matériaux et par conséquent, augmenter l'intensité de faisceaux incidents. Pour les couches minces doivent avoir une épaisseur bien spécifique et un indice de réfraction approprie pour pouvoir jouer le rôle de couches antireflet **[31].**  La variation de l'indice de réfraction n en fonction de la longueur d'onde  $\lambda$  a été évaluée selon la formule de Sellmeier **[32]**:

$$n^{2}(\lambda) = \left(A + \frac{B}{1 - C/\lambda^{2}} + \frac{D}{1 - E/\lambda^{2}}\right)$$
 II.27

Avec  $\lambda$  en micromètre et A, B, C, D et E sont les coefficients de Sellmeier leurs valeurs sont représentées sur l'annexe B.

L'indice de réfraction de l'alliage  $Ga_{1-x}In_xAs_{1-y}Sb_y$  est calculé à partir des indices des binaires selon la loi de Vegard (équation **II.28**).

$$n_{GaInAsSb}^{2} = (1 - x).(1 - y).n^{2}(GaAs) + (1 - x).y.n^{2}(GaSb) + x.(1 - y).n^{2}(InAs) + x.y.n^{2}(InSb)$$
II.28

Le calcul de l'indice de réfraction en fonction de la longueur d'onde  $\lambda$  pour différentes concentrations d'indium et d'antimoine est représenté sur la figure **II.14** 



a) Ga<sub>0.9</sub>In<sub>0.1</sub>As<sub>1-y</sub>Sb<sub>y</sub>



c) Ga<sub>0.7</sub>In<sub>0.3</sub>As<sub>1-y</sub>Sb<sub>y</sub>

**Figure II.14**: Variation de l'indice de réfraction en fonction de la longueur d'onde pour la structure Ga<sub>1-x</sub>In<sub>x</sub>As<sub>1-y</sub>Sb<sub>y</sub>.

Après simulation, on remarque que lorsque la longueur d'onde augmente, l'indice de réfraction diminue légèrement. Ce dernier augmente avec l'augmentation de la concentration de l'antimoine et diminue avec l'augmentation d'indium.

#### II.5.3 Coefficient de réflexion

Le calcul de l'indice de réfraction nous permet aussi de calculer la réflexion dans la couche. La réduction de la réflexion de la lumière se fait en jouant sur les indices de réfraction des matériaux traversés, plus la différence des indices de réfractions est élevée plus la surface est réfléchissante.

La réflexion s'exprime par l'équation suivante [31] :

$$\mathbf{R} = \left(\frac{\mathbf{n}_2 - \mathbf{n}_1}{\mathbf{n}_2 + \mathbf{n}_1}\right)^2$$
 II.28

Nous avons simulé la réflexion en fonction de la longueur d'onde du photon et des concentrations d'antimoine et d'indium. Nous remarquons que la réflexion augmente avec l'incorporation d'antimoine et diminue avec l'incorporation d'indium.

La réflexion diminue également avec l'accroissement de la longueur d'onde du photon, ceci est représenté sur la figure **II.15**:



a) Ga<sub>0.9</sub>In<sub>0.1</sub>As<sub>1-y</sub>Sb<sub>y</sub>



**Figure II.15**: Variation du coefficient de réflexion dans l'air en fonction de la longueur d'onde pour la structure Ga<sub>1-x</sub>In<sub>x</sub>As<sub>1-y</sub>Sb<sub>y</sub>

#### **II.6 Conclusion**

Dans ce chapitre on a fait l'étude détaillée sur le quaternaire GalnAsSb (paramètre de maillé, détermination du gap, la contrainte et l'épaisseur critique) ensuite nous avons penché sur le côté optique pour l'absorption, le coefficient d'absorption, l'indice de réfraction et la réflexion des rayons lumineux.

Le chapitre qui va suivre est consacré à l'étude des caractéristiques de la cellule photovoltaïque à base du quaternaire GaInAsSb.

## **Chapitre III**

### Simulations et Résultats

#### **III.1 Introduction**

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

Ce chapitre est orienté sur l'étude et la simulation de chaque paramètre caractérisant la cellule solaire pour aboutir à la fin à la comparaison du rendement de différentes structures par rapport à celui du notre quaternaire. Ensuite nous déduirons le schéma équivalent d'une cellule solaire en prenant en compte les différentes pertes évoquées.

#### III.2 Les caractéristiques électriques

La capacité d'une cellule photovoltaïque à produire de l'énergie est mesurée grâce à sa caractéristique courant-tension [33].

Une cellule photovoltaïque est caractérisée par un rendement de conversion  $\eta$ , une tension en circuit ouvert  $V_{OC}$ , un courant de court-circuit  $I_{CC}$  et un facteur de forme FF. Les caractéristiques courant-tension sont utilisées pour déterminer ces paramètres. Les différents paramètres caractéristiques de la cellule sont les suivants :

#### III.2.1 Efficacité quantique

Elle est définie comme le rapport entre le nombre d'électrons effectivement collectés aux contactes et le nombre de photons atteignant la cellule. [34]

La figure III.1 montre la variation de l'efficacité quantique externe en fonction de la longueur d'onde pour plusieurs concentrations d'indium et d'antimoine sous le spectre AMG<sub>1.5</sub> qui prend en compte les radiations directes et indirectes.

L'efficacité quantique externe est donnée par la relation suivante [35] :

$$EQE(\lambda) = [1 - R(\lambda)] * [1 - exp(-\alpha w)]$$
 III.1

Avec:

 $R(\lambda)$ : Réflectivité de la cellule (%)

 $\alpha$ : absorption (cm<sup>-1</sup>)

w: largeur de la zone de charge d'espace (µm)

Si l'on prend en compte la réflectivité de la surface de la cellule photovoltaïque, on détermine son rendement quantique interne EQI qui est donné par cette relation [36]:

$$EQI = \frac{EQE(\lambda)}{1 - R(\lambda) * A(\lambda) * T(\lambda)}$$
 III.2

Avec:

EQI(λ): efficacité Quantique Interne (%) EQE(λ): efficacité Quantique Externe (%) R(λ): Réflectivité de la cellule (%) A(λ): Absorption dans les couches non actives (%)

 $T(\lambda)$ : Rayonnement transmis à travers la cellule (%)

On remarque un accroissement de l'efficacité quantique avec l'augmentation de la concentration d'indium jusqu'à 40% et d'antimoine jusqu'à 12%.

Quand la longueur d'onde est grande l'efficacité quantique est faible au fur et à mesure que la longueur d'onde décroit l'efficacité quantique augmente traduisant l'effet de la variation de l'absorption avec la longueur d'onde. Aux plus faibles longueurs d'ondes l'absorption devient très grande il en résulte que l'absorption se fait alors dans une couche très fine près de la surface du semi-conducteur. Cette surface est toujours remplie des défauts qui agissent comme centres de recombinaison pour les paires électron-trou. Les porteurs ne peuvent être récupérés disparaissant par recombinaison. Ce mécanisme explique la diminution de l'efficacité quantique aux faibles longueurs d'ondes.

54



b) Ga<sub>0.8</sub>In<sub>0.2</sub>As<sub>1-y</sub>Sb<sub>y</sub>



**Figure III.1:** Variation de l'efficacité quantique en fonction de la longueur d'onde pour la structure Ga<sub>1-x</sub>In<sub>x</sub>As<sub>1-y</sub>Sb<sub>y</sub>/Si

#### III.2.2 Caractéristique courant-tension

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

$$I_{obs} = I_s \left( \exp\left(\frac{qV}{nkT}\right) - 1 \right)$$
 III.3

Avec :

q = charge élémentaire =  $1.6.10^{-19}$  C

V = tension aux bornes de la jonction (V)

k = constante de Boltzmann =  $1.38.10^{-23}$  J.K<sup>-1</sup>

T = température (K)

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

n = coefficient d'idéalité de la jonction

Ce courant d'obscurité correspond au courant de diode (Id), il résulte de la polarisation de la jonction.

Le courant photon-courant (I<sub>ph</sub>) est donné par l'expression suivante [35] :

$$I_{ph} = q \int F(\lambda) EQE_{Total}(\lambda) d\lambda \qquad \qquad III.4$$

Avec:

q: Charge élémentaire (C)

F ( $\lambda$ ): spectre solaire

 $\lambda$ : Longueur d'onde (m)

EQE(λ): efficacité Quantique Externe (%)

Le courant délivré sur une charge par une cellule photovoltaïque éclairée s'écrit alors :

$$I(V) = I_{ph} - I_{obs}(V)$$
 III.5

Ainsi, dans une cellule photovoltaïque deux courants s'opposent : le courant d'éclairement et le courant d'obscurité. [37].

La caractéristique d'une cellule sous obscurité est identique à celle d'une diode, sous éclairement la caractéristique à l'allure présentée sur la figure III-2 suivante :



Figure III.2: Caractéristiques I=f (V) sous obscurité et sous éclairement d'une cellule photovoltaïque.

La **Figure III.3** illustre l'évolution du courant en fonction de la tension pour différentes fractions d'indium et de l'antimoine. Nous remarquons que pour les quatre figures la tendance générale est la suivante :

L'incorporation d'indium et d'antimoine engendre :

- Une augmentation du courant de la cellule
- Une diminution de la tension aux bornes de la cellule



b) Ga<sub>0.8</sub>In<sub>0.2</sub>As<sub>1-y</sub>Sb<sub>y</sub>



d) Ga<sub>0.6</sub>In<sub>0.4</sub>As<sub>1-y</sub>Sb<sub>y</sub>

**FigureIII.3:** représentation de la caractéristique I=f(V) pour la structure Ga<sub>1-x</sub>In<sub>x</sub>As<sub>1-y</sub>Sb<sub>y</sub>/Si
#### III.2.3 Tension de circuit ouvert V<sub>co</sub>

Elle représente la tension aux bornes de la cellule sous éclairement et lorsqu'elle n'est pas connectée à une charge ou lorsqu'elle est connectée à une charge de résistance infinie. Elle dépend essentiellement du type de la cellule solaire (jonction PN, jonction Schottky), des matériaux de la couche active et de la nature des contacts. De plus, elle dépend de l'éclairement de la cellule [38]. Elle décroît avec la température et varie avec l'intensité lumineuse.

Elle est donnée par l'équation suivante :

$$V_{\rm CO} = \frac{\mathrm{nkT}}{\mathrm{q}} \ln(\frac{J_{\rm ph}}{J_0} + 1)$$
 III.6

Avec : n: facteur d'idéalité  $J_{ph}$ : densité de photon courant (mA.m<sup>-2</sup>)  $J_{0:}$  densité de saturation (mA.m<sup>-2</sup>) q : Charge élémentaire (C) k: constante de Boltzmann = 1.38.10<sup>-23</sup> J.K<sup>-1</sup> T: température (K)

#### III.2.4 Courant de court-circuit I<sub>cc</sub>

C'est le courant débité par la cellule quand la tension à ses bornes est nulle (en pratique, ce courant est très proche du photocourant lph). Il croit avec l'intensité d'illumination de la cellule et dépend de la surface éclairée, de la longueur d'onde du rayonnement, de la mobilité des porteurs et de la température [39].

Nous avons simulé la variation de la tension de circuit ouvert et courant de court-circuit en fonction de la concentration d'antimoine :



b) Ga<sub>0.8</sub>In<sub>0.2</sub>As<sub>1-y</sub>Sb<sub>y</sub>



c) Ga<sub>0.7</sub>In<sub>0.3</sub>As<sub>1-y</sub>Sb<sub>y</sub>

**FigureIII.4** : variation de la densité du courant de court-circuit et tension en fonction de la concentration d'indium et d'antimoine pour la structure Ga<sub>1-x</sub>In<sub>x</sub>As<sub>1-y</sub>Sb<sub>y</sub>/Si

Après simulation, on remarque que l'incorporation d'indium et d'antimoine engendre une augmentation du courant de court-circuit et une diminution du tension de circuit ouvert  $(V_{CO})$ .

#### III.2.5 Puissance électrique p

Dans des conditions fixes et ambiantes de fonctionnement (éclairement, température, vitesse de circulation de l'air ambiant, etc..), la puissance électrique P disponible aux bornes d'une cellule solaire est donnée par la relation suivante :

$$P = V * I = R * I^2$$
 III.7

Sur la **FigureIII.5**, nous avons tracé l'évolution de la puissance en fonction de la tension aux bornes de la cellule solaire pour différentes concentrations d'indium et l'antimoine.



a) Ga<sub>0.9</sub>In<sub>0.1</sub>As<sub>1-y</sub>Sb<sub>y</sub>



b) Ga<sub>0.8</sub>In<sub>0.2</sub>As<sub>1-y</sub>Sb<sub>y</sub>



c) Ga<sub>0.7</sub>In<sub>0.3</sub>As<sub>1-y</sub>Sb<sub>y</sub>



d) Ga<sub>0.6</sub>In<sub>0.4</sub>As<sub>1-y</sub>Sb<sub>y</sub>



e) Ga<sub>0.5</sub>In<sub>0.5</sub>As<sub>1-y</sub>Sb<sub>y</sub>

**FigureIII.5**:Variation de la puissance en fonction de tension du circuit ouvert pour différents concentration d'indium et d'antimoine.

La puissance maximale délivrée par la cellule est de l'ordre de quelques milliwatts, par conséquent, afin de produire plus de puissance, plusieurs cellules identiques (de type Ga<sub>1-x</sub>In<sub>x</sub>As<sub>1-y</sub>Sb<sub>y</sub>) sont assemblées pour former un module solaire (panneau photovoltaïque).

Afin de confirmer les résultats précédents, concernant la puissance, nous avons tracé sur la figure III.6 la variation de la puissance maximale en fonction de la concentration d'antimoine pour différentes compositions d'indium.



Figure III.6 : Représentation de la puissance maximale d'une cellule solaire pour la structure  $Ga_{1-x}In_xAs_{1-y}Sb_y/Si$ 

#### III.2.6 Facteur de forme FF

Les valeurs  $V_{max}$  et  $I_{max}$  sont définies de telle sorte que le produit  $|V_{max}*I_{max}|$  soit maximal (figure III.6). Ce produit correspond à la puissance maximale  $P_{max}$  pouvant être délivrée par la cellule photovoltaïque. Ce point  $P_{max}$  est obtenu en modifiant la valeur de la résistance externe, quand l'aire du rectangle défini par les axes Ox, Oy et les droites x=I<sub>m</sub> et y=V<sub>m</sub> passe par un maximum.

Le nom facteur de forme (fill factor) dérive de la représentation graphique. Il est égal au rapport de la surface du rectangle P max sur celle du rectangle dont les côtés mesurent  $V_{oc}$  et  $I_{cc}$ . Il est défini par la relation suivante :

$$FF = \frac{P_{max}}{V_{oc}*I_{cc}} = \frac{V_{m}*I_{m}}{V_{oc}*I_{cc}}$$
III.8

Plus ce paramètre est élevé, plus l'efficacité de conversion est meilleure. En dehors de ce point de fonctionnement  $P_m$  particulier, la diminution du courant par

recombinaison intervient à des points de fonctionnement ayant  $V_x$  supérieur à  $V_m$  et des pertes par chauffage (effet joule) des résistances séries apparaissent dans le cas  $I > I_m$ .

Il est appelé aussi le facteur de remplissage, il s'agit d'un rapport qui rend compte de la qualité de la forme de la caractéristique courant-tension.

Le facteur de forme peut aussi donner des informations sur la qualité des interfaces matériau-électrode. Lorsque sa valeur descend en dessous de 25%, cela trahit généralement la présence d'un contact non-ohmique ou d'une couche oxydée et/ou isolante à l'interface matériau-électrode.

Nous avons simulé la variation de facteur de forme FF en fonction de concentration d'indium et l'antimoine.



a) Ga<sub>0.9</sub>In<sub>0.1</sub>As<sub>1-y</sub>Sb<sub>y</sub>



c) Ga<sub>0.7</sub>In<sub>0.3</sub>As<sub>1-y</sub>Sb<sub>y</sub>



e) Ga<sub>0.5</sub>In<sub>0.5</sub>As<sub>1-y</sub>Sb<sub>y</sub>

**FigureIII.7**: Variation du facteur de forme en fonction de la concentration d'indium et d'antimoine pour la structure Ga<sub>1-x</sub>In<sub>x</sub>As<sub>1-y</sub>Sb<sub>y</sub>/Si

Le facteur de forme augmente avec l'accroissement des fractions d'indium et d'antimoine. Puisqu'il y a une croissance dans la puissance avec l'incorporation d'indium et d'antimoine cette croissance entraine un accroissement du facteur de forme qui détermine la qualité électrique de la cellule.

#### III.2.7 Le rendement, η

Le dernier et le plus important paramètre caractérisant la cellule photovoltaïque est le rendement **n**. Le rendement de conversion (Efficiency) exprimé en pourcentage, désigne le rendement de conversion en puissance. Il est défini comme étant le rapport entre la puissance maximale délivrée par la cellule et la puissance lumineuse incidente P<sub>inc</sub>

$$\eta = \frac{P_{max}}{P_{inc}} = FF * \frac{V_{oc} * I_{cc}}{P_{inc}}$$
 III.9

Ce rendement peut être amélioré en augmentant le facteur de forme, le courant de court-circuit et la tension à circuit ouvert.

Dans les conditions de référence STC (Standard Test Condition), c'est-à-dire sous l'ensoleillement de 1 000 W/m<sup>2</sup>, à la température de 25°C et sous un spectre AM 1.5, nous avons tracé la variation du rendement en fonction de la concentration d'antimoine et pour plusieurs compositions d'indium ; les résultats sont illustrés sur la **Figure III.8** 



a) Ga<sub>0.9</sub>In<sub>0.1</sub>As<sub>1-y</sub>Sb<sub>y</sub>



c) Ga<sub>0.7</sub>In<sub>0.3</sub>As<sub>1-y</sub>Sb<sub>y</sub>



**Figure III.8**: variation du rendement en fonction de la concentration d'indium et d'antimoine pour la structure Ga<sub>1-x</sub>In<sub>x</sub>As<sub>1-y</sub>Sb<sub>y</sub>/Si

Nous remarquons d'après la figure III.8 que l'augmentation des fractions d'indium et d'antimoine engendre une augmentation du rendement de conversion de la cellule solaire.

#### **III.3** Conclusion

Ce chapitre nous a permet de comprendre le principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque et de déduire la caractéristique courant-tension dont le courant photo généré augmentait avec l'accroissement des fractions d'indium et d'antimoine tandis que la tension en circuit ouvert diminuait. L'avenir énergétique mondial est l'une des questions majeures et d'actualité qui se pose sur la scène internationale, En effet les problèmes liés à la gestion de l'énergie dans le monde sont multiples .

De nos jours, la production mondiale d'énergie est réalisée à 74 % à partir de combustibles fossiles (pétrole, charbon et gaz), à 20 % par les énergies renouvelables (hydraulique, biomasse, solaire, éolien) et à 6 % par le nucléaire **[1]**.

L'énergie renouvelable peut être utilisée lorsqu'une ressource énergétique se régénère naturellement à une vitesse comparable avec celle de son utilisation. Le soleil, le vent, la chaleur de la terre, les chutes d'eau, les marées ou encore la croissance des végétaux sont ainsi des sources d'énergie renouvelables. Les énergies pétrolière et nucléaire n'appartiennent pas à cette classe puisque la réserve mondiale en pétrole et en uranium est limitée.



#### 10 filiales, 40 distributeurs, 80 pays

Figure 1: le photovoltaïque dans le monde.

La conversion photovoltaïque utilise le principe de la conversion directe de l'énergie lumineuse en une énergie électrique, les cellules solaires sont capables d'effectuer cette transformation. La première cellule solaire à homojonction en silicium a été fabriquée en 1954 aux Laboratoires 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 au seul usage à cause de leurs prix de revient très élevé et leurs faibles rendements.

Le développement dans le domaine de la micro-électronique a connu une énorme croissance durant le demi-siècle dernier. Ce développement est dû en grande partie aux évolutions techniques et en particulier à la miniaturisation des dispositifs semi –conducteurs, mais aussi à l'utilisation de nouveaux matériaux surtout les matériaux composés tel que les III-V et les II-VI pour différentes applications dans l'optoélectronique et l'électronique de puissance**[2].** 

Le présent mémoire est organisé en trois chapitres qui présentent, de manière assez fusionnée les divers paramètres électroniques et optiques les cellules photovoltaïques ainsi que les modèles mathématiques permettant de faire des analyses numériques.

le chapitre 1, sera consacré sur les notions de bases des semi-conducteurs et la description du principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque et nous terminons ce chapitre par la présentation des différents constituants de base d'une cellule photovoltaïque.

Le deuxième chapitre est consacré à l'étude des paramètres physiques et optiques de l'alliage GalnAsSb (paramètre de maille, le gap, le désaccord De maille avec le substrat Si, épaisseur critique, coefficient d'absorption coefficient de réflexion et l'indice de réfraction ) et les différentes équations qui donnent ces paramètres.

Les résultats de simulation de la structure à base de GalnAsSb sont illustrés dans le chapitre 3. Il est consacré à l'étude du courant et du rendement de notre cellule

Ce travaille ce termine par une conclusion générale des résultats obtenus et nous citrons quelque critères s'inscrivants dans la perspective d'une meilleure efficacité des cellules photovoltaïques.

2

## **Conclusion générale**

Le spectre solaire est un spectre très large pour être exploité par un seul semiconducteur, des vastes recherches sont fait afin de trouver des matériaux à moins coût et avec des rendements maximale pour les différents technologies des cellules photovoltaïque.

Ce travail porte sur l'étude et la modélisation d'une cellule solaire à base de GaInAsSb, de l'étude des matériaux de base, aux caractérisations électriques de la cellule solaire.

Nous avons présenté dans un premier chapitre les notions fondamentales des semiconducteurs et les propriétés optiques. En outre, nous avons abordé les notions fondamentales concernant le principe de l'effet photovoltaïque et la présentation d'une source d'énergie durable le soleil. Ensuite nous avons présenté les différents constituants de base d'une cellule photovoltaïque conventionnelle.

Ensuite, nous avons présenté dans le deuxième chapitre étudié les propriétés très particulières du matériau quaternaire GaInAsSb. Nous avons aussi étudié l'effet de l'incorporation de l'indium et de l'antimoine sur les différents paramètres électroniques et optiques.

Le chapitre trois a été principalement consacré sur la détermination de l'influence de la concentration d'indium et d'antimoine sur les paramètres électriques de la cellule solaire d'autre part l'augmentation des fractions d'antimoine et d'indium dans l'alliage provoque une augmentation du rendement de conversion s'explique par l'augmentation du photocourant et diminution de la tension de circuit ouvert cette augmentation du photocourant engendre une augmentation de puissance délivrée par la cellule, ce qui améliore le facteur de forme de la cellule solaire.

74

[1]: Ecole d'Eté d'Optoélectronique, PHYSIQUE DES SEMICONDUCTEURS III-VS. LAVAL Institut d'Electronique Fondamentale, CNRS (URA 022), Bat. 220. Université Paris Sud, F-91405 Orsay Cedex, France.

[2]: EL OUCHDI Ahmed Amine « Caractérisation du phénomène de transport électronique dans les matériaux composés ternaires Application au matériau Ga<sub>x</sub>In<sub>1-x</sub>Sb »Université Abou Bakr Belkaïd- TLEMCEN.

[3] : AIT AHMED KACI Sarah, BOUROUIS Imene : «ETUDE ET SIMULATION D'UNE STRUCTURE A BASE DE GaInNAs/GaAs POUR LE PHOTOVOLTAÏQUE», USDB, 2011.

[4] : B. Ilham : «Contribution à la modélisation d'une structure nanométrique : application aux transistors HEMTS et pseudomorphiques », mémoire Magister, Université de Mentouri Constantine, le 27 JUIN 2009.

[5] : S.Laval .Physique des semi-conducteurs III-V, Ecole d'été d'optoélectronique(2002).

[6] : BEDDA NAIMA : étude des propriétés des semi-conducteurs Si, GaAs et GaAlAs',

Université El-HadjLakhder- Batna, Magister en physique 2011.

[7]: A.Chovet, P Masson : « physique des semi-conducteurs », école polytechnique Paris tech, 2004-2005.

[8]: EL OUCHDI Ahmed Amine « Caractérisation du phénomène de transport électronique dans les matériaux composés ternaires Application au matériau Ga<sub>x</sub>In<sub>1-x</sub>Sb »Université Abou Bakr Belkaïd- TLEMCEN.

[9] : BOUKARAA Imene « Etude et simulation d'une structure à base de  $B_XGa_{1-X}N/AL_XGa_{1-X}N$  POUR APPLICATION PHOTOVOLTIAQUE » Université SAAD DAHLAB de BLIDA.

[10] : AISSAT Abdelkader: «Modélisation et Simulation du gain optique et du courant de seuil d'un laser à puits quantique contraint à base de  $Ga_XIn_{1-x}N_YAs_{1-Y}/GaAs$ », these, Ecole Nationale Polytechnique, 2007.

[11] : Rachid Bestam: «Modélisation et simulation d'une structure a base de semiconducteur III-V pour le photovoltaïque», these, USDB, 2011.

[12] :C.Saliha, B.Loubna : « Etude et simulation d'une structure à puits quantique à confinement séparé », mémoire fin d'étude, Université de Blida ,2001.

[13] : EL OUCHDI Ahmed Amine « Caractérisation du phénomène de transport électronique dans les matériaux composés ternaires Application au matériau Ga<sub>x</sub>In<sub>1-x</sub>Sb »Université Abou Bakr Belkaïd- TLEMCEN.

[14] : <u>http://www.science.uninantes.fr/physique/recherche/lamp/fr/photop/part3.pdf</u>

[15]: Energie solaire photovoltaique.doc << B. Flèche - D. Delagnes>>

[16]:L.A.DOBRZANSKI, A.DRYGALA: « Laser processing of multicrystalline silicon for texturization of solar cell », Journal of Materials Processing Technology

[17]: OULED ALI Mohammed : « Propriétés optoélectroniques du semi-conducteur Cu (In, Ga) Se<sub>2</sub> appliquée aux cellules photovoltaïques», Ecole Normale Supérieure de l'Enseignement Technologique d'Oran ENSET, 2011.

[18] Mme. DARANFED Ouarda «Elaboration et caractérisation de couches absorbantes des cellules solaires en couches minces à base de Cu<sub>2</sub>ZnSnS<sub>4</sub> » UNIVERSITÉ MENTOURI DE CONSTANTINE 1.

[19]: DIB Wassila : «MODELISATION DES STRUCTURES PHOTOVOLTAIQUES : ASPECTS FONDAMENTAUX ET APPLIQUES », these. (URMER) ABOU BEKR BELKÏD DE TLEMCEN ; 2011

[20] : djeriouat khadidja : « optimisation du rendement des cellules photovoltaïques à hétérojonction : GaInP/GaAs », these, Tlemcen : université Abou Bakr belkaid ,2011.

[21]: D.H.MCDONALD: «recombination and trapping in multicrystalline silicon solar cells », Australian National University, Canberra, Australia, 2001.

[22]: Steven R. Kurtz, A.A. Allerman, E.D. Jones, J.M. Gee, J.J. Banas, and B.E. Hammons : « InGaAsN solar cells with 1.0 eV band gap, lattice matched to GaAs», Appl. Phys. Lett, vol74, issue 5, 1999, Pp 729-732.

[23]: M. ORGERET, les piles solaires le composant et ses applications, Paris : Masson, 1985, pp. 87-143.

[24]: ] LÖLGEN PETER : « Surface and volume recombination in silicon solar cell», Pays Bas: Université Utrecht, Faculté Nature en Serrekunda, 1995.

[25]:J.Misiewicz, R.Kudrawiec, M.Gladysiewicz, and J.S.Harris: «Electromodulation Spectroscopy of GalnNAsSb/GaAs Quantum Wells: The Conduction Band Offset and the Electron Effective Mass Issues», Materials Science, Volume 105, 2008, Pp 163-179.
[26]: AIT AHMED KACI Sarah, BOUROUIS Imene: «ETUDE ET SIMULATION D'UNE STRUCTURE A BASE DE GalnNAs/GaAs POUR LE PHOTOVOLTAÏQUE», USDB, 2011.
[27]: K. Köksal, B. Gönül, M. Oduncuoğlu: «Critical Layer Thickness of Galn(n)As(sb) qws on

GaAs and InP Substrates for (001) and (111) Orientations», The European Physical Journal B, Volume 69, Issue 2, 2009, pp 211-218.

[28]: Yvan cuminal : «Réalisation et etude de diodes lazers à base de GaSb émettant vers 2.3 μm pour application à l'analyse de gaz», université Montpellier II, 1997.

[29]: SEGHILANI Mohamed seghir: «MODELISATION ET SIMULATION D'UNE STRUCTURE A MULTIPUITS QUANTIQUES CONTRAINTS A BASE DE GaInNAsSb/GaAs», mémoire de MAGISTERE, UNIVERSITE SAAD DAHLEB DE BLIDA, 2006.

[30]: NICHIPORUK OLEKSIY: «Simulation, fabrication et analyse de cellules photovoltaïques à contacts arrières interdigités», Institut national des sciences appliquées de LYON, 2005.
[31]: BOUKARAA Imene : «Etude et simulation d'une structure à base de B<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N/AL<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N POUR APPLICATION PHOTOVOLTIAQUE, Blida, USDB ,2012.
[32] : Aissat, F.Kerkar S. Nacer, M. El Bey, K. Ferdjani : «Gain optique d'un laser a puits quantique contraint à base de Ga<sub>x</sub>In<sub>1-x</sub>N<sub>y</sub>As<sub>1-y</sub>/GaAs», 4th International Conference: Sciences of Electronic, Technologies of Information and Télécommunications , TUNISIA, 2007.

[33] LOÏC BAILLY: «Cellules photovoltaïques organiques souples à grande surface ». Université bordeaux. Thèse de doctorat 2010.

[34] : djeriouat khadidja : « optimisation du rendement des cellules photovoltaïques à hétérojonction : GaInP/GaAs », these, Tlemcen : université abou bakr belkaid ,2011.

[35]: J.C.Rimada, L.Herna´ndez, J.P. Connolly, K.W.J. Barnham: «Conversion Efficiency enhancement of AlGaAs quantum well solar cells», Microelectronics Journal 38, 2007, pp 513–518.

[36]: jean pierre nerou : «les fibres optiques : introduction aux télécommunications par fibre optique», le griffon d'argille inc, 1983.

[37] : M. OUKACHMIH : « LES CELLULES PHOTOVOLTAIQUES A BASE DE MATERIAUX ORGANIQUES DISCOTIQUES», Thèse, Université Toulouse-Paul Sabatier, 2003.

[38]: CHRISTOPHE BALLIF : « Propriétés électriques et optiques de couches minces de WS<sub>2</sub> et MoS<sub>2</sub> en vue d'applications photovoltaïques », Thèse, Ecole polytechnique fédérale de Lausanne 1998.

[39] : M. OUKACHMIH : « LES CELLULES PHOTOVOLTAIQUES A BASE DE MATERIAUX ORGANIQUES DISCOTIQUES», Thèse, Université Toulouse-Paul Sabatier, 2003.

## **ANNEXES**

#### **ANNEXE A**

#### A.1 Indium - In

L'indium est un élément chimique, de symbole In et de numéro atomique 49. C'est un métal gris brillant, à bas point de fusion (156 °C), résistant à la corrosion atmosphérique. Ce métal malléable, ressemblant chimiquement à l'aluminium et au gallium, est rare, on ne le trouve qu'en quantité infime dans les mines de zinc. Sa récente utilisation massive, notamment dans les écrans\_plats\_LCD ont fait passer son prix de 80 €/kg à 800 €/kg entre. C'est une ressource\_non\_renouvelable.



#### A.1.1 Effets de l'indium sur la santé

L'indium n'a aucun rôle biologique. On dit qu'il stimule le métabolisme s'il est à de petites doses.

Des composés d'indium sont rarement produits par la plupart des personnes. Tous les composés d'indium devraient être considérés comme fortement toxiques. L'indium compose des dommages au cœur, au rein, et au foie, et peut être tératogénique.

Les données disponibles sont insuffisantes sur l'effet de cette substance sur la santé humaine, donc le plus grand soin doit être pris.

#### A.1.2 propriétés chimiques

Numéro atomique	49
Masse atomique	114,82 g.mol <sup>-1</sup>
Electronégativité de Pauling	2
Masse volumique	7,31 g.cm <sup>-3</sup> à 20°C
Température de Fusion	156 °C
Température d'ébullition	2000 °C
Rayon atomique (Van der Waals)	0,162 nm
Rayon ionique	0,092 nm (+2)
Isotopes	2
Configuration électronique	[Kr] 4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>1</sup>
Energie de première ionisation	558,2 kJ.mol <sup>-1</sup>
Energie de deuxième ionisation	1820,2 kJ.mol <sup>-1</sup>
Energie de troisième ionisation	2704 kJ.mol <sup>-1</sup>
Potentiel standard	- 0,34 V ( In <sup>3+</sup> / In )
Découverte :	En 1863 par Reich et Richter à l' aide d' un spectroscope. Présence d'une raie indigo dans son spectre. Propriétés communes avec Al et Zn.

#### A.2 L'antimoine Sb

L'antimoine est un élément\_chimique semi-métallique de la famille des pnictogènes, de symbole Sb et de numéro\_atomique 51. D'aspect blanc argenté et cassant, il présente des propriétés intermédiaires entre celles des métaux et des non-métaux. Il ne ternit pas à l'air à température ambiante et conduit mal la chaleur et l'électricité. L'antimoine est présent dans de nombreux minéraux, souvent allié au plomb, sous forme d'oxyde ou de sulfure.



#### A.2.1 Propriétés chimiques

Numéro atomique	51
Masse atomique	121,75 g.mol <sup>-1</sup>
Electronégativité de Pauling	1.9
Masse volumique	g.cm <sup>-3</sup> à 20°C
Température de Fusion	631 °C
Température d'ébullition	1380 °C
Rayon atomique (Van der Waals)	0,159 nm
Rayon ionique	0,245 nm (-3) ; 0,062 nm (+5) ; 0,076 nm (+3)
Isotopes	2
Configuration électronique	$[Kr] 4d^{10} 5s^2 5p^3$
Energie de première ionisation	834 kJ.mol <sup>-1</sup>
Energie de deuxième ionisation	1595 kJ.mol <sup>-1</sup>
Energie de troisième ionisation	2443 kJ.mol <sup>-1</sup>
Potentiel standard	0,21 V ( Sb <sup>3+</sup> / Sb)
Découverte :	Longtemps confondu avec ses composés, il est possible que le moine bénédictin Valentine l'ait préparé en 1492

#### A.2.2 Effets de l'Antimoine sur la santé

L'antimoine est présent naturellement dans l'environnement, mais il y est aussi introduit par l'activité humaine. C'est plus particulièrement les personnes qui travaillent avec de l'antimoine qui peuvent souffrir d'une exposition en respirant ses poussières. L'exposition de l'homme à l'antimoine peut se faire en respirant de l'air, en buvant de l'eau et en mangeant des aliments qui en contiennent, mais aussi par contact de la peau avec de terre, de l'eau ou une autre substance qui en contient. Respirer de l'antimoine qui est lié à l'hydrogène dans la phase gazeuse est la principale cause des effets sur la santé. Une exposition à des concentrations relativement hautes d'antimoines (9 mg/m<sup>3</sup> d'air) pendant une longue période peut provoquer des irritations aux yeux, à la peau et aux poumons. Si l'exposition se poursuit, des conséquences plus sérieuses peuvent survenir telles que des maladies des poumons, des problèmes aux cœurs, des diarrhées, des vomissements, et des ulcères d'estomac. On ne sait pas si l'antimoine peut provoquer des cancers ou des problèmes de reproduction. L'antimoine est utilisé comme médicament pour les infections parasitaires, mais les personnes qui ont pris trop de ces médicaments ou qui y étaient sensibles ont eu des problèmes de santé dans le passé. Ces problèmes de santé nous ont rendus plus conscient des dangers de l'exposition à l'antimoine.

#### A.2.3 Effets de l'antimoine sur l'environnement

L'antimoine peut être trouvé dans les sols, l'eau et l'air en très petites quantités. Il pollue principalement les sols. Il peut traverser de grandes distances dans les eaux souterraines et rejoindre d'autres régions ou des eaux de surface. Des tests en laboratoire sur des rats, des lapins et des cobayes ont montré que des niveaux relativement haut d'antimoine peuvent tuer les petits animaux. Les rats souffrent de problème aux poumons, au cœur, au foie et aux reins avant de mourir. Les animaux qui respirent des petites concentrations d'antimoine pendant une longue période peuvent souffrir d'irritation aux yeux, de perte de poils, et de dommages aux poumons. Les chiens peuvent souffrir de problèmes au cœur même quand ils sont exposés à des niveaux faibles d'antimoines. Les animaux respirant des niveaux faibles d'antimoines pendant plusieurs mois peuvent rencontrer des problèmes de fertilité. On n'a pas encore entièrement déterminé si l'antimoine pouvait provoquer un cancer

#### A.3 Epitaxie

L'épitaxie est une étape technologique consistant à faire croître du cristal sur du cristal. Étymologiquement, « épi » signifie sur et « Taxie » arrangement. La technique va donc consister à utiliser le substrat comme germe cristallin de croissance et à faire croitre la couche par un apport d'éléments constituant la nouvelle couche.

#### **ANNEXE B**

#### **B.1** Tableau périodique



TableauB.1: Tableau périodique des éléments

#### **B.2 Caractéristique des matériaux massifs**

Il est nécessaire de connaitre un certain nombre de paramètre physiques caractéristique des matériaux utilisé dans cette thèse. Ces paramètres des principaux binaires sont illustrés dans le tableau ci-dessous.

Matériau	GaAs	GaSb	InAs	InSb
a (nm)	5.653	6.0954	6.058	6.4794
Eg (eV)	1.42	0.72	0.36	0.17
C11	1221	884.2	832.9	684.7
C12	566	402.6	452.6	373.5
a <sub>c</sub> (eV)	-7.17	-7.5	-5.08	-6.94
a <sub>v</sub> (eV)	-1.16	-0.8	-1.00	-0.36
b	-2.0	-2.0	-1.8	

Tableau B.2 : Paramètres physiques fondamentaux des principaux binaires III -V.

Pour les alliages ternaires ou quaternaires, les paramètres a, Eg, ac, av,  $E_{vav}$ , delta<sub>0</sub>, b, C<sub>11</sub>, C<sub>12</sub>, m<sub>e</sub>,  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$ , N<sub>C</sub>, N<sub>V</sub>,  $\mu$ n,  $\mu$ p sont déterminés à partir de la relations d'interpolation (loi de Vegard).

#### B-3 indice de réfraction dans le matériau massif

La variation des indices de réfraction des matériaux semi-conducteurs massifs sous le gap a été évaluée selon la formule de Sellmeier :

$$n^{2}(\lambda) = \left(A + \frac{B}{1 - C/\lambda^{2}} + \frac{D}{1 - E/\lambda^{2}}\right)$$
**B-1**

Les coefficients de Sellmeier des principaux binaires III-V sont donnés dans le tableau suivant :

	Α	В	С	D	E
GaAs	3.5	7.4969	1666.3	1.9347	1382
GaSb	13.095	0.7546	16070.651	0.68	100
InAs	11.1	0.71	65076	2.75	2085
InSb	15.39	0.104253	511849.4	3.47	2000

Tableau B-3 : coefficient de Sellmeier pour les principaux binaires III-V

Les indices de réfraction de quaternaire est ensuite calculé à partir des indices des binaires selon la loi de Vegard.

$$n_{GaInAsSb=}^{2}(1 - x).(1 - y).n^{2}(GaAs) + (1 - x).y.n^{2}(GaSb) + x.(1 - y).n^{2}(InAs) + x.y.n^{2}(InSb)$$
  
B.2

### Liste des figures

### Chapitre I

Figure I-1: L'évolution de l'énergie de bande interdite et du paramètre cristallin des	
alliages de composés III-V	. 6
Figure I-2:les réseaux possibles d'un cristal cubique	7
Figure I-3 : La structure Zinc-blende	8
Figure I-4: La structure wurtzite	8
Figure I-5 : illustration des deux types de deformation	9
Figure I-6 : illustration d'une couche contrainte	10
Figure I-7 : Schéma de bande d'énergie d'un semi-conducteur	11
Figure I-8 : Structure de bande shématique d'un semi-conducteur à gap direct et à gap indirect.	12
Figure I-9: Silicium de type n	3
Figure I-10: Silicium de type p 14	4
Figure I-11 : configuration des bandes de conduction et de valence dans une	
hétérostructure de type I et de type II	15
Figure I-12 : les trois événements optiques d'un rayon lumineux	16
Figure I-13 :Définition de l'air masse	18
Figure I-14 : Spectre électromagnétique.	19
Figure I-15 :Irradiance en fonction de la longueur d'onde AM.	20
Figure I-16 : Répartition des matériaux sur le marché mondial du photovoltaique	21
Figure I-17 : Image d'une cellule, panneau et champ photovoltaique	24
Figure I-18 : Shéma de la structure d'une cellule photovoltaique illustration	25
Figure I-19 : Impact relatif des pertes optiques, résistives et par recombinaison pour une	
cellule Silicium multi cristallin industrielle	26

Figure I-20 : Représentation simplifiée d'une cellule photovoltaique standard.	

Figure I-21 : Schéma de principe des réflexions lumineuses sur une surface texturée ...... 27

### Chapitre II

Figure II-1 : Schéma de la maille élémentaire du silicium
Figure II-2: Variation du paramètre de maille de Ga $_{1-x}$ In $_x$ As $_{1-y}$ Sb $_y$ en fonction de la concentration d'indium et d'antimoine
Figure II-3 : variation du désaccord paramétrique en fonction de la concentration d'indium et d'antimoine de la structure Ga 1-x In xAs 1-y Sby /Si
Figure II-4 : variation de l'épaisseur critique en fonction des fractions d'indium et d' antimoine
Figure II-5 :.Evolution de l'énergie du gap non contraint en fonction des concentrations d'indium et d'antimoine de la structure Ga 1-x In xAs 1-y Sby /Si
Figure II-6 : structure de bande d'un semi-conducteur à gap directe
Figure II-7 :décalages énergétiques induits par la contrainte hydrostatique en fonction des concentratios d'indium et d'antimoine
Figure II-8 : décalages énergétiques induits par la contrainte cisaillement pour chacune des bandes constituant la bande de valence en fonction des concentratios d'indium et d'antimoine
Figure II-9 :. Evolution de l'énergie du gap contraint après éclatement en fonction des concentrations d'indium et d'antimoine de la structure Ga 1-x In xAs 1-y Sby /Si
Figure II-10 :Eclatement de la bande de valence en deux sous bandes Eghh+ et Eghh- en fonction du pourcentage de l'antimoine selon le modèle VBAC
Figure II-11 : Eclatement de la bande de valence en deux sous bandes Eglh+ et Eglh- en fonction du pourcentage de l'antimoine selon le modèle VBAC
Figure II-12 : Variation de coefficient d'absorption en foction des fractions d'indium et d'antimoine pour différentes énergies des photons incidents
Figure II-13 : Variation de coefficient d'absorption en foction de la longueur d'onde pour la structure Ga 1-x In xAs 1-y Sby

Figure II-14 : variation de l'indice de réfraction en fonction de la longueur d'onde pour lastructure Ga 1-x In xAs 1-y Sby49	9
Figure II-15 : Variation de coefficient de réflexion dans l'air en fonction de la longueur d'onde pour la structure Ga 1-x In xAs 1-y Sby	1
Chapitre III	
Figure III-1 : Variation de l'efficacité quantique en fonction de la longueur d'onde pour la structure Ga 1-x In xAs 1-y Sby /Si	б
III-2 : Caractéristiques I=f (V) sous obscurité et sous éclairement d'une cellule photovoltaïque	8
Figure III-3 : représentation de la caractéristique I=f(V) pour la structure Ga1-xInxAs1- ySby/Si	0
Figure III-4 : variation de la densité du courant de court-circuit et tension en fonction de la concentration d'indium et d'antimoine pour la structure Ga <sub>1-x</sub> In <sub>x</sub> As <sub>1-y</sub> Sb <sub>y</sub> /Si	3
Figure III-5 : Variation de la puissance en fonction de la tension pour la structure Ga 1-x In xAs 1-y Sby /Si	6
Figure III-6 : Représentation de la puissance maximale d'une cellule solaire pour la structure Ga 1-x In xAs 1-y Sby /Si6	7
Figure III-7 : Variation de facteur de forme en fonction de la concentration d'indium et d'antimoine pour la structure Ga 1-x In xAs 1-y Sby /Si	0
Figure III-8 : variation du rendement en fonction de la concentration d'indium et d'antimoine pour la structure Ga 1-x In xAs 1-y Sby /Si73	3
Figure III-9 : Schéma électrique équivalent d'une cellule.    74	4

# Introduction générale