الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
République Algérienne démocratique et populaire

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

جامعة سعد دحلب البليدة
Université SAAD DAHLAB de BLIDA

كلية التكنولوجيا
Faculté de Technologie

قسم الإلكتروني
Département d'Électronique

Mémoire de Projet de Fin d'Études

présenté par

BOUZOUIDJA AHMED OUSSAMA

&

BENAMAROUCH ABDENOUR

pour l'obtention du diplôme de master en Électronique option MMCC

Thème

étude et simulation d'une structure à base des semi-conducteurs SiGe pour application photovoltaïque

Proposé par : Aissat Abdelkader

Résumé

Ce travail porte sur l'étude et la simulation d'une structure à base de semi-conducteurs Si et Ge pour une application photovoltaïque. Nous avons étudié l'influence de la concentration du Ge sur les différents paramètres de l'alliage SiGe épitaxié sur substrat de Si. En effet l'augmentation de la densité du Ge diminué le Gap de l'alliage SiGe ce qui est intéressant pour absorber le maximum du spectre solaire, ce qui fait que ce matériau devient important dans le domaine photovoltaïque.

REMERCIEMENT

Au terme de ce modeste travail, tout remerciement et louange à **ALLAH** Tout Puissant de m'avoir accordé la volonté, le courage, et la patience de mener à terme le présent travail.

Mes gratitudes vont aussi à mon Promoteur Monsieur AISSAT ABDELKADER.
Ici on écrit ce que on devrait dire avant d'écrire : merci beaucoup monsieur de m'avoir guidé et suivi. A souligner que son aide a été d'une grande utilité dans la réalisation de mon travail.

Un grand merci à mon Co-Promoteur Monsieur BESTAM RACHID, pour son aide et également pour sa gentillesse et sa modestie.

Un grand merci à tous les enseignants de Département de l'électroniquequi ont contribué à notre formation.

Merci à mes collègues, ainsi qu'à mes amis de promotion, pour leur aide et leur soutien moral. Je n'oublierais pas tous les moments que nous avons traversés ensemble.

Mes vifs remerciements pour ma famille, en particulier mes parents qui m'ont soutenu durant mes études et qui m'ont toujours encouragé. Leur générosité est inestimable. Merci aussi à tous mes amis.

Je terminerais en remerciant tous ceux et toutes celles qui ont contribué, de près ou de loin à la réalisation de ce travail.

TABLE DES MATIERES

Résumé

Remerciements

Table des matières

Liste des figures et des tableaux

Liste des symboles et des abréviations

Introduction générale

…….1

Chapitre I :

1.1 introduction

……..... 3

1.2 Le soleil

……... 4

1.2.1 le spectre solaire

……..... 4

1.3 l'effet photovoltaïque

…….6

1.4 la cellule photovoltaïque

……..7

1.4.1 cellule photovoltaïque à jonction P/N

……....7

1.5 Caractéristique et schéma équivalent de la cellule photovoltaïque

…….9
1.5.1 Cellule photovoltaïque idéale ……..9
1.5.2 Cellule photovoltaïque réelle ……..9
1.6 Paramètre de la cellule photovoltaïque ……. 12
1.7 Les pertes physiques et technologiques …… 12
1.7.1 Les pertes physiques …… 13
1.7.2 Les pertes technologiques ……14
1.8 Les différentes technologies photovoltaïques …… 15
1.8.1 La filière à base de silicium cristallin …… 15
1.8.2 Nouvelle technologie photovoltaïque ……16
1.8.3 technologie couche mince ……16
1.8.4 Les cellules multi-jonctions à haut rendement ……16
1.9 Conclusion ……...
19

Chapitre II : Etude de la structure Si/SiGe/Ge

2.1 Introduction ……20
2.2 Le paramètre de maille …….. 20
2.3 Notion du gap indirect …… 22

2.4 Notion de couche contrainte et épaisseur critique……. 23
2.4.1 Couche contrainte ……23
2.4.2 Epaisseur critique h_c ……. 24
2.5 Effet de la contrainte sur le Gap ……26
2.6 Effet de la température sur le Gap ……..30
2.7 Le Coefficient d'absorption …… 31
2.8 Conclusion…….....32

Chapitre III : Simulations et interprétations

3.1 Introduction …… 35
3.2 Simulation et interprétation…….. 35
3.2.1 le paramètre de maille …… 35
3.2.2 l'épaisseur critique …… 36
3.2.3 le désaccord paramétrique …… 37
3.2.4 l'effet de la contrainte …… 38
3.2.4.1 l'effet de la contrainte sur le gap ……..

38

3.2.4.2 l'effet de la contrainte sur le coefficient d'absorption …….
39

3.2.5 effet de la température sur le Gap et le coefficient d'absorbtion …….
40

3.2.6 l'effet de la pression sur le Gap et le coefficient d'absorption……
41

3.2.7 gamme d'absorption d'une cellule ZnO/ZnSe/Si/SiGe/Ge sous éclairement … 43

3.2.8 efficacité quantique EQE pour déférente concentration de germanium ……..
44

3.2.9 la densité du courant pour différente concentration de germanium ……
46

3.2.10 la puissance pour différente concentration de germanium…… 48

3.3 Conclusion…… 51

Conclusion générale……. 52

LISTE DE FIGURES

CHAPITRE 1 :

Figure.1-1 Différentes air masse AM.

Figure.1-2 Représentation du spectre solaire, hors atmosphère AM0, au niveau de la mer
avec le soleil au zénith AM1, avec le soleil à 48° par rapport à l'équateur AM1.5

Figure.1-3 Transitions électroniques pour un gap direct (a) et un gap indirect (b)

Figure.1-4 Schéma de la structure d'une cellule photovoltaïque illustration (a) phénomène de photo-génération (b) collecte des porteurs pour différentes longueurs d'ondes

Figure.1-5schéma équivalent de la cellule idéale

Figure.1-6caractéristique et schéma équivalent d'une cellule photovoltaïque réelle

Figure.1-7 Exemple de réseau de caractéristiques d'un générateur photovoltaïque

Figure.1-8rendement théorique de la cellule idéale

Figure.1-9 Contribution des recombinaisons radiative, Auger et SRH sur la durée de vie effectivedes porteurs minoritaires en volume, en fonction du niveau d'injection.

Figure.1-10principe de la cellule multi-jonction

Figure.1-11schéma de principe d'un concentrateur photovoltaïque

Chapitre II

Figure.2-1 la façade SUD du locale étudié

Figure.2-2 Schéma de la structure cristal diamant.

Figure.2-3 Structures de bandes du Germanium et du Silicium.

Figure.2-4 Couche totalement contrainte a) cas ($a_{epitax} > a_{sub}$)compression, b) cas ($a_{epitax} < a_{sub}$) allongement

Figure.2-5 Propagation de dislocation dans la couche épitaxie épaisse.

Figure.2-6 Evolution des bandes de conduction(a) et deValence (b) des matériaux $Si_{1-x}Ge_x$ ($x \leq 0,5$) sous l'effet d'uneContrainte biaxiale

Tableaux :

Tableau.2-1 Paramètre de maille des matériaux Si et Ge

Tableau.2-2 Paramètres de variation du Gap [10]

Chapitre III

Figure 3 .1 : le paramètre de maille.

Figure 3 .2 : L'épaisseur critique Hc en fonction de la concentration du silicium.

Figure 3.3 : le Désaccord paramétrique en fonction de la concentration de germanium.

Figure 3.4 : Effet de la contrainte sure le gap .

Figure 3.5 :le coefficient d'absorption pour chaque couche en fonction de la longueur

d’onde

Figure 3.6 : Effet de la température sur le gap.

Figure 3.7: Effet de la température sur le coefficient d’absorption .

Figure 3.8 : Effet de la pression sur le gap.

Figure 3.9 : Effet de la pression sur le coefficient d’absorption.

Figure 3.10:l’absorption du spectre solaire par les différentes couches avec une concentration de germanium 20% .

Figure 3.11 : l’absorption du spectre solaire par les différentes couches avec une concentration de germanium 50% .

Figure 3.12 :l’efficacité quantique pour les différentes couches en fonction de la longueur d’onde avec une concentration de germanium 20% .

Figure 3.13 : l’efficacité quantique pour les différentes couches en fonction de la longueur d’onde avec une concentration de germanium 50% .

Figure 3.14 : l’efficacité quantique pour les différentes couchesen fonction de la longueur d’onde avec une concentration de germanium 63% .

Figure 3.15 :la densité de courant pour les différentes couches en fonction de la tension de polarisation avec une concentration de germanium 20% .

Figure 3.16 : la densité de courant pour les différentes couches en fonction de la tension de polarisation avec une concentration de germanium 50% .

Figure 3.17 : la densité de courant pour les différentes couches en fonction de la tension de polarisation avec une concentration de germanium 63% .

Figure 3.18 : la densité de puissance pour les différentes couches en fonction de la tension de polarisation avec une concentration de germanium 20% .

Figure 3.19 : la densité de puissance pour les différentes couches en fonction de la tension de polarisation avec une concentration de germanium 50% .

Figure 3.20 : la densité de puissance pour les différentes couches en fonction de la tension de polarisation avec une concentration de germanium 63% .

Introduction générale

La découverte de l'effet photovoltaïque remonte à l'année 1839 quand le physicien français Edmond Becquerel observa le changement de la tension d'une électrode en platine sous l'effet de l'illumination avec la lumière, Einstein en expliqua le mécanisme en 1912, mais cela resta une curiosité scientifique de laboratoire. La génération d'une petite quantité d'électricité par l'illumination de certains solides tels que le sélénium fut étudiée par Heinrich Hertz dès les années 1870. Avec des rendements de l'ordre de 1%, le sélénium fut rapidement adopté par des photographes comme luxmètre. De rapides progrès furent obtenus dès les années 1954 par les équipes des Bell Laboratoires aux Etats-Unis qui fabriquèrent la première cellule au silicium cristallin d'un rendement de 4% à partir du procédé de tirage de Czochralski. Ce furent en fait les programmes spatiaux qui donnèrent à cette technologie dans les premières applications pratiques. En 1958 le satellite artificiel américain Vanguard emporta un petit générateur solaire pour alimenter sa radio.

En 1960, le rendement a été porté à une valeur supérieure à 10% pour les cellules solaires 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 élevés et leurs faibles rendements. [1]

En 2001, SHMIDT-MENDE réalisent une cellule solaire auto assemblée à base de cristaux liquides de hexabenzocoronene et pérylène. L'entreprise Fujikura (fabriquant de composés électroniques) est parvenue à faire fonctionner une cellule photovoltaïque organique de type DSSC (Dye-Sensilized Solar Cell ou cellule Gratzeal) en continu à une température de 85C°et à taux d'humidité de 85% pendant 1000 heures.

Durant ces dernières années, le marché du P.V s'est considérablement développé avec l'amélioration du rendement de conversion et la réduction des couts de production due à la substitution du Si par des matériaux organiques.

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.

L'énergie solaire photovoltaïque occupe une grande place dans la recherche, et connaît une croissance de plus en plus importante. Cette recherche est orientée sur deux axes essentiels, qui peuvent sembler opposés :(augmentation du rendement de la cellule, et diminution du coût de production) [2].

Ce développement passe essentiellement par la maîtrise des matériaux utilisés dans la conception des composants. La plupart de ces matériaux sont obtenus par alliage sur des substrats standards. Ils pourraient à priori couvrir une large gamme de compositions et donc d'applications [3].

Les alliages à base du SiGe qui font l'objet de ce travail permettent d'entrevoir des possibilités de développement des cellules solaires et peuvent être concurrentiels du silicium et des composés II-VI.

Dans le premier chapitre, nous présentons des notions le spectre solaire, le principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque, la caractéristique électrique et les principaux facteurs limitant le rendement de conversion qui permettent de modéliser la cellule par un circuit électrique.

Le deuxième chapitre, est consacré à présenter la structure cristallographique et la structure de bande de l'alliage $Si_{1-x}Ge_x$ ainsi que le coefficient d'absorption et l'effet de la contrainte et la température sur le Gap.

CHAPITRE I

Généralités sur l'énergie solaire et la cellule photovoltaïque

I.1 Introduction :

La quantité d'énergie consommée n'a cessé d'augmenter au cours de l'histoire de l'humanité, conduite par l'accroissement de la population mondiale, les évolutions techniques et les améliorations des conditions de vie. L'Homme a trouvé des moyens d'obtenir cette énergie à partir de ressources diverses.

Si l'on regarde maintenant les sources d'énergie, on voit que la grande majorité de l'énergie produite est issue de ressources fossiles. Celles-ci sont des ressources limitées qui arriveront en pénurie à plus ou moins brève échéance et génèrent de plus des tensions géopolitiques liées à leur répartition inégale à la surface du globe. Le charbon et les hydrocarbures relâchent des gaz à effet de serre et causent des inquiétudes sur les changements climatiques tandis que le nucléaire produit des déchets dangereux que l'on ne sait pas neutraliser et pose des problèmes de sécurité. [4]

Ces problèmes sont très amoindris en ce qui concerne les énergies renouvelables. La ressource est en perpétuel renouvellement, elle est mieux répartie sur le globe et ces énergies génèrent beaucoup moins de gaz à effet de serre. Cependant, elles sont encore très minoritaires dans la production d'énergie. Cela est attribué à une densité de production d'énergie faible, des coûts élevés et des rendements encore trop bas. Résoudre ces difficultés permettrait donc d'augmenter leur part dans le bouquet énergétique et ainsi d'atténuer les inconvénients que l'utilisation massive d'énergies fossiles nous fait subir. Parmi les énergies renouvelables, un candidat de choix est le photovoltaïque.

En effet le mot " photovoltaïque " vient de la grecque " photo " qui signifie lumière et de

"Voltaïque" qui tire son origine du nom d'un physicien italien Alessandro Volta (1754 - 1827) qui a beaucoup contribué à la découverte de l'électricité, alors le photovoltaïque signifie littérairement la ≪lumière électricité ≫ [5].

Pour décrire le fonctionnement d'une cellule photovoltaïque, il est nécessaire de présenter le rayonnement solaire qui est la source d'énergie incidente.

I.2 Le soleil :

Le soleil est une étoile considérée comme source d'énergie inépuisable .Cette étoile distante de 150 millions de km de la terre est constituée d'environ 85% d'hydrogène et de 15% d'hélium. Sa température interne est de 15 à 20 millions de degrés Celsius. Ce flot continu de chaleur provient d'une fusion nucléaire qui transforme l'hydrogène en hélium.

Son diamètre est d'environ 1 391 000 km quant à Son volume, il est l'équivalent de 1 300 000 fois le volume de la terre avec une densité de 1,41 contre 5,50 pour la terre. Sa masse est de 333.000 fois celle de la Terre soit deux milliard de tonnes, Il représente 99,867 % de la masse totale du système solaire, c'est-à-dire que l'ensemble de toutes les planètes ne représente que le millième du Soleil [6].

I.2.1 Le spectre solaire :

Le spectre solaire, en première approximation, s'apparente plutôt au spectre d'émission d'un corps noir de température 5 900 K. Le soleil émet donc un spectre dans des longueurs d'onde de 290 à 2770 nm qui comprend les rayons ultraviolets, les couleurs de l'arc-en-ciel et les rayons infrarouges.

L'atmosphère terrestre joue le rôle de filtre et ne laisse passer qu'une partie de ce spectre. Outre l'absorption dans les différentes couches de l'atmosphère, la latitude du lieu d'observation, les conditions climatiques (saison, temps) et aussi les gaz présents dans l'atmosphère (l'ozone O3, le dioxyde de carbone CO2 et l'eau H2O) constituent des obstacles limitant la diffusion de la lumière. La notion d'AM pour «Air Mass» (masse atmosphérique) a été définie pour pouvoir comparer les performances des cellules photovoltaïques. Cette convention permet d'harmoniser les résultats obtenus dans les laboratoires. AM quantifie la puissance absorbée par l'atmosphère en fonction de l'angle θ du soleil par rapport au zénith. [7]

Le spectre solaire AM0, correspond à une masse d'air nulle pour un éclairement solaire au-delà de l'atmosphère à incidence normale. Pour un ciel clair avec le soleil à l'aplomb, on a le rayonnement de la masse d'air "1" (ou AM1), AM2 lorsqu'on a une inclinaison de 60°, L'éclairement solaire arrivant sur la terre avec un angle de 48° est de 1000 W/m² (soit 100mw/cm²) avec une masse d'air 1.5 (figure I.1) [8].

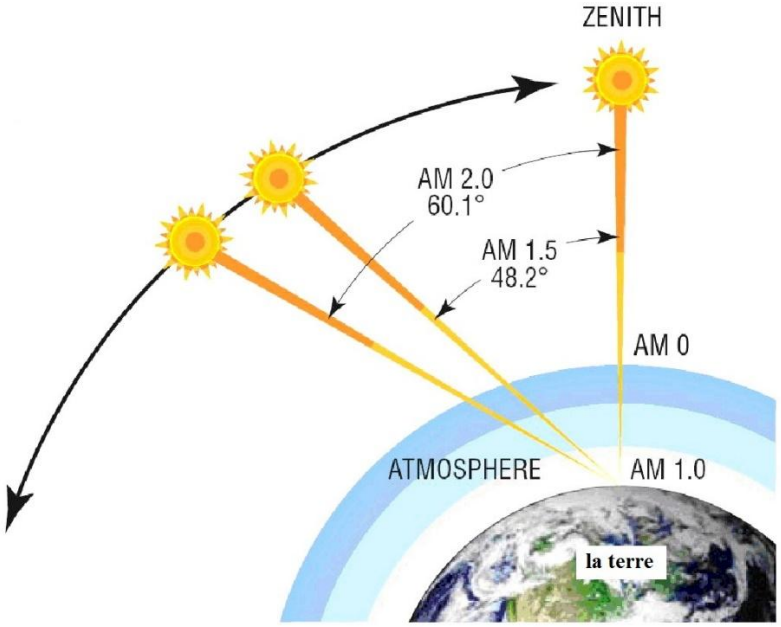

Figure I.1 : Différentes air masse AM.

Le spectre solaire 1.5 est composé de 3~4 % de lumière ultraviolette (< 390 nm), de 45 % de lumière visible (390-750 nm) et de 52 % de lumière infrarouge [IR proche (750-1400 nm) = 38 % et IR Lointain (> 1400 nm) = 14%] .La figure (1.2) montre que l'éclairement est maximal entre 450 nm et 700 nm. Parmi les facteurs majeurs qui sont impliqués dans une conversion photovoltaïque efficace, il y a l'absorption de la de la lumière blanche reçue sur terre.

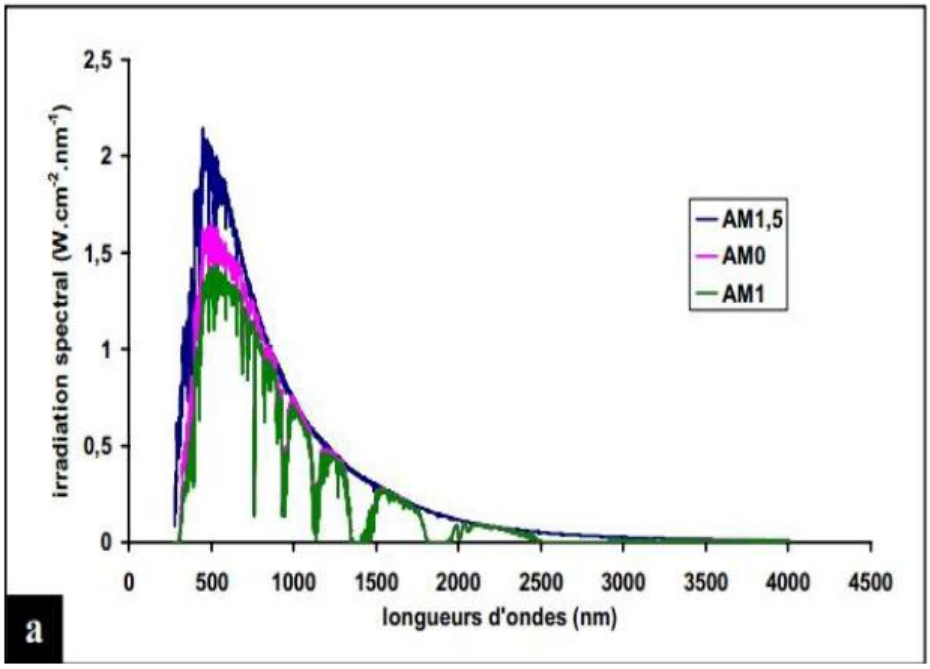

Figure I.2 : Représentation du spectre solaire, hors atmosphère AM0, au niveau de la mer avec le soleil au zénith AM1, avec le soleil à 48° par rapport à l'équateur AM1.5

I.3 L'effet photovoltaïque :

L'effet photovoltaïque a été mis en évidence pour la première fois par E. Becquerel en 1839 : il découvrit que certains matériaux délivraient une petite quantité d'électricité quand ils étaient exposés à la lumière. Albert Einstein expliqua le phénomène photoélectrique en 1912, mais il fallut attendre le début des années 50 pour sa mise en application pratique dans la réalisation d'une cellule PV en silicium d'un rendement de 4,5% [9].

Dans les matériaux conducteurs, les charges libérées se recombinent quasi-instantanément et peuvent difficilement être collectées. L'usage de certains matériaux semi-conducteurs permet la réduction de ces recombinaisons et l'application de l'effet photovoltaïque à la production d'électricité. Un matériau semi-conducteur se caractérise par son énergie de gap EG entre la bande de valence (BV) et la bande de conduction (BC).

A l'équilibre, les électrons possèdent une énergie correspondant à des états situés dans la BV et sont dits « liés ». Un photon incident, dont l'énergie h est supérieure à l'énergie de gap EG du matériau, peut permettre le passage d'un électron de la bande de valence à la bande de conduction. On considère alors que l'électron ayant rejoint la bande de

conduction est excité, et qu'il laisse un trou (équivalent à une charge positive) dans la bande de valence. La paire électron/trou (e/h) créée forme un exciton. [10]

(La figure I.3) présente les différentes transitions possibles selon la nature du gap. Quand le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence coïncident dans l'espace des k, il s'agit d'un gap direct. Les transitions inter bandes s'effectuent verticalement, et sont donc radiatives (figure I.3 (a)). Ceci illustre le fonctionnement des semi-conducteurs binaires III-V, tels que le Gagas, beaucoup utilisés en optoélectronique. Dans le cas du silicium, le gap est indirect : les transitions électroniques entre les extrema des bandes sont obliques, donc non radiatives puisqu'elles impliquent un changement du vecteur d'onde de l'électron. Les électrons du sommet de la bande de valence peuvent toutefois être directement excités vers le minimum relatif central de la bande de conduction grâce à un photon de plus grande énergie. Pour que la transition s'effectue dans le gap indirect, il faut qu'un photon soit au préalable absorbé (ou émis) par l'électron, afin que le vecteur d'onde de ce dernier corresponde au maximum de la bande de valence, pour absorber un photon (figure I.3 (b)). Notons que la valeur du gap indirect du silicium est de 1,12 eV à 300 K (ce qui correspond à une longueur d'onde de 1107 nm), mais celle du premier gap direct vaut 3,4 eV (soit 365 nm). [11]

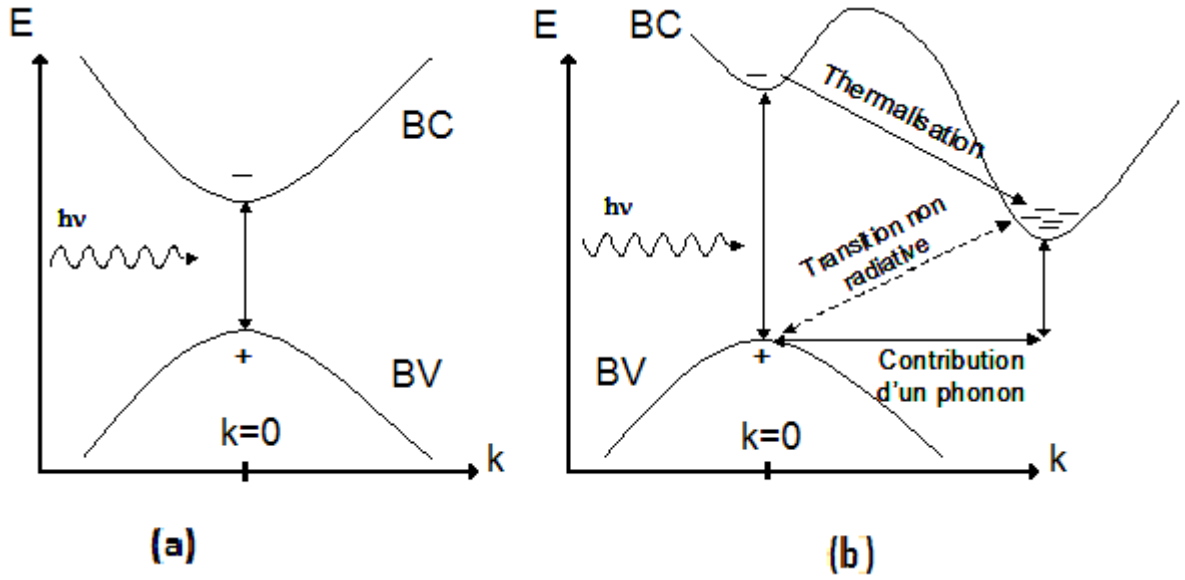

Figure I.3 : Transitions électroniques pour un gap direct (a) et un gap indirect (b)

I.4 La 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.

De nombreux matériaux et procédés peuvent potentiellement remplir ces conditions pour donner une conversion photovoltaïque. En pratique, les matériaux semi-conducteurs, sont les plus utilisés, sont le plus souvent sous la forme d'une jonction p-n [12].

I.4.1 Cellule photovoltaïque a jonction P/N :

Le courant inverse d'une jonction p-n est fonction d'une part des densités de porteurs minoritaires dans les régions neutres de la diode, et d'autre part de la génération de paires électron-trou dans la zone de charge d'espace.

Dans une photodiode, le rayonnement augmente le courant inverse par la création de porteurs minoritaires dans les régions neutres et la génération de paires électrons-trous dans la zone de charge d'espace.

Le principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque est illustré sur la (figure I.4). Les photons incidents créent des porteurs dans chacune des régions N, P et la zone de charge d'espace. Le comportement de ces porteurs libres diffère suivant le lieu de leur création. Dans les zones électriquement neutres N et P, les photo-porteurs minoritaires diffusent, ceux qui atteignent la région de charge d'espace sont propulsés par le champ électrique E vers la région ou ils deviennent majoritaires. Ces photo-porteurs contribuent donc au courant par leur diffusion, ils créent un photo-courant de diffusion.

Dans la zone de charges d'espaces, les paires électrons-trous créées par les photons sont dissociées par le champ électrique E, l'électron est propulsé vers la région type N et le trou vers la région de type P. ces porteurs donnent naissance à un photo-courant de génération. Ces deux contributions s'ajoutent pour créer un photo-courant résultant I_{ph}. C'est un courant de porteurs minoritaires. Il est proportionnel à l'intensité de la lumière [13].

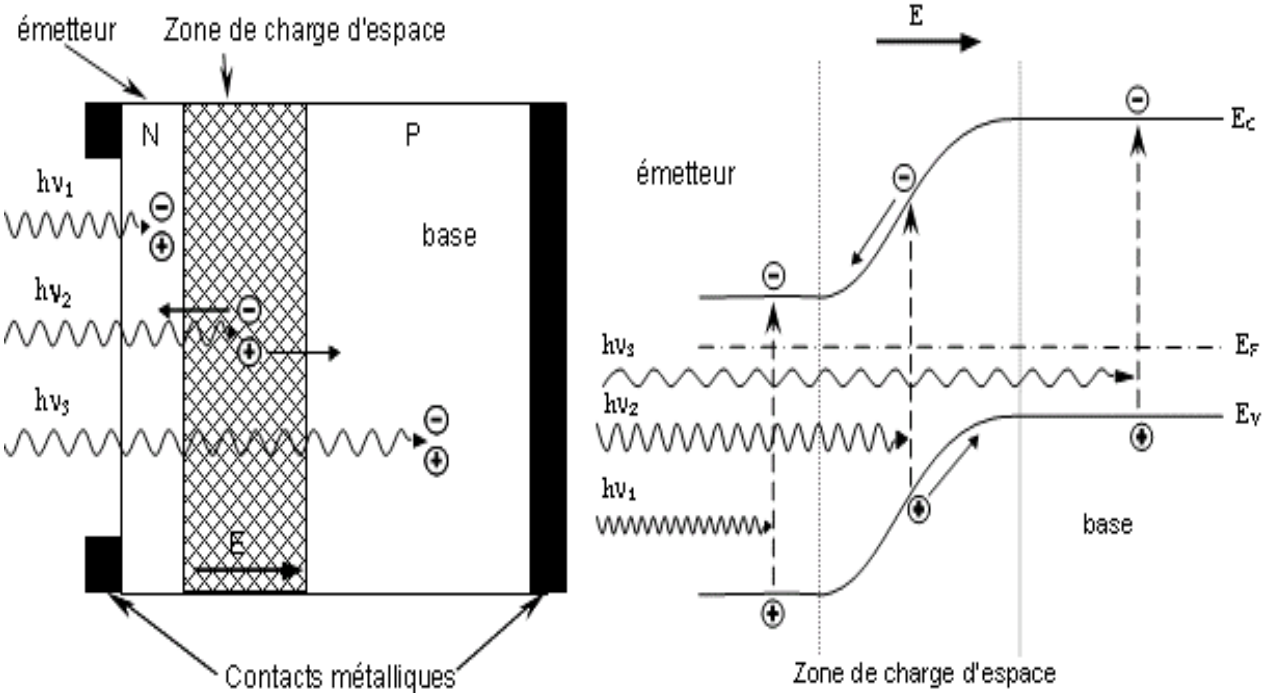

Figure I.4 : Schéma de la structure d'une cellule photovoltaïque illustration (a) phénomène de photo-génération (b) collecte des porteurs pour différentes longueurs d'ondes

I.5 Caractéristique et schéma équivalent de la cellule photovoltaïque :

I.5.1 Cellule photovoltaïque idéale :

Dans ce nouveau repère, l'équation d'une caractéristique correspondant à un éclairement E en W.m^{-2} Est donné par [14]

$$I_P = I_{cc} - I_s exp\left(\frac{eV_p}{KT} - 1\right) \qquad (1.1)$$

Ou I_{cc} représente le courant de court-circuit dû à l'éclairement E. le schéma équivalent de la cellule photovoltaïque déduit de cette équation est donné par (la figure I.5) et comprend un générateur de courant qui modélise l'éclairement et une diode en parallèle qui modélise la jonction PN.

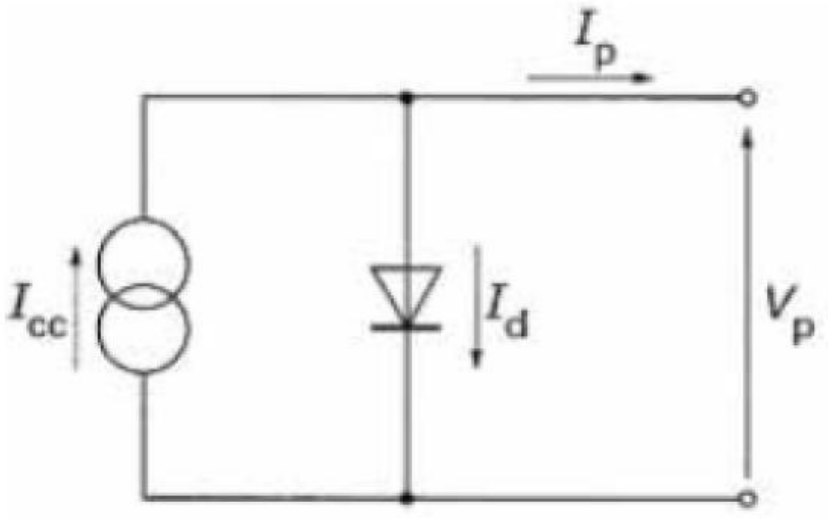

Figure I.5 : schéma équivalent de la cellule idéale

I.5.2 Cellule photovoltaïque réelle :

Le schéma équivalent de la cellule photovoltaïque réelle tient compte des effets résistifs parasites dus à la fabrication et représentes sur le schéma équivalent par deux résistance

- Une résistance série R_s représentant les diverses résistances de contacts et de connexions ;
- Une résistance R_{sh} (shunt) en parallèle sur le générateur de courant qui caractérise les divers courants de fuite dus à la diode et aux effets de bords de la jonction [15]

L'équation caractéristique de la cellule réelle est alors donnée par :

$$I_p = I_{cc} - I_d - \frac{V}{R_{sh}} \qquad (1.2)$$

La caractéristique réelle et le schéma équivalent de la cellule sont représentés sur (la figure I.6) les valeurs respectives des divers éléments du schéma équivalent déterminent les performances de la cellule réelle.

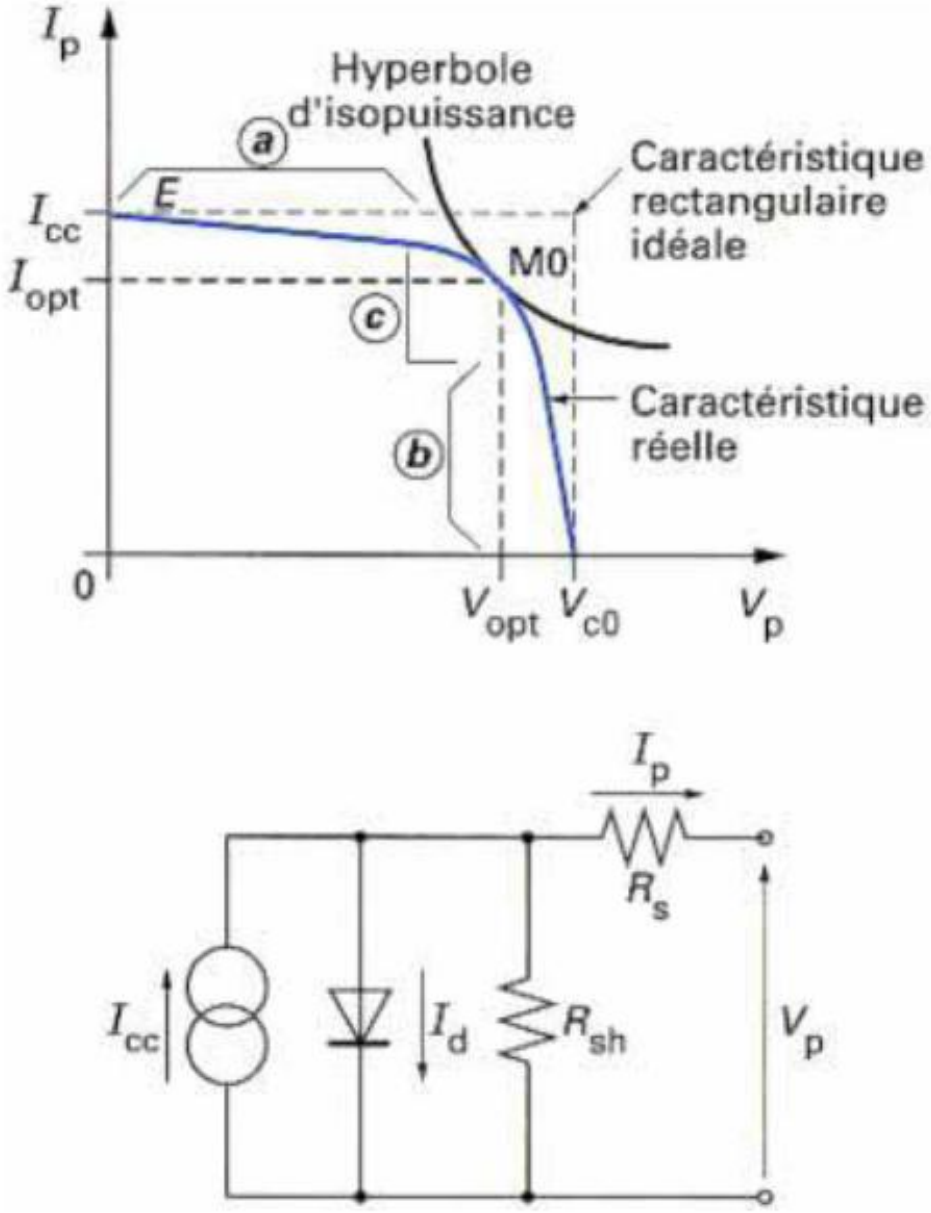

Figure I.6 : caractéristique et schéma équivalent d'une cellule photovoltaïque réelle

La caractéristique se devise en trois parties :

- La zone (a) ou la cellule se comporte comme un générateur de courant I_{cc} proportionnel à l'éclairement ;
- La zone (b) ou la cellule se comporte comme un générateur de tension V_{co} ;
- La zone (c) ou l'impédance interne du générateur varie rapidement. La cellule photovoltaïque est un générateur de puissance finie dont le maximum pour un éclairement donné est situé en Mode coordonnées V_{opt} et I_{opt} correspondant au

point de contact avec l'hyperbole d'iso puissance. (La figure 1.7) donne le réseau de caractéristiques réelles paramétrées en éclairement. L'influence de la température sera précisée au niveau du photovoltaïque. [15]

Le rendement de la cellule photovoltaïque dépend du matériau utilisé et des pertes. Le choix du matériau résulte d'un compromis entre la tension de sortie de la cellule liée à la largeur de la bande interdite E_g(tension de sortie$E_g\ /e$) et le nombre et l'énergie des photons de rayonnement solaire.

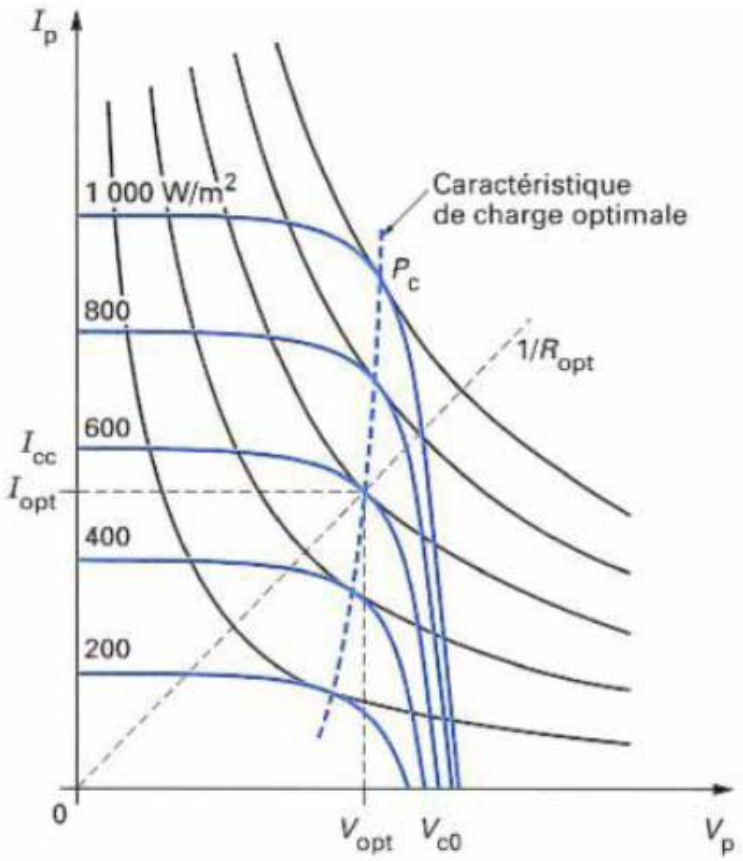

Figure I.7 : Exemple de réseau de caractéristiques d'un générateur photovoltaïque

I.6 Paramètre de la cellule photovoltaïque :

A partir des courbes caractéristiques du rayonnement solaire et du calcul du courant de la cellule idéale, on peut avoir le rendement théorique η de cette cellule (figure I.8) qui représente un maximum de l'ordre de 43% pour des largeurs de bonde interdite E_g de 1 à 1,5ev. Le silicium avec 1,1ev reste encore actuellement le matériau le plus utilisé.

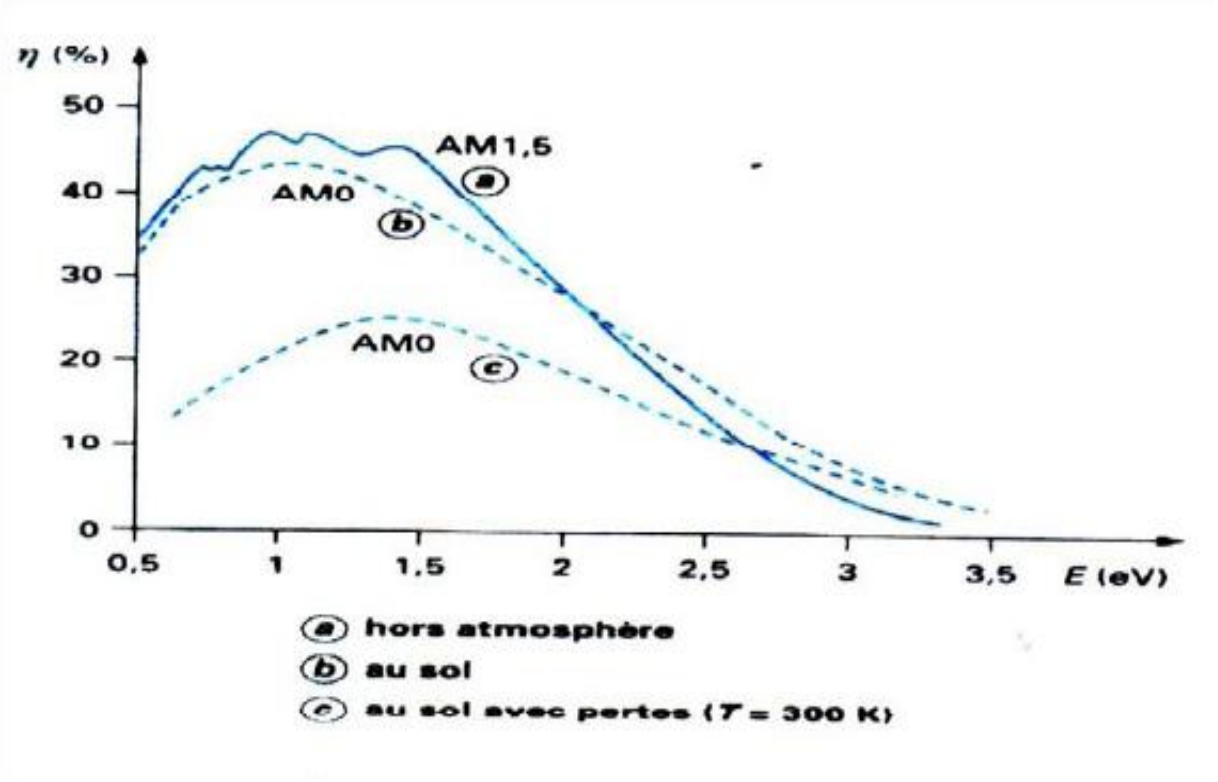

Figure I.8 : rendement théorique de la cellule idéale

Ce compromis tient compte des pertes dues à l'absorption incomplète des photons et à l'excès d'énergie des photons très énergétiques, d'autres facteurs (physiques et technologiques) diminuent encore le rendement de la cellule réelle.

I.7 Les pertes physiques et technologiques :

Le rendement d'une cellule est affecté par différents types de pertes, ce qui fait que toute l'énergie incidente n'est pas convertie en électricité.

I.7.1 Les pertes physiques :

Absorption incomplète des photons :

Les photons d'énergie inférieure à celle de la bande interdite du silicium, de 1,12 eV, ne peuvent être absorbés par le matériau pour produire des paires électron-trou, car les

électrons ne peuvent pas passer le gap. Ainsi le domaine infrarouge au-delà de 1100nm, qui représente environ 27 % de l'énergie incidente, ne peut être utilisé par la cellule.

Excès d'énergie des photons :

En revanche les photons d'énergie supérieure à la bande interdite seront absorbés. Cependant, la différence d'énergie entre celle du photon et celle du gap ne sera pas exploitée, mais perdue par thermalisation. Environ 28 % de l'énergie incidente se trouve inutilisée pour cette raison, notamment dans les domaines visible et ultraviolet. [1]

Facteur de tension ($\frac{qV_{CO}}{Eg}$) :

C'est le rapport de l'énergie maximale développée par la cellule par la énergie de gap.la tension aux bornes de la cellule n'est qu'une fraction de l'énergie de gap à cause notamment de la chute de potentiel au niveau des contacts et de la jonction, les meilleures valeurs obtenues de V_{OC} sont de l'ordre de 700mV [13].

Facteur de forme :

Le facteur de forme, ne peut dépasser 0.86 [16], car les courbes courant-tension sont générées par les équations de Boltzmann sous forme exponentielle, donc il n'existe pas des courbes I(V) de forme rectangulaire, même dans le cas d'une cellule idéale. Ce paramètre dépend également de la conception de la cellule, de la qualité de la jonction des matériaux utilisés, de la résistivité des contacts métalliques, etc.

Les pertes que nous venons d'évoquer sont toutes dues à la physique de la cellule et sont inévitables dès lors qu'il s'agit d'une cellule de silicium cristallin. Elles ramènent le rendement à une valeur maximale théorique de 29 % [17].

I.7.2 Les pertes technologiques :

D'autres pertes sont de nature technologique, et peuvent être atténuées par un procédé de

Fabrication optimisé. Elles sont de trois types principaux :

Les pertes par recombinaison :

Une fois que la paire électron-trou est formée par absorption d'un photon, les porteurs de charge doivent migrer vers la ZCE et vers les zones de collecte. En chemin, il est possible qu'un électron et un trou s'assemblent : c'est la recombinaison.

Les porteurs de charge sont alors perdus, ils ne pourront pas être collectés pour être utiles au circuit. Le temps et la distance parcourus par un porteur avant d'être recombiné sont caractérisés par leur durée de vie et leur longueur de diffusion. Il existe différents mécanismes de recombinaison, leur importance relative est donnée dans (la Figure I.9).

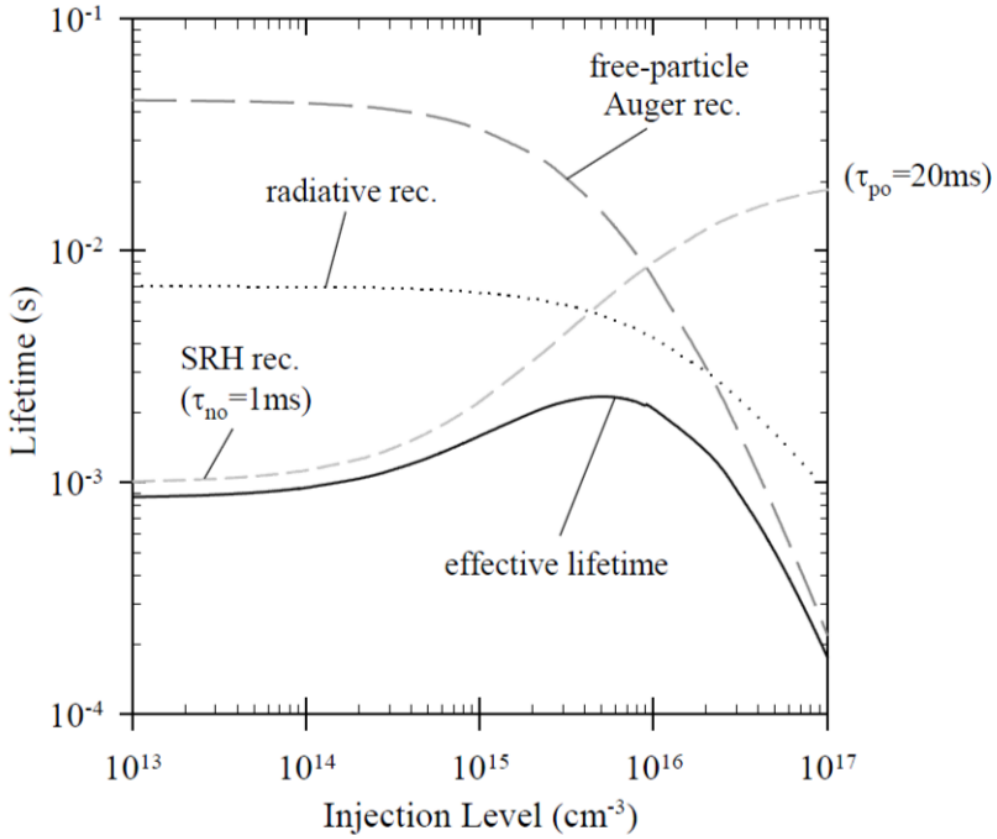

Figure I.9 : Contribution des recombinaisons radiative, Auger et SRH sur la durée de vie effective des porteurs minoritaires en volume, en fonction du niveau d'injection.

Les pertes optiques :

Elles proviennent de photons qui ne sont pas absorbés par le silicium, Malgré leur énergie supérieure au gap. Il en résulte principalement une réduction du courant de la cellule.

- La collecte des porteurs en face avant utilise une grille de métal. Cette grille n'étant pas transparente, elle cause de l'ombre sur la cellule, et donc des zones

où aucun photon ne pourra pénétrer, Pour cette raison, on essaie de minimiser la surface de cette grille, Cependant, si elle est trop faible, cela créera des pertes résistives, on cherche donc un compromis.

- L'indice de réfraction optique du silicium est beaucoup plus élevée que celui de l'air, ce qui cause une réflexion importante, Elle est atténuée par une texturisation de face avant, qui modifie l'angle incident de la lumière et favorise la possibilité pour le rayon réfléchi d'arriver une seconde fois à l'interface avec la cellule.

- La profondeur d'absorption des photons de grandes longueurs d'onde est supérieure à l'épaisseur de la cellule. Cela signifie que le silicium est partiellement transparent pour ces photons. Un confinement optique peut alors être utilisé pour réduire cette perte.

Les pertes résistives :

Le courant, en traversant une zone de résistivité non nulle, génère des pertes par effet Joule. C'est le cas dans l'émetteur entre deux lignes de métallisation, dans la base, au contact entre le semi-conducteur et le métal, dans la métallisation et dans les interconnexions du module. La somme de toutes ces pertes est reflétée par la résistance série de la cellule. L'autre type de perte résistive est la fuite de courant court-circuitant la cellule, par exemple si la jonction n'est pas correctement ouverte aux bords de la cellule ou si la métallisation traverse l'émetteur.

I.8 Les différentes technologies photovoltaïque :

I.8.1 La filière à base de silicium cristallin :

Le silicium est actuellement le matériau le plus utilisé pour fabriquer les cellules photovoltaïques disponibles à un niveau industriel. Les cellules à partir de plaquettes de silicium cristallisé (c-Si) se divisent en deux catégories distinctes, celles à partir de silicium monocristallin (mc-Si) et celles à partir de silicium poly- cristallin (pc Si). Le silicium monocristallin est plus cher que le silicium poly-cristallin mais permet d'obtenir un rendement plus élevé, avec près de 24.7% contre 19.8% de rendement record sur petite cellule en laboratoire [18].

I.8.2 Nouvelle technologie photovoltaïque :

Les matériaux fondamentaux de cette nouvelle technologie sont des composés organiques appelés polymères .ces nouveaux matériaux peuvent être considérés comme des alternatifs aux matériaux classiques vu la facilité de leur fabrication et leur faible coût. Les composants électroniques à base de polymère tels que les diodes (OLED : Organic Light-Emitting Diode), les transistors, les cellules PV, sont déjà disponibles dans le marché. Les matériaux organiques (polymériques) à base de carbone, d'hydrogène et d'azote, sont particulièrement intéressants en termes d'abondance, de coût, de poids et de mise en œuvre.

I.8.3 technologie couche mince :

Les cellules PV dites couche mince (Thin-film) constituent ce que certains appellent les cellules de seconde génération car elles font historiquement suite aux cellules en silicium cristallin relativement épaisses. L'intérêt de la technologie couche mince vient de la faible quantité de matériaux nécessaire à la fabrication d'une cellule comparativement aux cellules classiques. Contrairement aux cellules silicium cristallin de première génération, on ne dépose que la quantité de matériau photosensible efficace pour absorber l'essentiel du rayonnement solaire (quelques microns d'épaisseurs suffisent). Par ailleurs, on utilise des méthodes de fabrication moins coûteuses des cellules qui permettent une intégration totale.

Les trois technologies émergentes sont aujourd'hui :

- Le Silicium amorphe et microcristallin noté TFSi (Thin-Film Silicons).
- Le Semi-conducteur Poly-cristallin CdTe (Tellurure de Cadmium).
- L'alliage Cu In, Ga Se2 (Cuivre-Indium/Gallium-Sélénium) noté dans la littérature CIGS.

I.8.4 Les cellules multi-jonctions à haut rendement :

Aujourd'hui, la plupart des cellules photovoltaïque inorganiques sont constituées d'une simple jonction PN. Dans cette jonction, seuls les photons dont l'énergie est égale ou supérieure à la bande interdite du matériau (E_g en eV) sont capables de créer des paires électron-trou. En d'autres termes, la réponse photovoltaïque d'une cellule simple

jonction est limitée. Seule la proportion du spectre solaire dont l'énergie des photons est supérieure au gap d'absorption du matériau est utile, l'énergie des photons plus faible n'est donc pas utilisable.

D'autre part, même si l'énergie des photons est suffisante, la probabilité de rencontrer un électron est faible. Ainsi, la plupart des photons traversent le matériau sans avoir transféré leur énergie. Une première réponse pour limiter les pertes est connue de longue date du point de vue technologique, il suffit d'utiliser des systèmes à plusieurs niveaux, en empilant des jonctions possédant des gaps décroissants. (Figure I.10). Ainsi il est possible d'exploiter le spectre solaire dans sa quasi-totalité avec des rendements de conversion très importants. [18]

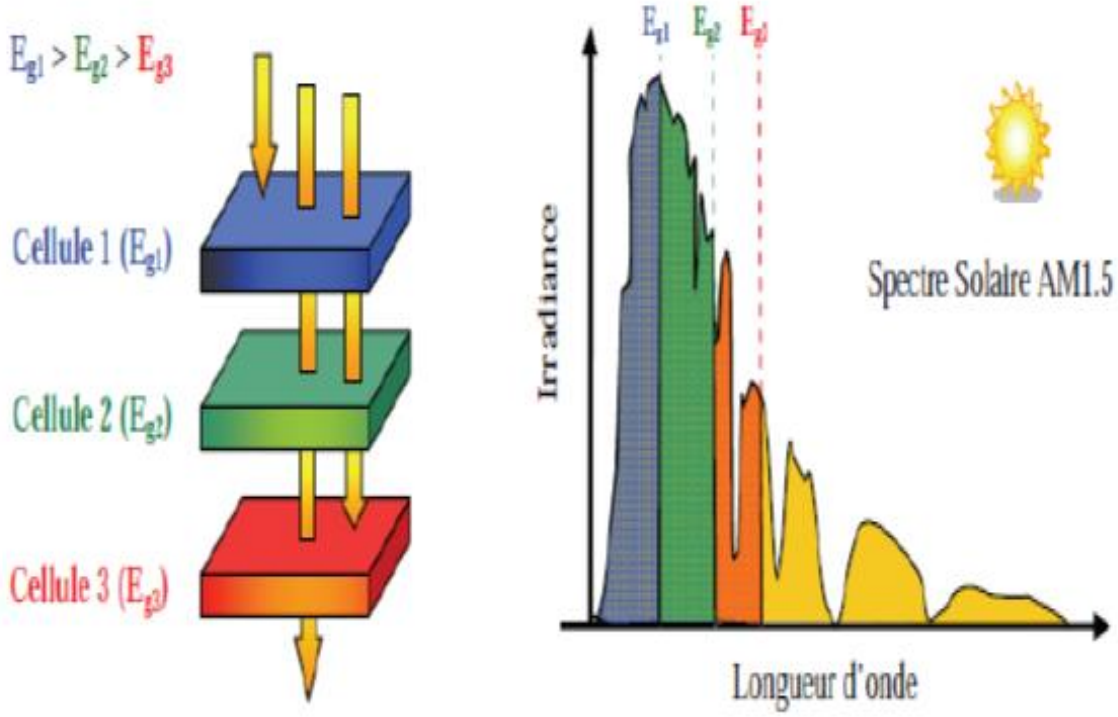

Figure I.10 : principe de la cellule multi-jonction

Des cellules PV multi-jonctions à base d'associations de matériaux semi-conducteurs ont ainsi été mises au point depuis les années 60 présentant des rendements très élevés

supérieurs parfois à 40%. Elles ne sont pas connues du grand public à cause de leur cout de fabrication.

De loin, les plus élevés actuellement (fabrication sous ultra vide, croissance très lente, problèmes de casses et de défauts aux interfaces). Le développement des cellules à haut rendement a été motivé en priorité par les applications spatiales. En effet, dans ce domaine, le critère principal n'est pas le prix par watt crête (prix/W_c) mais plutôt le nombre de watts par kilogramme (W_c/Kg).

Un dernier avantage à signaler pour ces cellules est leur robustesse vis-à-vis des radiations et des impacts. Au cours de temps, ces cellules ont démontré qu'il était possible d'avoir des générateurs d'énergie qui vieillissent très bien et qui peuvent produire de l'énergie même en ayant subi quelques détériorations. Le rendement des modules commercialisés contenant des cellules multi-jonction actuellement avoisine les 30% pour un spectre AM0.
Certaines recherches se concentrent sur l'amélioration des technologies de fabrication pour en baisser le cout et les adapter aux besoins terrestres. Ils se frottent principalement aux problèmes d'interfaces et de passage de petits volumes de fabrication à des grandes quantités.

Aujourd'hui, les véhicules de courses terrestres ou bateaux en utilisent pour assurer leur autonomie. Mais cela reste des cellules beaucoup trop chères pour des applications domestiques.
En utilisant des concentrateurs solaires, certains pensent pouvoir baisser les prix (moins de surface de cellule utilisée) et prendre une place dans le marché conventionnel terrestre. Ainsi, si on compare le meilleur rendement sans concentrateur d'une triple jonction GaInP/GaAs/Ge par exemple atteignant les 32%, cette même cellule arriverait à 40.7% avec concentrateur [19]. On peut même envisager des rendements encore plus importants avec des cellules complexes de 4 à 6 jonctions voir plus. L'idée basique du concentrateur photovoltaïque (CPV) est de réduire le prix de revient d'un système PV en focalisant les rayons lumineux sur une cellule solaire de surface Fc par le biais d'une lentille optique de surface Fo. Le ratio de concentration C'est approximativement C=Fo/Fc comme indiqué en (Figure I-11).

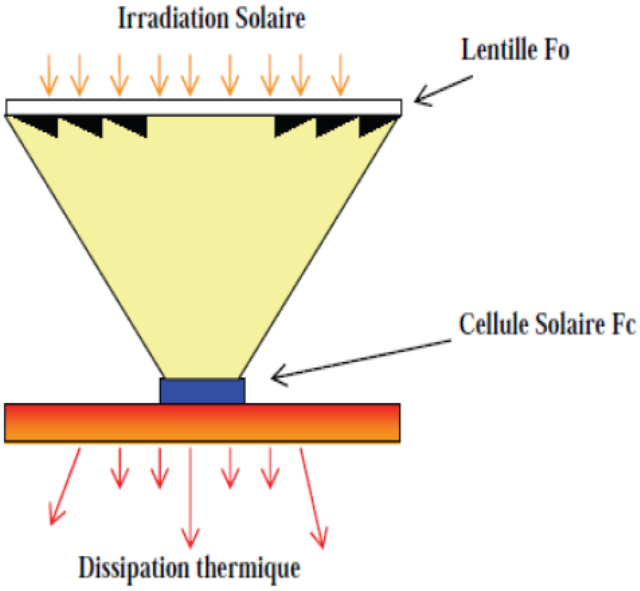

Figure I.11 : schéma de principe d'un concentrateur photovoltaïque

1.9 Conclusion

La recherche pour améliorer les performances des cellules solaire en améliorons son efficacité nous a conduit a élaboré la troisième génération de cellules solaires, ou viens la cellule a multi jonction avec l'empilement de plusieurs couche pour diminuer les pertes d'absorption.

Dans le prochain chapitre on va citer les différentes caractéristiques et propriétés des matériaux (Si, SiGe, Ge) pour notre étude de la cellule a multi jonction.

CHAPITRE 2

Etude de la structure Si/SiGe/Ge

2.1 Introduction :

Les composés binaires et ternaires à base des semi-conducteurs II-VI, présentent des caractéristiques très importantes leur permettant d'être des candidats concurrentiels du silicium et des composés III-V pour la conversion photovoltaïque et l'optoélectronique dans le visible. Leurs attraits résident dans leurs forts coefficients d'absorption et la large bande interdite (Figure2.1) ainsi que leurs faibles coûts de production.

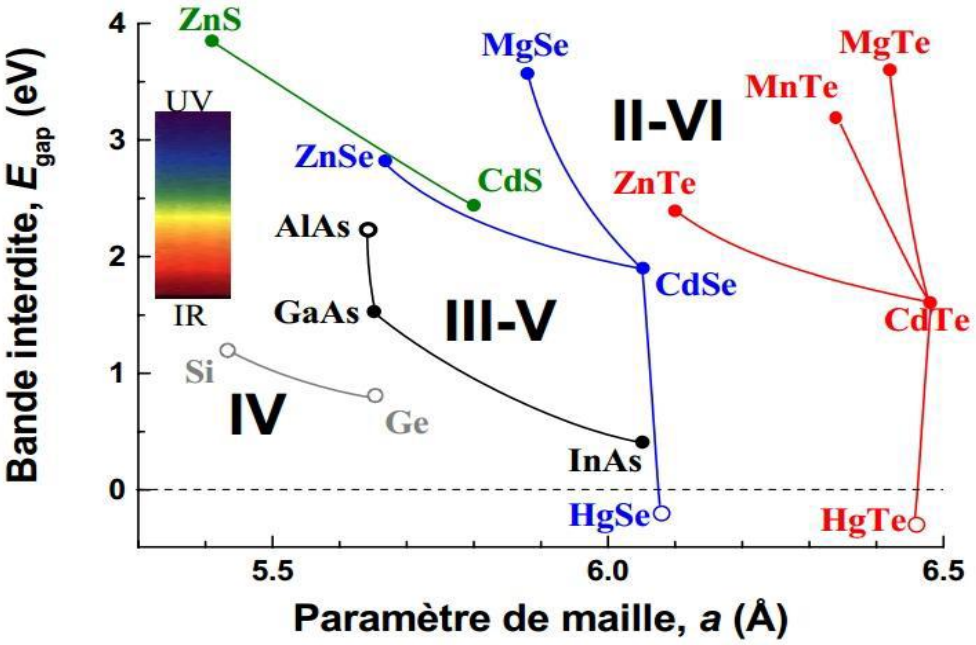

Figure2. 1 : Energie de bande interdite en fonction du paramètre de maille pour différents binaires II-VI.

2.2 Le paramètre de maille :

Le Silicium et le Germanium sont tous les deux cristallisent suivant une structure diamant. Les nœuds d'un des réseaux cubiques à faces centrées sont occupés par les atomes de Si tandis que ceux de l'autre réseau sont occupés par les atomes de Ge. Le réseau cristallin de la structure est schématisé dans la figure (2.2)

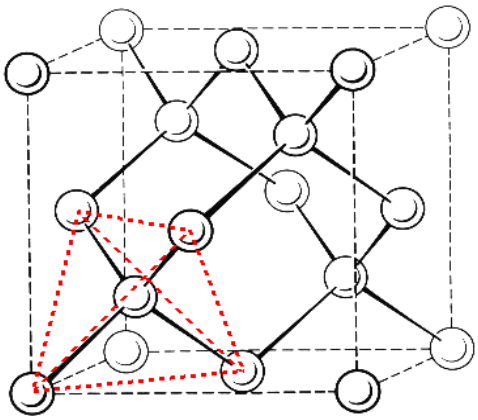

Figure 2.2 : Schéma de la structure cristal diamant.

Le paramètre de maille défini comme étant la distance séparant deux mailles consécutives est notées « a ». Il dépend de la nature des éléments chimiques mis en jeu. La maille cristalline est d'autant plus grande que le numéro atomique des éléments constituants est grand. Le paramètre de maille « a » d'un alliage Si_xGe_{1-x} est calculé par la loi de Végard donné par [20] :

$$a_{SiGe} = a_{Si}.\ (1-x) + a_{Ge}.x \qquad (2.1)$$

Les données les plus complètes concernant la mesure du paramètre de maille des alliages

$Si_{1-x}Ge_x$ sont issues des travaux de Dismukes et al. Dans lesquels de faibles déviations par rapport à la loi de Vegard sont mises en évidence. [21].

$$a_{SiGe} = 0.002733.x^2 + 0.01992.x + 0.5431\ (nm) \qquad (2.2)$$

Où a_{si}et a_{Ge}sont respectivement les paramètres de maille de Si et Ge et sont rapportés dans le tableau 2.1.

matériaux	Si	Ge
Paramètre de maille a	0.543 nm	0.566 nm

Tableau2.1 ***:*** Paramètre de maille des matériaux Si et Ge

2.3 Notion du gap indirect :

Pour un cristal semi-conducteur, le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont caractérisés par une énergie et un vecteur d'onde k.

Si ce maximum et ce minimum correspondent à des valeurs de k différentes : on dit que le semi-conducteur est à Gap indirect ; comme sur notre cas du silicium et germanium.

La transition d'énergie minimale entre la B_v et B_c ne peut pas avoir lieu sans changement de vecteur d'onde dans les semi-conducteurs à Gap indirect, ce qui permet l'absorption et l'émission de lumière de façon moins efficace que dans les matériaux à Gap direct [22]

Dans le cas du Silicium, les minima des bandes de conduction sont dégénérés 6 fois à proximité de la vallée X et 8 fois pour le Germanium le long des directions Pour les deux matériaux, les maxima des bandes de valence sont dégénérés deux fois suivant la vallée Γ [23].

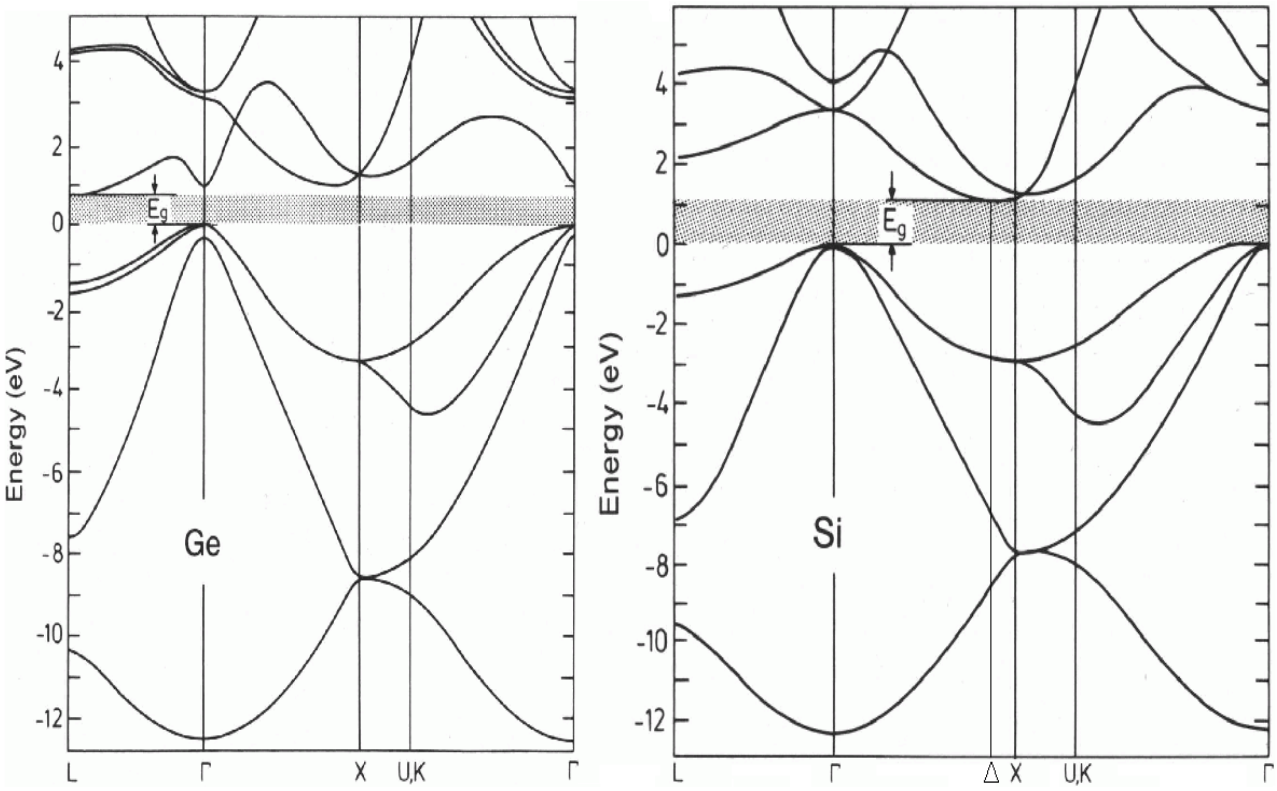

Figure2.3 : Structures de bandes du Germanium et du Silicium.

2.4 Notion de couche contrainte et épaisseur critique :

2.4.1 Couche contrainte :

Lors de l'épitaxie d'un matériau sur un substrat de paramètre de maille différent, un désaccord paramétrique est généré. Ce désaccord peut être rattrapé de deux façons différentes [24] :

- Dans le cas où les couches épitaxies sont suffisamment fines, la maille du matériau épitaxie se déforme de manière élastique de telle sorte que le paramètre de maille s'accorde au paramètre du substrat dans la direction parallèle à l'interface. Dans la direction perpendiculaire à l'interface de croissance le réseau se déforme en s'allongeant ou se comprimant selon que le paramètre de maille de la couche est plus petit ou plus grand que celui du substrat. Dans ce cas la couche est considérée comme étant totalement contrainte figure2.4.

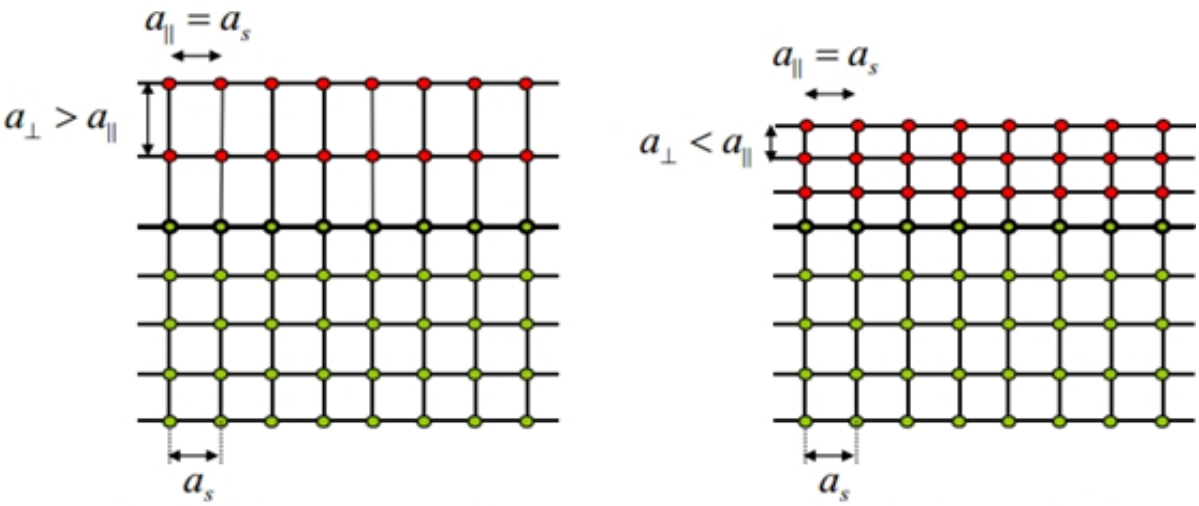

Figure 2.4 : Couche totalement contrainte
a) cas ($a_{epitax} > a_{sub}$)compression, b) cas ($a_{epitax} < a_{sub}$) allongement

- Dans le cas d'une couche épitaxies plus épaisse, la déformation de la maille du matériau ne suffit plus à équilibrer l'énergie mécanique engendrée par la croissance. Le désaccord est alors rattrapé par la génération de dislocations à l'interface de croissance. Ces dislocations se propagent du substrat vers l'interface de croissance et la couche commence à relaxer comme indiquer dans la figure 2.5

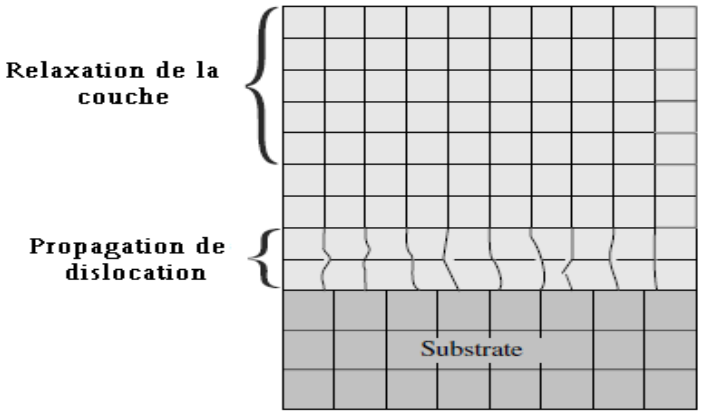

Figure 2.5 : Propagation de dislocation dans la couche épitaxie épaisse.

2.4.2 Epaisseur critique h_c :

L'épaisseur au-delà de laquelle la couche épitaxie commence à relaxer est appelé épaisseur critique h_{oc} .La croissance parfaite d'une hétéro-épitaxie pseudo morphique n'est possible que si l'épaisseur de SiGe n'excède pas à l'épaisseur critique h_c. Il dépend fortement de la composition en germanium. Elle diminue lorsque la teneur en germanium augmente Van der Merve propose un calcul permettant d'obtenir la valeur de l'épaisseur critique connaissant la concentration de l'alliage. Il aboutit à une équation phénoménologique du type [25] :

$$hc = \frac{1.175*10-2}{0.042*x} * \ln(8.9*hc) \qquad (2.3)$$

Cette épaisseur critique dépend des propriétés mécaniques des matériaux (coefficients élastiques C_{ij}), ainsi que du degré de désaccord paramétrique Δ_a (équation 2.4) entre le substrat et la couche épitaxie [26].

$$\Delta_a = \frac{a_{epit} - a_{sub}}{a_{epit}} \qquad (2.4)$$

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

a_{sub} : Paramètre de maille de substrat

Δ_a : Désaccord paramétrique.

Et on peut aussi calculer l'épaisseur critique de notre système $Si_{(1-x)}Ge_x$. On a utilisé le modèle le plus classique, celui de K. Koksal et B. Gonul [27], Qui traite le cas d'un matériau faiblement désaccordé par rapport au substrat (désaccord de maille <2%).

Il définit l'épaisseur critique comme l'épaisseur à partir de laquelle une dislocation initialement présente à l'interface de contact se propage latéralement sous l'effet du champ de contrainte. La valeur de l'épaisseur critique hc qui en résulte dans le cas d'un matériau de structure sphalérite épitaxie sur la surface (001) est donnée par l'équation suivante [27] :

$$h_c = \frac{a_{epit}}{k.\sqrt{2}.\pi.\Delta_a} \times \frac{1-(0.25.\Upsilon)}{(1+\Upsilon)} \times ln\left(\frac{h_c.\sqrt{2}}{a_{epit}} + 1\right) \qquad (2.5)$$

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

Δ_a : Désaccord paramétrique.

Υ : Coefficient de Poisson donné par :

$$\Upsilon = \frac{C_{12}}{C_{11} + C_{12}} \qquad (2.6)$$

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

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

2.5 Effet de la contrainte sur le Gap :

Pour la description de l'effet de la contrainte sur la structure de bande nous avons utilisé le modèle de Van et Walle et utilisé le formalisme de Krijin [7]. Les deux composantes parallèle et perpendiculaire du tenseur de la déformation peuvent être définies de la manière suivante :

$$\mathcal{E}_{\parallel} = \frac{a_{\parallel} - a}{a} \qquad (2.7)$$

$$\mathcal{E}_{\perp} = \frac{a_{\perp} - a}{a} \qquad (2.8)$$

Pour une structure totalement contrainte :

$$a_{\parallel} = a_{sub} \qquad (2.9)$$

$$\mathcal{E}_{\perp} = -2 \times \frac{C_{12}}{C_{11}} \times \mathcal{E}_{\parallel} \qquad (2.10)$$

L'effet de la contrainte bi-axiale sur la structure de bandes de la couche épitaxie est illustré sur la figure 2.6 Cette figure présente la structure de bandes d'un semi-conducteur à Gap indirect dans les trois cas possibles, non contraint, contraint en compression et finalement contraint en tension.

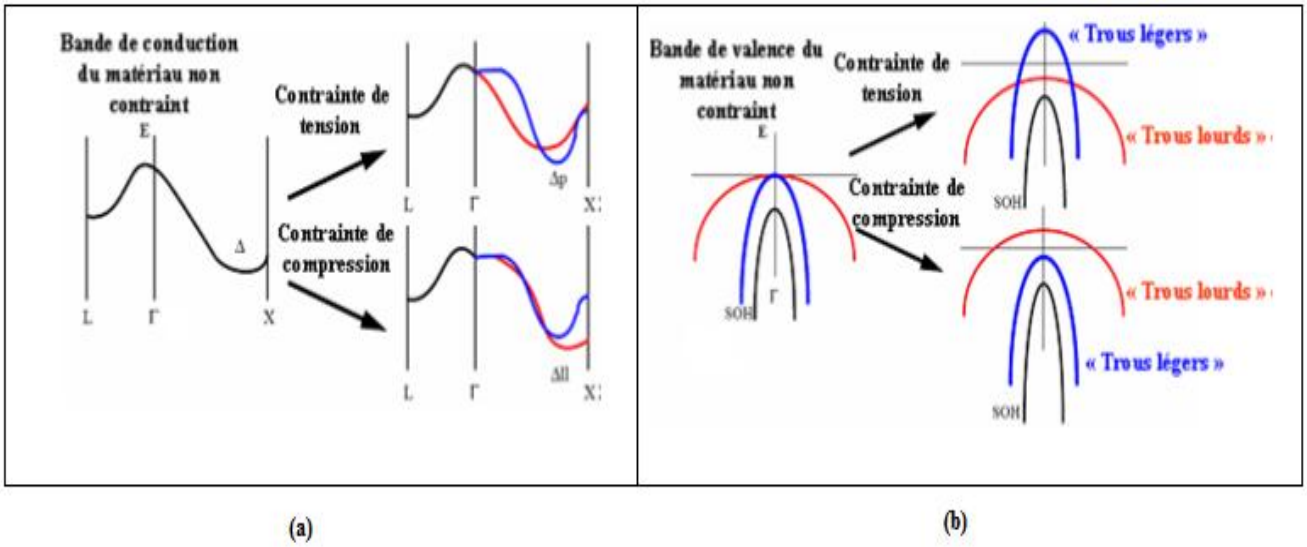

Figure 2.6 : Evolution des bandes de conduction (a) et de Valence (b) des matériaux $Si_{1-x}Ge_x$ ($x \leq 0,5$) sous l'effet d'une Contrainte bi axiale

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

$$E_{V,moy} = \frac{E_{HH}+E_{LH}+\Delta_0}{3} \quad (2.11)$$

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

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

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

L'effet de la contrainte sur les B_v et B_c peut être décomposé en deux parties :

- La composante hydrostatique, liée à la déformation selon l'axe de croissance, provoque un décalage du centre de gravité de la bande de valence ainsi que le centre de gravité de la bande de conduction.
- La contrainte de cisaillement, lève la dégénérescence des états énergétiques des trous lourds et des trous légers en $k = 0$ (typiquement d'une valeur de l'ordre de 60-80 meV pour un désaccord paramétrique de 1% [26])

Pour une couche épitaxie soumise à une contrainte bi-axiale de compression, la composante hydrostatique augmente l'écart entre la bande de valence et la bande de conduction, et la contrainte de cisaillement rend les bandes de valence fortement anisotropes [26] ; la bande de plus haute énergie devient lourde selon $k_\perp$ et légère selon $k_\parallel$ (bande HH). La bande d'énergie inférieure devient elle légère selon $k_\perp$ et lourde selon $k_\parallel$ (bande LH).

Les décalages énergétiques des centres de gravité de la bande de valence et de la bande de conduction en K =0 induits par la contrainte hydrostatique, varient proportionnellement à la contrainte [26] :

$$\Delta E_{V,moy}^{hyd} = a_v(2\mathcal{E}_\parallel + \mathcal{E}_\perp) \quad (2.12)$$

$$\Delta E_c^{hyd} = a_c(2\mathcal{E}_{\parallel} + \mathcal{E}_{\perp}) \qquad (2.13)$$

a_c : Le potentiel hydrostatique de déformation pour la B_c

a_v : Le potentiel hydrostatique de déformation pour la B_v

Les décalages énergétiques induits par la contrainte de cisaillement dans chacune des bandes constituant la bande de valence sont les suivants, dans le cas d'une croissance sur substrat [28].

$$\triangle E_{hh}^{cisa} = -\frac{1}{2} \times \delta E^{cisa} \qquad (2.14)$$

$$\triangle E_{lh}^{cisa} = -\frac{1}{2}\triangle_0 + \frac{1}{4}\delta E^{cisa} + \frac{1}{2}.\sqrt{\triangle_0^2 + \triangle_0\, \delta E^{cisa} + \frac{9}{4}(\delta E^{cisa})^2} \qquad (2.15)$$

$$\triangle E_{so}^{cisa} = -\frac{1}{2}\triangle_0 + \frac{1}{4}\delta E^{cisa} - \frac{1}{2}.\sqrt{\triangle_0^2 + \triangle_0\, \delta E^{cisa} + \frac{9}{4}(\delta E^{cisa})^2} \qquad (2.16)$$

Avec :

$$\delta E^{cisa,100} = 2.b.(\mathcal{E}_{\parallel} + \mathcal{E}_{\perp}) \qquad (2.17)$$

b : le potentiel de déformation tétragonale.

En prenant comme référence énergétique $E_{V,moy}$ (équation 2.11), et compte tenu des équations (2.12), (2.13), (2.14), (2.15), on peut définir l'énergie du haut de la bande de valence et l'énergie du bas de la bande de conduction.

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

$$E_v = E_{v,moy} + \frac{\Delta_0}{3} + \Delta\, E_{v,moy}^{hyd} + max\left(\Delta\, E_{hh}^{cisa}, \Delta\, E_{lh}^{cisa}\right) \qquad (2.18)$$

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

$$E_c = E_{v,moy} + \frac{\Delta_0}{3} + E_g + \Delta\, E_c^{hyd} \qquad (2.19)$$

Dans ces expressions $E_{v,moy}$, l'éclatement Spin-orbite Δ_0 et l'énergie de gap sont relatifs au matériau non contraint. via les équations (2.18) et (2.19) on peut déterminer l'équation du Gap contraint E_g^{cont} :

$$E_g^{cont} = E_c - E_v = E_g + \Delta\, E_c^{hyd} - \Delta\, E_{v,moy}^{hyd} - max\left(\Delta\, E_{hh}^{cisa}, \Delta\, E_{lh}^{cisa}\right) (2.20)$$

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

$$\max\left(\Delta\, E_{hh}^{cisa}, \Delta\, E_{lh}^{cisa}\right) = \Delta\, E_{hh}^{cisa} (2.21)$$

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 :

$$max\left(\Delta\, E_{hh}^{cisa}, \Delta\, E_{lh}^{cisa}\right) = \Delta\, E_{lh}^{cisa} \qquad (2.22)$$

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

$$E_g^{cont,com} = E_g + \Delta\, E_c^{hyd} - \Delta\, E_{v,moy}^{hyd} - \Delta\, E_{hh}^{cisa} (2.23)$$

Et pour une couche en tension :

$$E_g^{cont,ten} = E_g + \Delta E_c^{hyd} - \Delta E_{v,moy}^{hyd} - \Delta E_{lh}^{cisa} \quad (2.24)$$

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

2.6 Effet de la température sur le Gap :

La taille Eg de la bande interdite donne des caractéristiques électriques importantes à chaque semi-conducteur, Les mesures expérimentales montrent que l'énergie du Gap varie avec la température ; ceci est expliqué par un changement du paramètre de maille. Ces variations peuvent être décrites approximativement par la fonction universelle suivante :

$$E_g(T)=E_g(0) - \frac{a.T^2}{T+b} \quad (2.25)$$

Semi- conducteur	$E_g(0)$ (eV)	a (eV/K)	b (K)
Si	1.170	$4.73 .10^{-4}$	636
Ge	0.7437	$5.405 .10^{-4}$	235

Tableau2.2 **:** Paramètres de variation du Gap [29]

Avec :

$E_g(0)$: la hauteur de la bande interdite à 0 °k

T : la température en kelvin

A et b : des constantes

2.7 Le Coefficient d'absorption :

L'interaction entre les photons et les électrons peut s'exprimer par le coefficient d'absorption α .

Un photon d'énergie E absorbé par le matériau induit des transitions électroniques entre les différents états. Ainsi, pour chaque photon absorbé, un transfert d'énergie E est réalisé du faisceau lumineux incident vers le milieu absorbeur.

$$E = \frac{hc}{\lambda} = h\mathcal{V} \qquad (2.26)$$

Avec :

h : constant de Planck (6.62×10^{-34} j.s).

$\mathcal{V}$: Fréquence des radiations.

λ : longueur d'onde.

c : vitesse de la lumière.

Pour un matériau présentant un Gap indirect L'absorption est très probable du fait que cette transition électronique est seulement associée à deux particules : électron – photon. Le photon assure la conservation de l'énergie lors de la transition entre la bande de valence et la bande de conduction [30].

Cette interaction entre photon et semi-conducteur se traduit par une caractéristique essentielle du matériau dans le domaine photovoltaïque : le coefficient d'absorption [31].

Le coefficient d'absorption détermine la distance dans un matériau à partir de laquelle une longueur d'onde particulière peut pénétrer avant qu'elle ne soit absorbée. Nous classons les matériaux comme opaques, translucides et transparents conformément à leur force d'absorption [32].

Dans le cas de notre alliage le Gap est indirect et se traduit par la relation donnant α en fonction de h$\mathcal{V}$ de la forme :

$$\alpha(hv) = A^{*}(hv - \frac{E_g}{q})^{1/2} \qquad (2.27)$$

Où A : Constante ($2.2*10^5$)

2.8 Conclusion

Dans ce chapitre on a présenté les différentes propriétés structurales, électroniques et optiques des alliages composés par les éléments (Si, SiGe, Ge) et les équations qui les modélisent.

Dans le chapitre suivant et en première partie on va présenter et interpréter les résultats obtenus par simulations afin de voir l'effet du Ge sur les différents paramètres d'alliage $Si_{(1-x)}Ge_{x,}$ en deuxième partie on va calculer la caractéristique courant tension pour déduire les paramètres de la cellule (SiGe/Si) comme le **FF, Vco** et le rendement η

CHAPITRE 3

3.1 Introduction

Ce chapitre est consacré à l'étude et la simulation des différents paramètres sous l'outil de simulation MATLAB.

Dans un premier temps on va étudier le paramètre de maille, désaccord paramétrique et l'épaisseur critique. Ensuite on va montrer l'effet de la contrainte, la température et la pression sur le Gap et le coefficient d'absorption, la gamme d'absorption, EQE, la caractéristique courant-tension, et la puissance. Afin de déduire la meilleure concentration en Ge qui donne le meilleur rendement.

3.2 Simulation et interprétation

3.2.1 Le paramètre de maille :

On montre dans la figure (3.1) l'incorporation de Ge dans la maille cristalline augmente le paramètre de maille « a » de l'alliage $Si_{(1-x)}Ge_x$

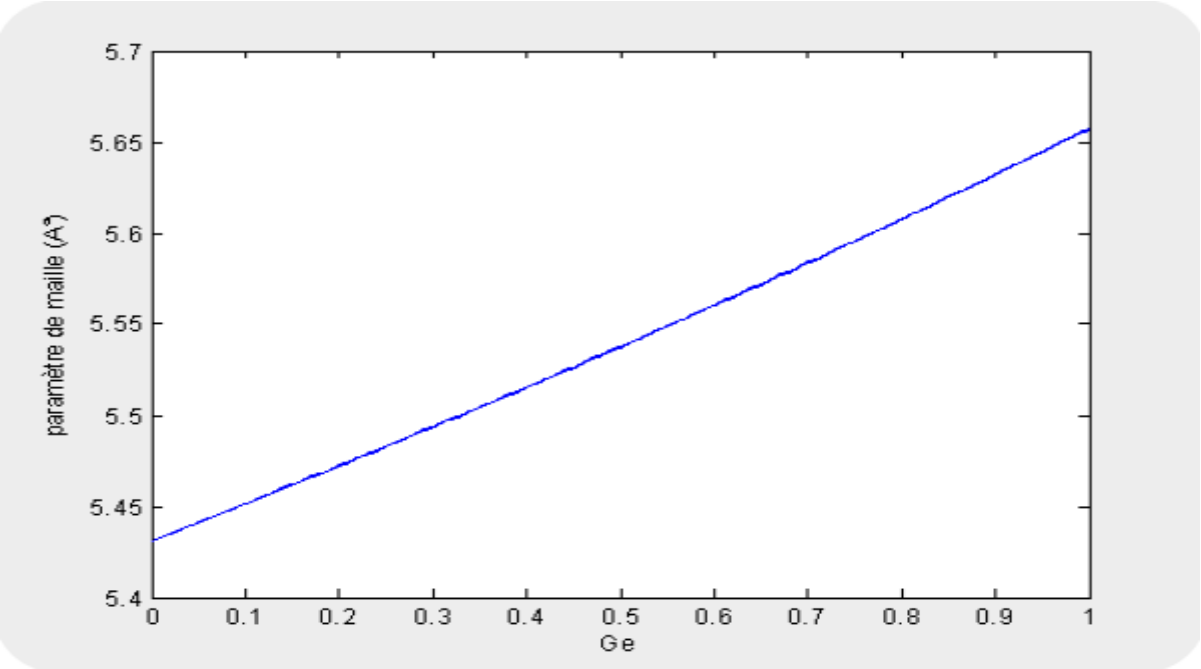

Figure 3 .1 : le paramètre de maille

3.2.2 L'épaisseur critique :

La variation de l'épaisseur critique de notre alliage $Si_{(1-x)}Ge_x$ est donnée par la figure (3.2) est calculée à l'aide de l'équation (2. 4) comme il est mentionné dans le chapitre précédent, il est bien clair que l'épaisseur critique est grande pour les petites concentrations de germanium car la contrainte est faible.

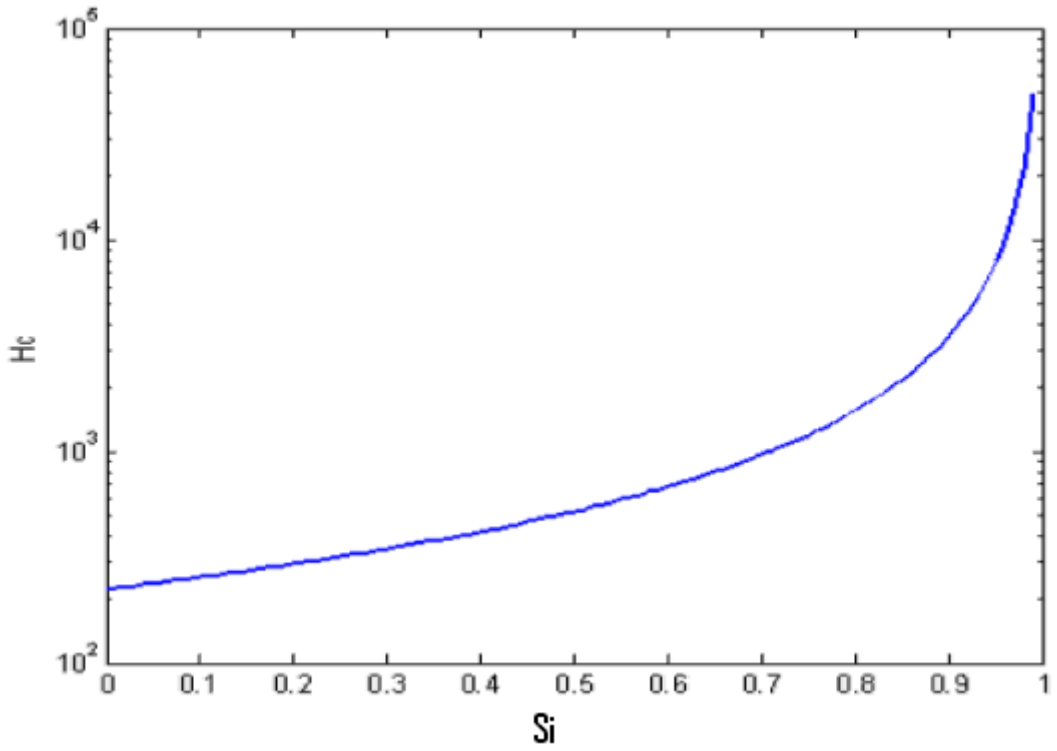

Figure 3 .2 : L'épaisseur critique Hc en fonction de la concentration du silicium.

3.2.3 Le désaccord paramétrique :

On peut également calculer le désaccord de maille par la loi (2.4) comme il est mentionné dans le chapitre précédent.

D'après la figure (3.3) on observe toujours que ε > 0 et diminue l'orque on augmente la concentration du germanium cela indique qu'on a une contrainte en tension pour tout l'intervalle de x.

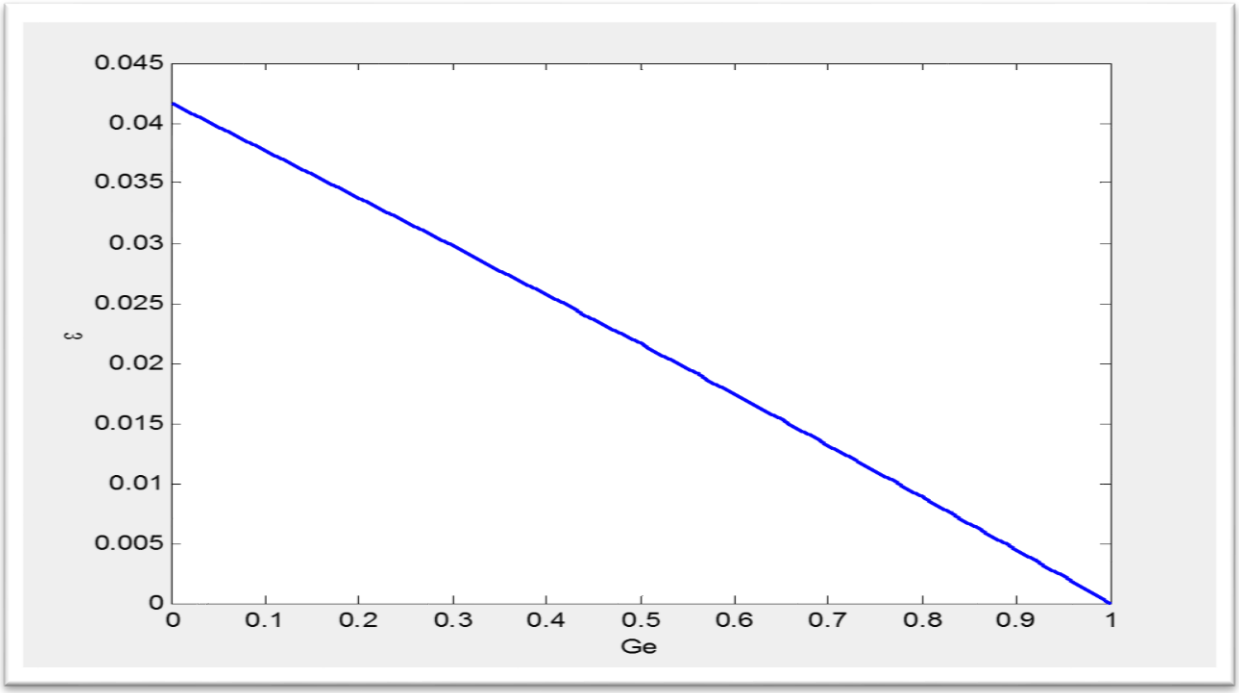

Figure 3.3 : le Désaccord paramétrique en fonction de la concentration de germanium.

3.2.4 L'effet de la contrainte :

3.2.4.1 l'effet de la contrainte sur le gap :

Pour la structure SiGe/Ge la figure (3.4) donne la variation de l'énergie du Gap de la couche épitaxie SiGe sur substrat Ge dans tout le domaine de composition.

On remarque que le Gap des trous lourds est toujours supérieur à celui des trous légers car le ternaire est soumis à une contrainte extensive pour tout l'intervalle.

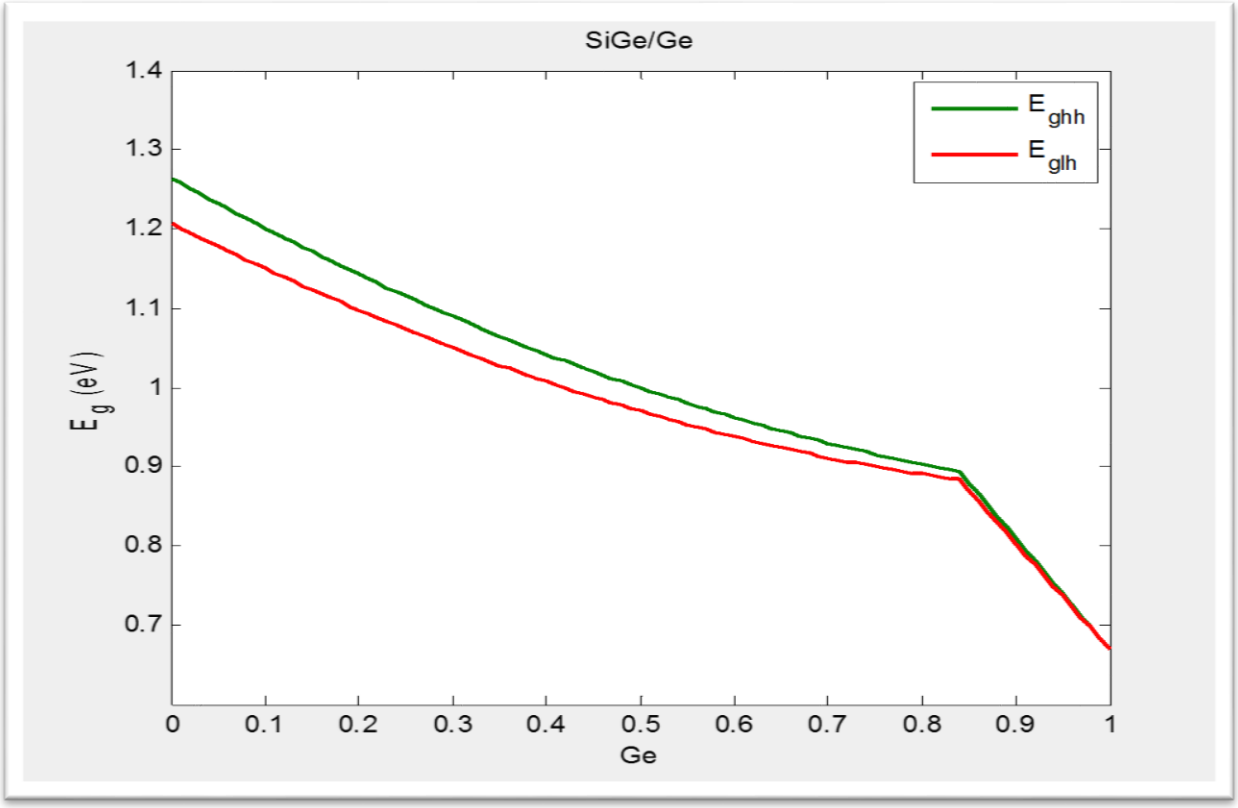

Figure 3.4 : Effet de la contrainte sure le gap

3.2.4.2 l'effet de la contrainte sur le coefficient d'absorption :

Pour voir l'effet de la longueur d'onde λ sur le coefficient d'absorption de la structure SiGe/Ge nous avons varié λ et fixé la concentration du Ge = 0.63. Cet effet est illustré dans la figure (3.5). On voit que la longueur d'onde du Ge est plus grande que SiGe et de Si car le gap est plus faible

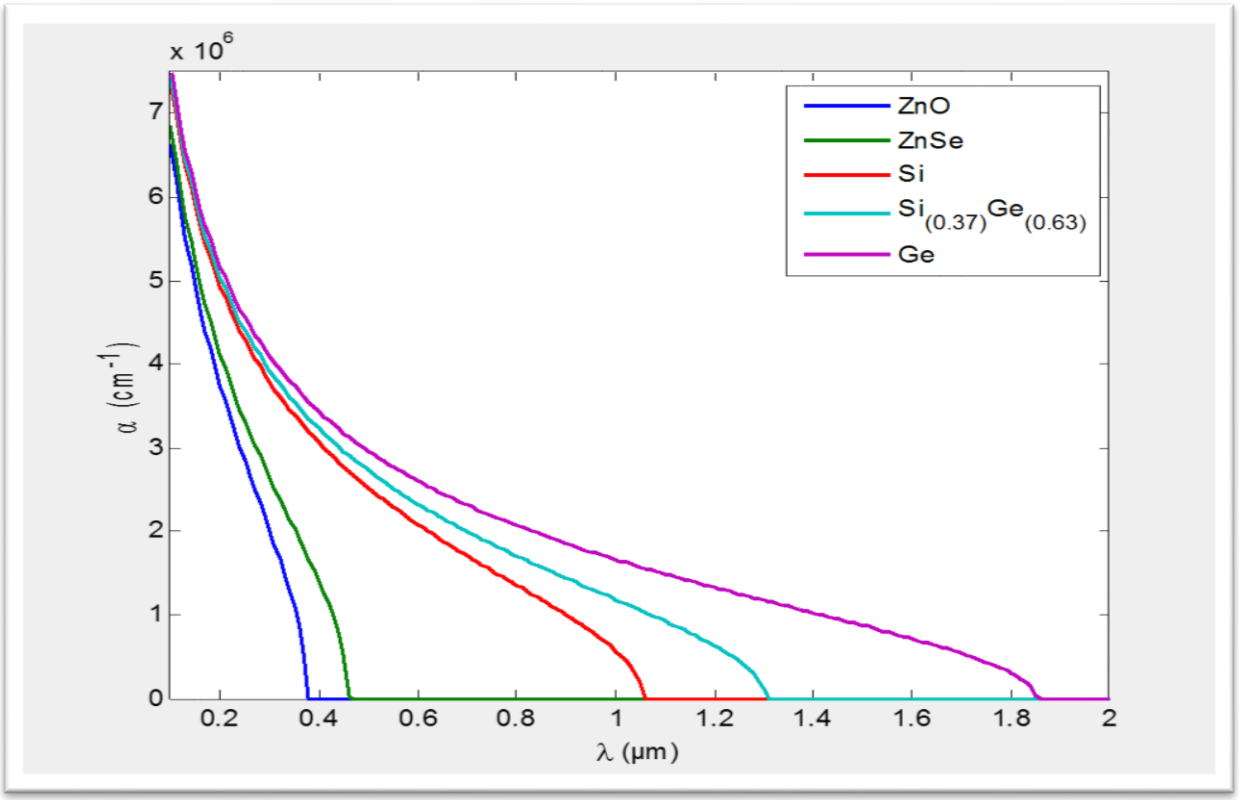

Figure 3.5 : le coefficient d'absorption pour chaque couche en fonction de la longueur d'onde

3.2.5 Effet de la température sur le Gap et le coefficient d'absorption :

Lorsque le cristal se dilate sous l'effet de la température le couplage diminue un peu et donc le Gap aussi. Voir le tracé de la figure (3.6), suivant l'équation (2.25).par contre le coefficient d'absorption augmente avec l'augmentation de la température. Voir la figure (3.7).

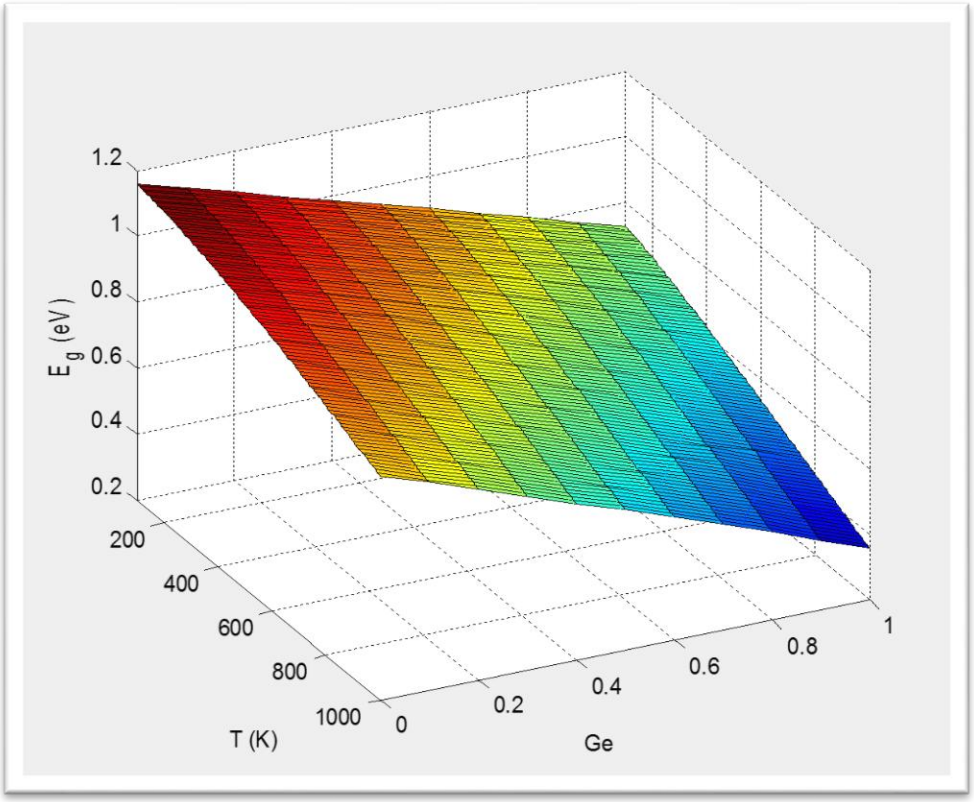

Figure 3.6 : Effet de la température sur le gap

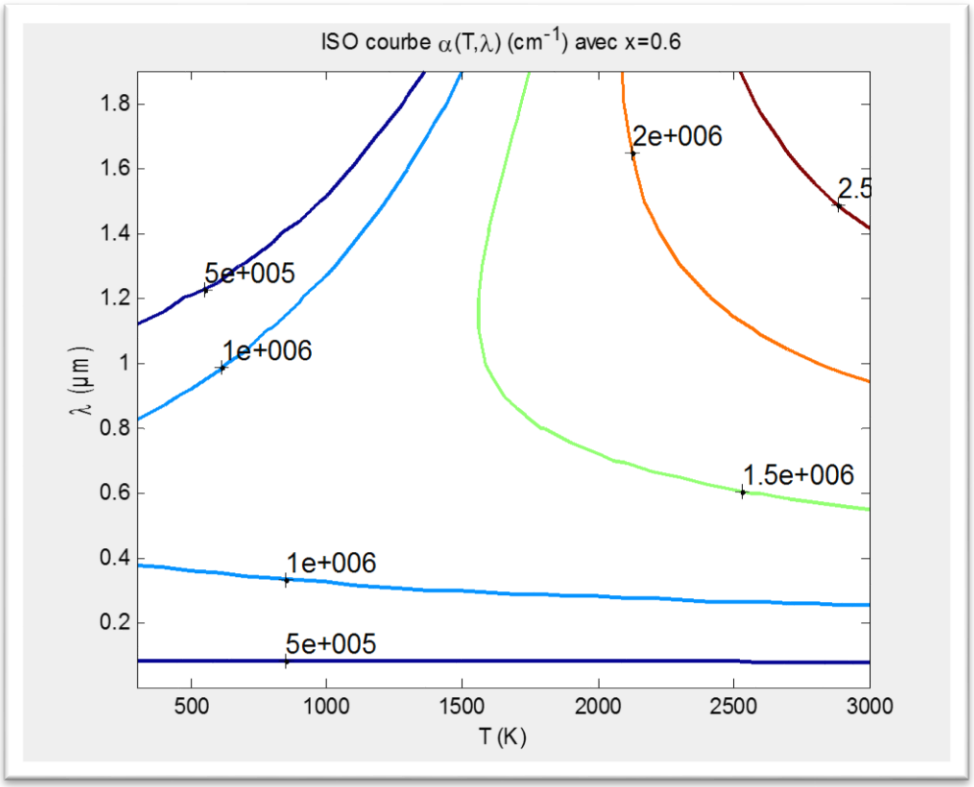

Figure 3.7 : Effet de la température sur le coefficient d'absorption

3.2.6 L'effet de la pression sur le Gap et le coefficient d'absorption :

On peut calculer l'effet de la pression sur le gap par la relation **Eg**(P) = $E_g(0)$ gP + dP^2 on voit que l'lorsque la pression augmente le gap augmente aussi par contre le coefficient d'absorption diminue. Voir les figures (3.8) et (3.9).

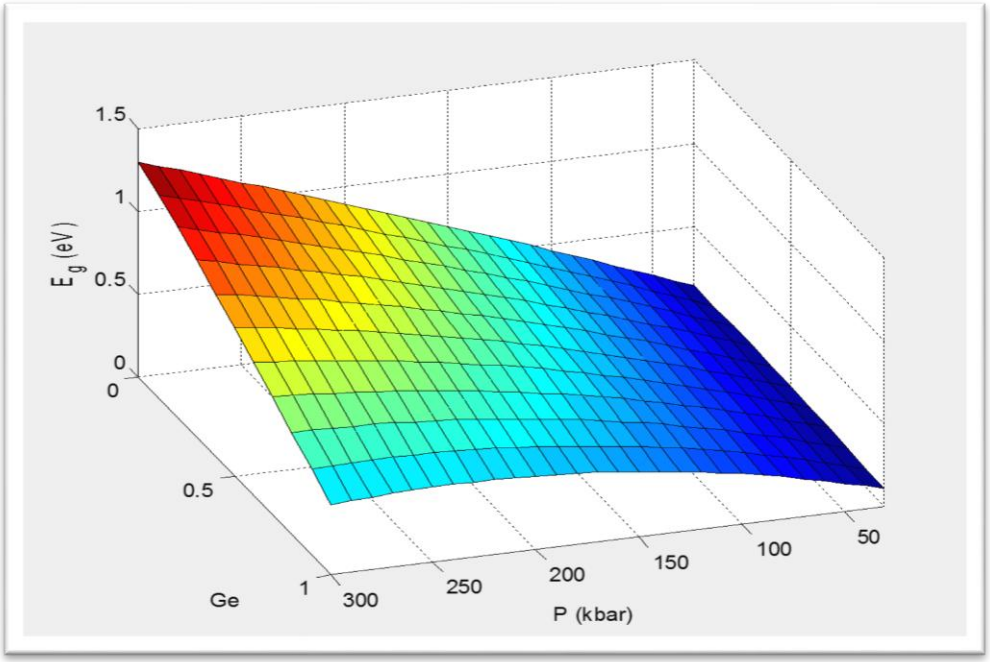

Figure 3.8 : Effet de la pression sur le gap

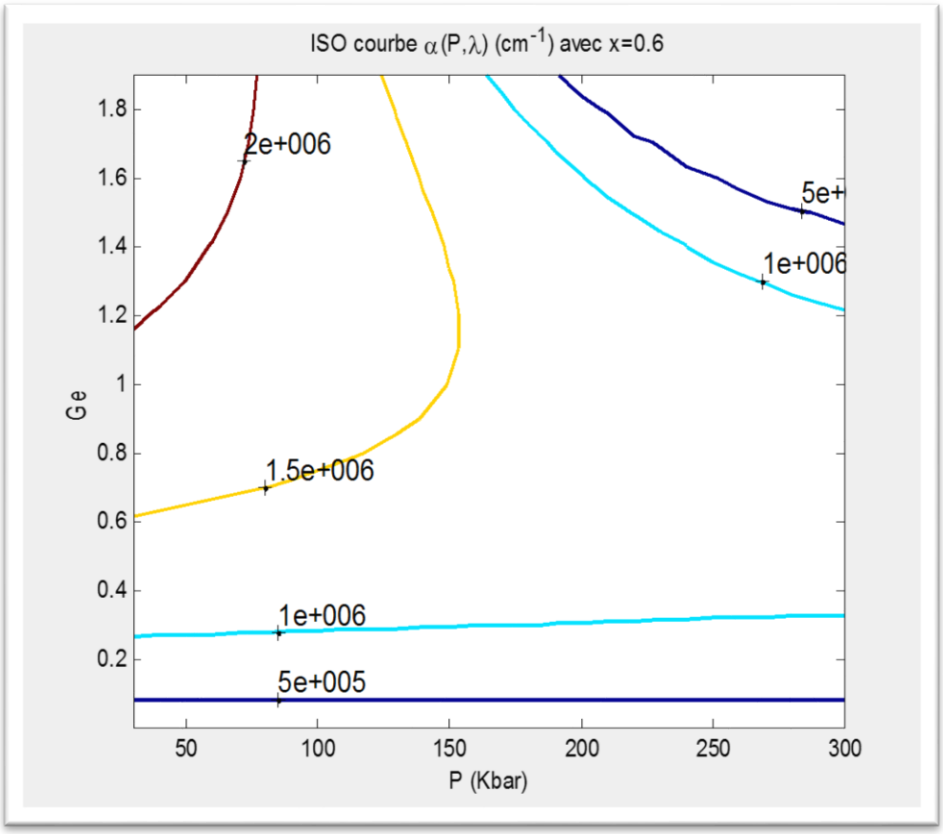

Figure 3.9 : Effet de la pression sur le coefficient d'absorption

3.2.7 Gamme d'absorption d'une cellule ZnO/ZnSe/Si/SiGe/Ge sous éclairement :

On fait la simulation de la gamme d'absorption pour deux différentes concentrations du Ge (20%,50%).Cette simulation montre la gamme d'absorption du spectre solaire pour chaque matériaux On remarque que le Si absorbe la plus grande partie de la gamme Et aussi on voit que l'lorsque la concentration du germanium dans l'alliage SiGe augmente La gamme d'absorption du SiGe augmente aussi. Voir les figures (3.10), (3.11).

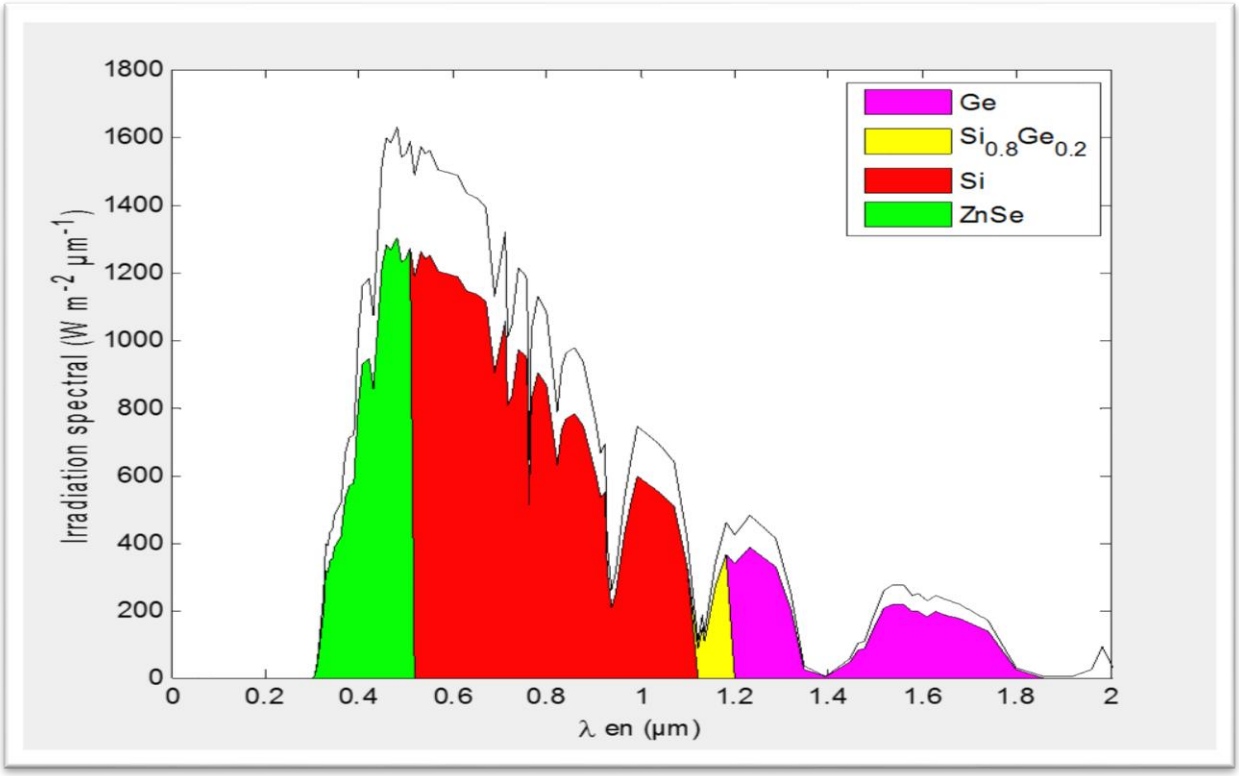

Figure 3.10 :l'absorption du spectre solaire par les différentes couches avec une concentration de germanium 20%

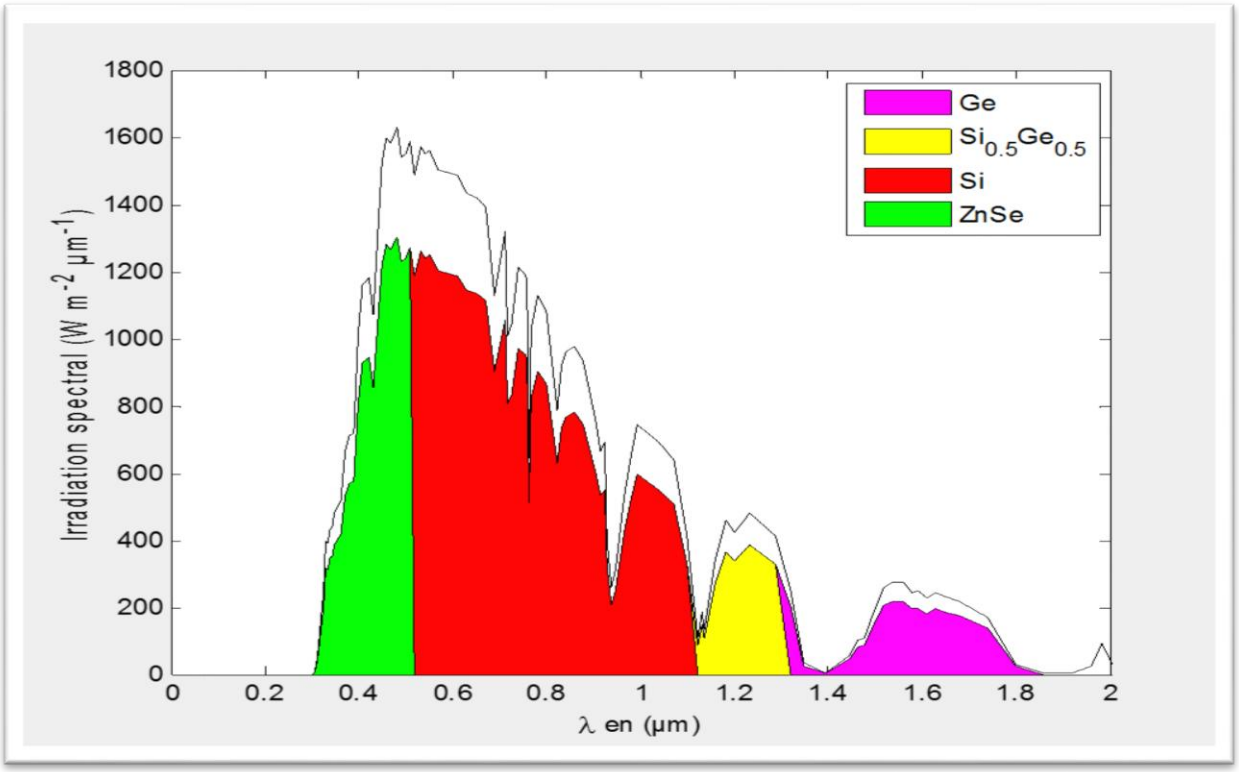

Figure 3.11 : l'absorption du spectre solaire par les différentes couches avec une concentration de germanium 50%

3.2.8 Efficacité quantique EQE pour déférente concentration de germanium :

Les figures (3.12) (3.13) (3.14) donnent la variation de l'efficacité quantique pour trois concentrations du germanium (20%, 50%, 63%).

Pour le calcul de l'efficacité quantique et la courante photo généré on' a utilisé la formule suivant :

$$EQE(\lambda) = \frac{j_{emetter}(\lambda) + j_{deplétion\ ou\ sc}(\lambda) + j_{base}(\lambda)}{qF(\lambda)}$$

On voit dans cette simulation la variation de EQE en fonction de la longueur d'onde λ pour différente valeur de concentration du Ge EQE du SiGe augmente chaque fois qu'on augmente la concentration du Ge.

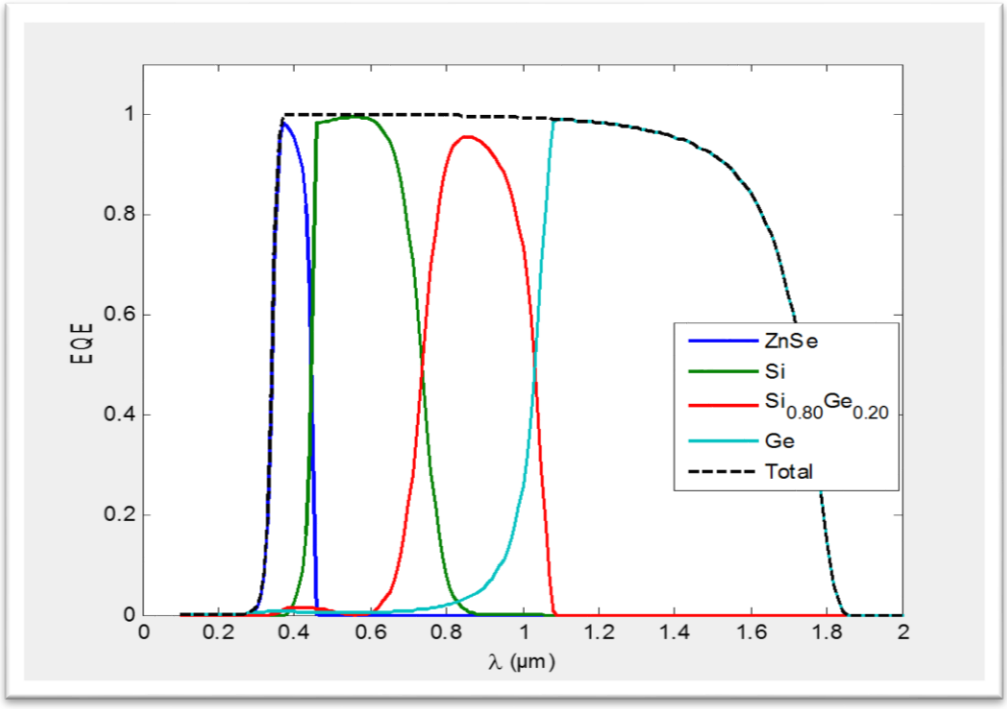

Figure 3.12 :l'efficacité quantique pour les différentes couches en fonction de la longueur d'onde avec une concentration de germanium 20%

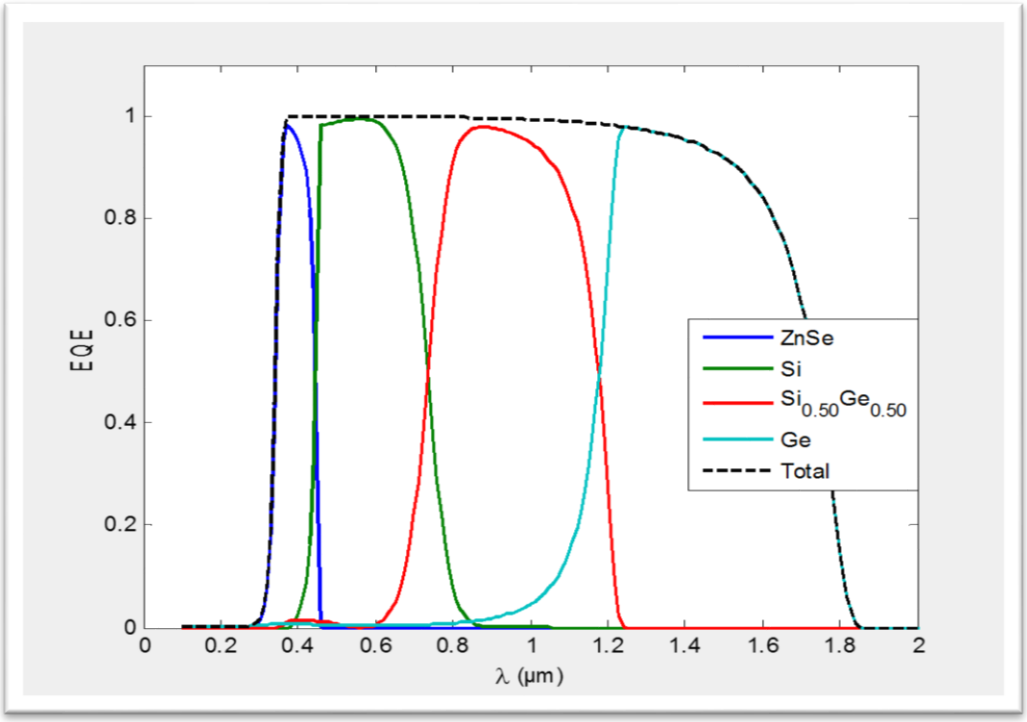

Figure 3.13 : l'efficacité quantique pour les différentes couches en fonction de la longueur d'onde avec une concentration de germanium 50%

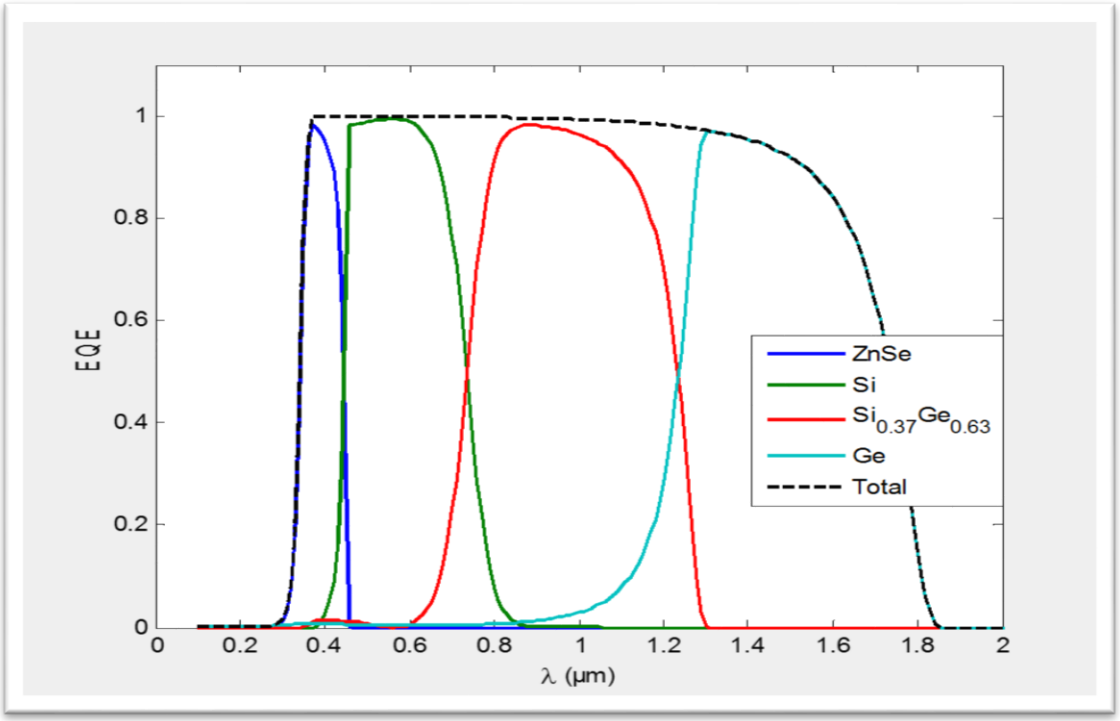

Figure 3.14 : l'efficacité quantique pour les différentes couches en fonction de la longueur d'onde avec une concentration de germanium 63%

3.2.9 La densité du courant pour différente concentration de germanium :

Sur les figures (3.15) (3.16) (3.17) on voit l'évolution de la densité du courant en fonctions de la tension de polarisation V dans des différentes concentrations du germanium (20%, 50%, 63%).

On voit que la densité de courant augmente avec la concentration du Ge. Le courant total égal au courant minimal et la Vco totale égale à la somme du trois Vco des matériaux

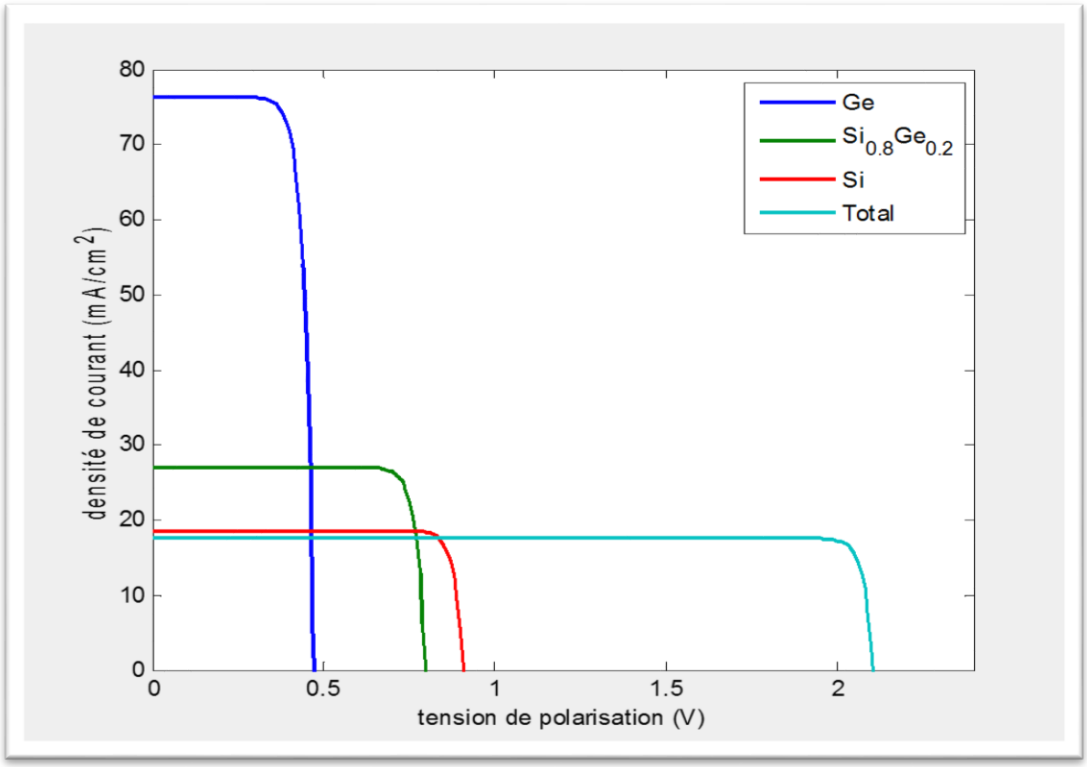

Figure 3.15 : la densité de courant pour les différentes couches en fonction de la tension de polarisation avec une concentration de germanium 20%

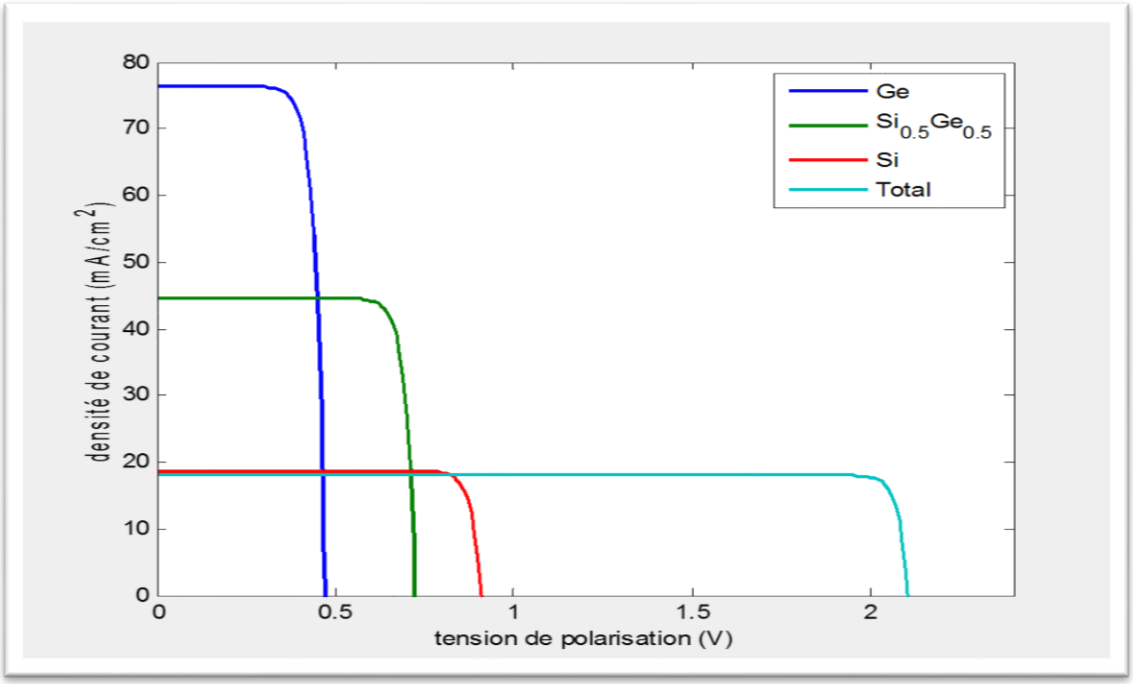

Figure 3.16 : la densité de courant pour les différentes couches en fonction de la tension de polarisation avec une concentration de germanium 50%

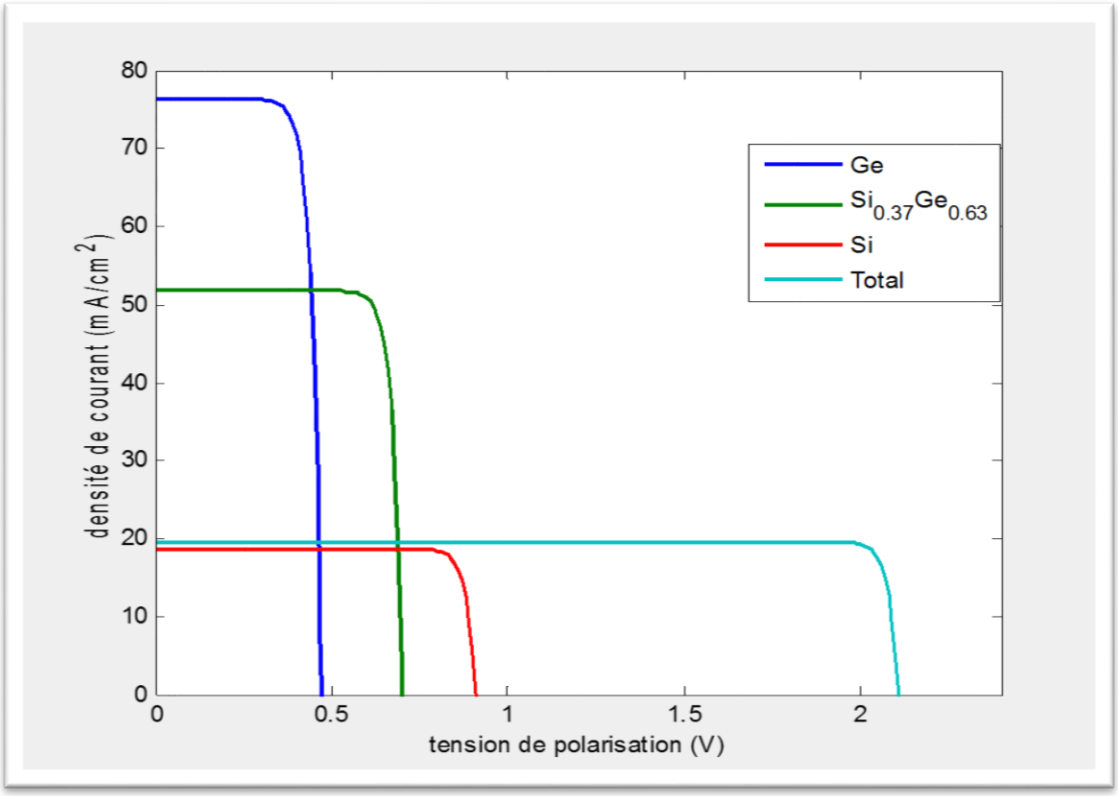

Figure 3.17 : la densité de courant pour les différentes couches en fonction de la tension de polarisation avec une concentration de germanium 63%

3.2.10 la puissance pour différente concentration de germanium :

Cette simulation présente la variation de la puissance en fonction de la tension de polarisation pour différentes concentrations du germanium (20%,50%,63%).

On voit bien que la puissance de l'alliage SiGe et la puissance totale P_T augmente chaque fois qu'on augmente la concentration du Ge voir les figures (3.18) (3.19) (3.20).

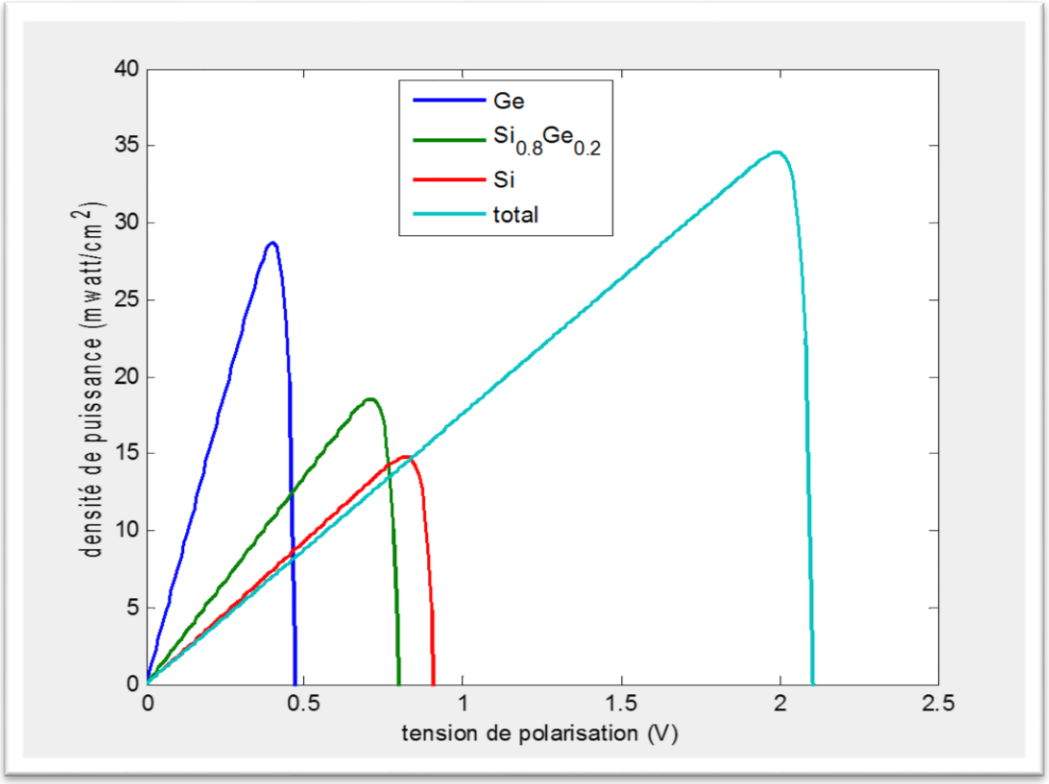

Figure 3.18 : la densité de puissance pour les différentes couches en fonction de la tension de polarisation avec une concentration de germanium 20%

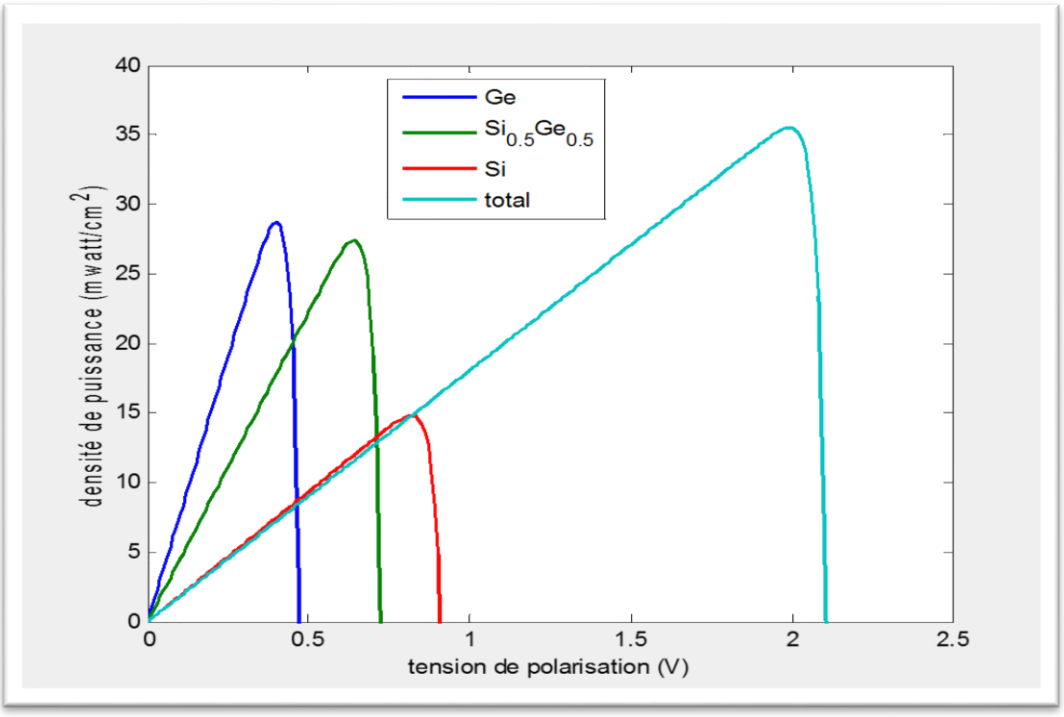

Figure 3.19 : la densité de puissance pour les différentes couches en fonction de la tension de polarisation avec une concentration de germanium 50%

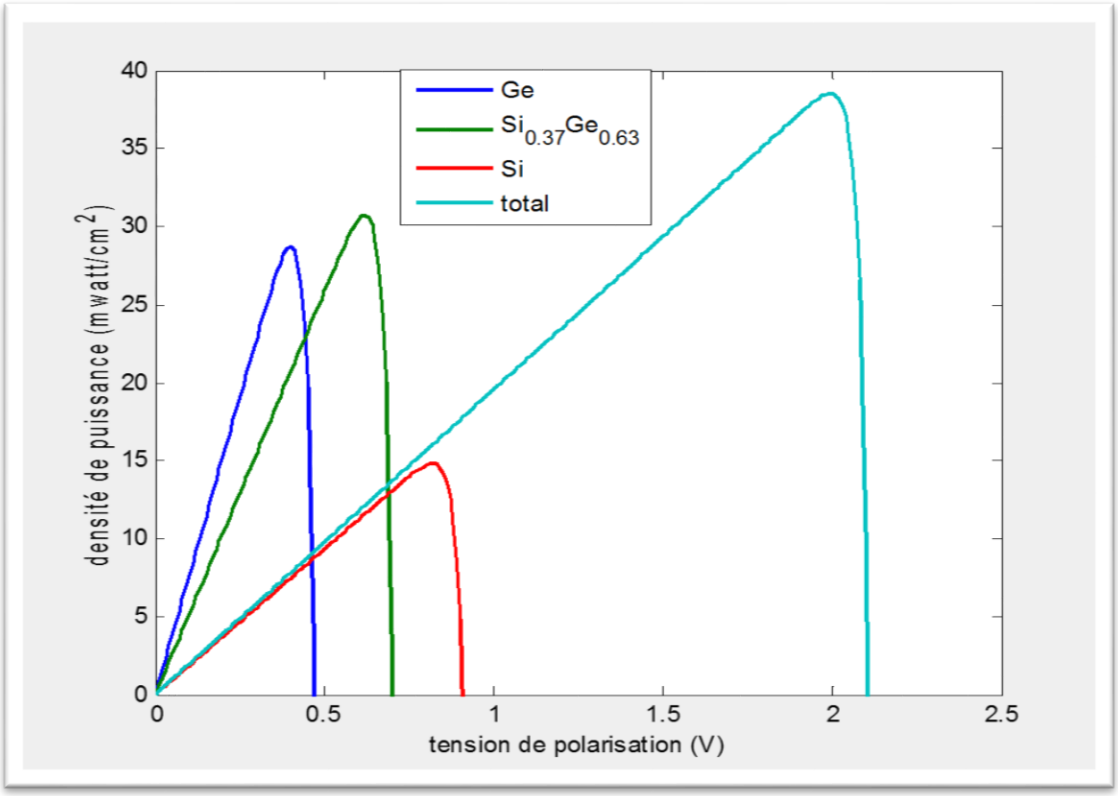

Figure 3.20 : la densité de puissance pour les différentes couches en fonction de la tension de polarisation avec une concentration de germanium 63%

3.3 Conclusion

Les principales conclusions que l'on peut tirer de ce chapitre sont :

- Le paramètre de maille augmente avec l'incorporation de Ge, ainsi que l'alliage SiGe sur le substrat Si est soumis à une contrainte en tension.
- La simulation qui donne la variation du Gap en fonction de la concentration du Ge, montre que le Gap de l'alliage diminue avec l'augmentation de la concentration de Ge, et avec l'augmentation de la température il diminue.
- D'après la simulation de l'équation de l'épaisseur critique et les remarques précédentes on peut conclure que la meilleure épaisseur pour l'alliage SiGe est pour 35%
- L'augmentation de la concentration du Ge diminue la tension du circuit ouvert par contre elle diminue la puissance maximale délivré par la cellule.

Conclusion générale

Dans le cadre de ce travail, nous avons étudié la structure d'une cellule photovoltaïque Zno/ZnSe/Si/SiGe/Ge à base de semi-conducteurs SiGe.

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

Dans le deuxième chapitre nous avons présenté les différents paramètres électroniques et optiques de l'alliage Si/SiGe/Ge

Dans le troisième chapitre nous avons simulé les équations qui modélisent les paramètres cités auparavant en fonction de différentes valeurs de concentration du Ge et nous avons constaté que le gap diminue avec l'augmentation de la concentration de Ge cela me permet d'absorber le maximum du spectre solaire pour des grandes concentrations du Ge

D'après les simulations du Gap, coefficient d'absorption, EQE et P(V), un rendement de conversion, maximale de 38.53% est obtenu pour une concentration germanium égale à x=63%. Un rendement pareil rend cette structure utilisable et commerçable.

On peut également augmenter le rendement de cette structure en ajoutant une autre couche III-V, utiliser des cellules à puits quantiques, ou bien utilisation des concentrateurs optique.

Référence :

[1] c. abdelbaki "Modélisation par MATLAB de la cellule solaire bifaciale à base de silicium
Monocristallin" mémoire de magistére 30 /06/2003

[2] Bouraoui, A., ''Elaboration et Caractérisation des Couches minces CuInSe2 par Electrodéposition'', Université Mentouri , Constantin (2009).

[3] Bordel, D., ''Développement de Nouveaux Substrats'', Ecole Centrale de Lyon (2007)

[4] MailysG. , ''Réalisation de nouvelles structures de cellules solaires photovoltaïques à partir de couches minces de silicium cristallin sur substrat de silicium préparé par frittage de poudres''. INSA de Lyon, 2012.

[5] BOUKHERS D., OPTIMISATION D'UN SYSTEME D'ENERGIE PHOTOVOLTAIQUE APPLICATION AU POMPAGE, Université Mentouri de Constantine, 28 / 11 / 2007.

[6] nemmar belhocine F., ''étude et réalisation des cellules solaires photovoltaïques à base de matériaux organiques '', Université mouloud Mammeri Tizi-Ouzou, (2010) !

[7] Djicknoum D., ''Cellules photovoltaïques silicium à hétérojonctions et à Structure inter digitée en face arrière '', Université paris-sud 11, Juin 2010.

[8] Akassewa T., S., ''Système d'alimentation photovoltaïque avec stockage hybride pour l'habitat énergétiquement autonome'', Université Henri Poincaré, Nancy, (2010).

[9] **S. Strehlke, S. Bastide, J. Guillet and C. Lévy-Clément.** Design of porous silicon antireflection coatings for silicon solar cells. Mat. Science &Engineer. B, 2000, Vol. 69-70, pp. 81-86.

[10] **Thibaut DESRUES**, ' Développement de cellules photovoltaïques à hétérojonctions silicium et contacts en face arrière '', L'Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 2009.

[11] NichiporukOleksiy,''Simulation, fabrication et analyse de cellules photovoltaïques à contacts arrières interdigités'', L'institut national des sciences appliquées de Lyon, 2009.

[12] Papet, P., " Nouveaux Concepts pour la réalisation de Cellules Photovoltaiques à Contacts Interdigités sur Substrats minces en Silicium Cristallin", Institut des Nanotechnologies de Lyon, (21 decembre 2007).

[13] BESTAM **R.,** Modélisation et Simulation d'une Structure à base de Semi-conducteur III-V pour le Photovoltaïque, UNIVERSITE SAAD DAHLEB DE BLIDA

[14] tebboub B., ‘’étude conceptuel des systèmes photovoltaïques a doublé et triple jonction’’, université mouloud Mammeri Tizi-Ouzou

[15] honsberg C., bowdenphotovoltaics : devise système and application CDROM, université nwesouthwales 1998.

[16]Lelievre, J.-F., "Elaboration de SiNx:H par PECVD: Optemisation des Propriétés Optiques, Passivantes et Structurales pour Applications Photovoltaiques", Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, (24 avril 2007).

[17] M. J. Kerr, “Surface, emitter and bulk recombination in silicon and development of silicon nitride passivated solar cells,” Thèse de Doctorat, The Australia National University, 2002.

[18] MEZIANI Z. MODELISATION DE MODULES PHOTOVOLTAIQUES, université de Batna ,2012.

[19]]Tebboub B., ‘’étude conceptuel des systèmes photovoltaïques a doublé et triple jonction’’, université mouloud Mammeri Tizi-Ouzou

[20] R. A. Logan, J. M. Rowell, and F. A. Trumbore, “*Phonon Spectra of Ge-Si Alloys”,*
Phys. Rev., 136(6A), 1751 (1964).

[21] H. J. Herzog,*” Crystal structure, lattice parameters and liquidus-solidus curve of the*
SiGe system”, IEE EMIS Datareviews Series, INSPEC, Ed. E. Kasper and K. Lyutovich, 24, 45
(1999).

[22] Tinjoux, F., ‘’ Mécanismes de formation des boîtes quantiques semi-conductrices, application aux nanostructures II-VI et étude de leurs propriétés optiques’’, Université Joseph Fourier – Grenoble I, (2003).

[23] F. Schäffler, “*High-mobility Si and Ge structures”*, Semicond. Sci. Technol., 12, 1515
(1997).

[24] Renard, C., "Hétérostructures Antimoniures/Arséniures pour les Applications Optoélectroniques dans le Moyen Infrarouge ", universite paris VII, (30 septembre 2005).

[25] J.H. Van der Merve Crystalinterfaces: finite overgrowths Journal of Applied Physics, vol.34, p.123, 1963

[26] Bestam, R., ‘’ Modélisation et simulation d’une structure à de semi-conducteur III-V pour le photovoltaïque’’, Université Saad Dahleb-Blida, (2011).

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

[28] Mathieu, H., ‘’Physique des Semi-conducteurs et des Composants Electronique ‘’, Masson, paris, (1998).

[29] S. M. SZE, Physics of Semiconductor Devices, John Wiley & Sons, 1981.

[30] Navarro, J., ‘’Cellules Photovoltaïques Organiques Transparentes Dans Le Visible’’, Université de Toulouse, (2008).

[31] Ouddah, M., ‘’Etude du Silicium Poreux Destine aux Cellules Solaires’’, Université Mentouri Constantine, (2009).

[32] Oleksiy, N., ‘’ simulation, Fabrication et analyse de cellules photovoltaïques à contacts arriérés interagîtes ‘’, Institut national des sciences appliqués de Lyon, (2005).