

Université de Blida1

Faculté des Sciences et de la Technologie

Département d'électronique



Thèse présentée en vue de l'obtention

du diplôme de

Doctorat LMD en

Télécommunications

MODÉLISATION ET SIMULATION DE CELLULES SOLAIRES À BASE DE NANOFIL Si AVEC INSERTION DE Puits QUANTIQUES

Présentée par :

Meriem SAFI

Devant le jury composé de :

Mr.DJEBARI Mustapha	Professeur, U. de Blida	Président
Mr.AISSAT Abdelkader	Professeur, U. de Blida	Directeur de thèse
Mr.NACER Said	Professeur, U. de Blida	Examineur
Mme.RAHMOUN Khadidja	Professeur, U. de Tlemcen	Examinatrice
Mr. ROUABAH Zahir	Professeur, U. de BBA	Examineur

Blida, juin 2024

REMERCIEMENTS

En premier lieu, je souhaite exprimer ma gratitude envers Dieu, le Tout-Puissant, pour m'avoir donné la force de poursuivre mes objectifs malgré les épreuves et les moments difficiles que j'ai rencontrés tout au long de la réalisation de ce travail.

J'aimerais également exprimer mes sincères remerciements à mon encadreur et directeur de thèse, le Professeur **AISSAT Abdelkader**, pour sa confiance en moi et pour m'avoir guidé tout au long de ces années.

Je tiens particulièrement à le remercier, pour sa patience inestimable pendant la période d'encadrement, ainsi que pour la valeur de ses idées et ses conseils précieux qui ont enrichi ce travail.

Que soient également remerciés tous les membres du jury, **Mr DJEBBARI Mustapha**, **Mr NACER Said**, **Mme RAHMOUNE Khadidja** et **Mr ROUABAH Zouhir**, pour l'honneur et l'intérêt qu'ils m'ont accordé, en acceptant d'examiner mon manuscrit.

Je tiens à témoigner ma sincère reconnaissance envers **Mes très Chers Parents**, qui ont toujours été présents à mes côtés. Vous avez tout sacrifié pour moi, n'épargnant ni santé ni efforts. Vous m'avez offert un exemple magnifique de dévouement et de persévérance. Je vous suis reconnaissante pour l'éducation dont je suis particulièrement fière.

Je ne les remercierai jamais assez pour tout, car leur encouragement était pour moi les piliers fondateurs de ce que je suis et ce que je fais, je vous offre ce travail en témoignage de tous les sacrifices et l'immense tendresse dont vous m'avez comblé.

Je voudrai aussi exprimer mes sincères remerciements à mes très chers amis, dont je n'ai pas les mots suffisants pour les décrire, dire des amis c'est vraiment peu, une sœur et un frère dont je ne pourrai pas trouver comme eux, des personnes rares de nos jours.

ZOULIKHA Meriem et **GUESMI Houcine**, deux docteurs d'état qui ont changé ma vie, leur connaissance été pour moi une réussite, ce sont des personnes merveilleuses, qui ont subi mes vanes foireuses, mes sauts d'humeur, je ne l'ai remercierai jamais assez pour leur soutien, leur patience, ainsi que leur support moral, je leur serai reconnaissante jusqu'à la fin de ma vie.

Mes remerciements les plus sincères au docteur **Manel BOUBEKEUR**, et à tous mes amis qui ont contribués de près ou de loin à l'élaboration de ce mémoire.

ملخص

الهدف الأساسي من هذه الأطروحة هو نمذجة ومحاكاة وتحسين الخلايا الشمسية الجديدة لمختلف تطبيقات الطاقة الشمسية الضوئية بناءً على أقرص نانوية SiGe و CIGS وعلى قواعد السيليكون، لتحديد المعلمات الخاصة بالخلايا الشمسية. قمنا بتطويرها بناءً على برامج حسابية مختلفة تمكننا من محاكاة هذه الهياكل ورسم خصائص التيار الجهد J-V - ومعامل الامتصاص واستجابة الطيفية . EQE الهدف الرئيسي لهذه الدراسة هو زيادة كفاءة التحويل من خلال التلاعب ببعض مكونات الخلية ودمج عناصر جديدة مثل البئر الكمي QWs. بالإضافة إلى ذلك، تؤثر عدة عوامل مثل: درجة الحرارة وتغيرات النصف قطر أي ضا على تلاعب كفاءة الخلية.

الكلمات المفتاحية: الخلية الشمسية، أسلاك نانوية، بئر كمي، الطاقة الضوئية.

RESUME

Ce travail a pour objectif de modéliser, de simuler et d'optimiser de nouvelles cellules solaires pour des applications photovoltaïques à base de Nanofils SiGe, CIGS sur substrat silicium. Afin de déterminer les paramètres caractéristiques de la Cellule Solaire, nous avons établi différents programmes de calcul, qui nous ont permis de simuler ces structures et de tracer les caractéristiques courant-tension J-V, coefficient d'absorption, ainsi que la réponse spectrale EQE. Le but principale de cette étude est d'augmenter l'efficacité de conversion en agissant sur quelques éléments constitutifs de la cellule, aussi l'intégration de nouveaux éléments, comme les puits quantiques PQs, ou autre, l'effet de température, le changement de rayon, ont tous contribués dans la manipulation de l'efficacité d'une cellule.

Mots clés : Cellule solaire (CS), Nanofils (NFs), Puits quantiques (PQs), Photovoltaïque.

ABSTRACT

This work aims to model, simulate, and optimize new solar cells for photovoltaic applications based on SiGe and CIGS nanowire substrates on silicon. To determine the characteristic parameters of the solar cell, we have developed various calculation programs that enable us to simulate these structures and plot the current-voltage (J-V) characteristics, absorption coefficient, as well as the spectral response (EQE). The main goal of this study is to increase the conversion efficiency by manipulating certain components of the cell and integrating new elements such as quantum wells (QWs). Additionally, factors such as temperature effects and changes in radius also contribute to the manipulation of cell efficiency.

Keywords : Solar cell (SC), Nanowires (NFs), Quantum wells (QWs), Photovoltaic.

TABLE DES MATIERES

REMERCIEMENT	ii
RESUME.....	iii
TABLE DE MATIERE.....	iv
LISTE DES ILLUSTRATIONS ET TABLEAUX.....	IX
LISTE DES SYMBOLES ET ABRREVIATIONS	XI
INTRODUCTION GENERALE.....	1

CHAPITRE 1 : GENERALITES SUR LE PHOTOVOLTAIQUE

1.1 Introduction	4
1.2 Rayonnement solaire.....	4
1.2.1 Généralités sur le soleil.....	4
1.2.2 Spectre du rayonnement solaire.....	5
1.2.3 Atténuation du rayonnement solaire par l’atmosphère.....	7
1.2.4 L’atmosphère	8
1.2.5 Composition de l’atmosphère terrestre.....	8
1.2.6 Masse atmosphérique ou nombre d’air masse.....	8
1.3 L’effet photovoltaïque.....	10
1.3.1 Historique de l’énergie PV	10
1.3.2 Système photovoltaïque.....	12
1.3.3 Avantages et inconvénients	12
1.3.4 Différents domaines d’applications	13
1.3.5 Paramètres de cellules photovoltaïques	14
1.4 Les semi-conducteurs.....	17
1.4.1 Généralités sur les semi-conducteurs.....	17
1.4.2 Le dopage.....	18
1.4.3 Les bandes d’énergies	19
1.4.4 La jonction PN.....	21
1.5 Conclusion.....	26

CHAPITRE 2 : GENERALITES SUR LES NANOFILS

2.1 Introduction	27
2.2 Les cellules solaires à bandes intermédiaires (CS-BI)	27
2.3 Les cellules solaires à bande intermédiaires à base de nanofil	30
2.4 Propriétés électroniques des nanostructures de basse dimensionnalité.....	31
2.5 Méthodes de fabrication	42
2.5.1 Approche descendante (top-down)	42
2.5.2 Approche ascendante (bottom-up).....	44
2.6 Modes de croissance des NFs	45
2.6.1 Mode Vapeur - Liquide - Solide	45
2.6.2 Mode Vapeur - Solide - Solide	45
2.6.3 Mode Solide - Liquide - Solide	46
2.7 Elaboration des NFs semi-conducteurs	47
2.7.1 NFs à structure simple de Si et de Ge	47
2.7.2 NFs à structure simple d’alliage $Si_{1-x}Ge_x$	50
2.7.3 Dopage des NFs	51
2.8 Caractérisations structurales.....	52
2.8.1 Microscopie à force atomique (AFM)	52
2.8.2 Microscopie électronique à balayage (MBE)	53
2.9 Intérêts des NFs.....	55
2.9.1 Intérêt des NFs pour la thermoélectricité.....	56
2.9.2 Intérêt des NFs pour le photovoltaïque.....	59
2.9.3 Intérêt des NFs pour l’électronique	60
2.10 Application des NFs	61
2.11 Conclusion.....	65

**CHAPITRE 3 : MODELISATION ET SIMULATION DES CELLULES SOLAIRE A
BASE DE NFS AVEC INSERTION DE PUIITS QUANTIQUES**

3.1 Introduction	66
3.2 Cellules solaires à Nanofils simulées à base de Si.....	66
3.2.1 Cellules solaire à base de Nanofils Si par insertion de puits quantiques de SiGe....	66

3.2.2 Cellules solaire à base de nanofil Si avec l'intégration de puits quantiques CIGS 71	
3.3 Conclusion.....	77

**CHAPITRE 4 : MODELISATION ET SIMULATION DES CELLULES SOLAIRE A
BASE DE NFs Si AVEC INSERTION DE PUIITS QUANTIQUES SiGe**

4.1 Introduction	78
4.2 Cellules solaires à base de NF de Si.....	78
4.2.1 Cellules solaire à base de NF avec insertion de PQs Si/SiGe.....	78
4.3 Conclusion.....	97
CONCLUSION GENERALE	98
REFERENCES.....	100

Liste des figures

Figure 1.1 Composante de l'éclairement global d'une surface horizontale.....	6
Figure 1.2 Représentation de la répartition spectrale de l'atmosphère	7
Figure 1.3 Les trois cas du spectre solaires	9
Figure 1.4 Excitation de paires électron –trou	15
Figure 1.5 Caractéristique et schéma équivalent d'une cellule photovoltaïque réelle	16
Figure 1.6 (a) Silicium de type n.....	18
Figure 1.6 (b) Silicium de type p.....	19
Figure 1.7 Diagramme de bandes d'énergies des matériaux semi-conducteurs	19
Figure 1.8 Gap direct et gap indirect ou k est le vecteur d'onde associé à un électron	20
Figure 1.9 Cristal de silicium de type N dopé par les atomes d'arsenic	23
Figure 1.10 Semi-conducteur de type N et P dopé de bore	24
Figure 1.11 Diagramme énergétique d'une jonction PN à l'équilibre thermodynamique (électrons et trous) dans les deux sens.....	25
Figure 2.1 Processus d'absorption de photons de faible énergie dans les cellules solaires à bande intermédiaire.....	28
Figure 2.2 : Schéma équivalent d'une cellule solaire utilisant une bande intermédiaire.....	29
Figure 2.3 : (a) structure d'un semi-conducteur massif, (b) évolution de la densité d'états en fonction d'énergie dans un semi-conducteur massif.....	31
Figure 2.4 : (a) Configuration d'un puits quantique, (b) Potentiel fini dans la configuration du puits quantique, (c) Variation de la densité d'états en relation avec l'énergie dans un puits quantique, (d) Schéma d'énergie d'une configuration de puits quantique.....	32
Figure 2.5 : (a) Configuration d'un fil quantique, (b) Variation de la densité d'états en fonction de l'énergie dans un fil quantique, (c) Profil de potentiel dans la structure du fil quantique	33

Figure 2.6 : (a) Configuration d'une boîte quantique, (b) Variation de la densité d'états en fonction de l'énergie dans une boîte quantique, (c) Profil de potentiel dans la structure de la boîte quantique	34
Figure 2.7 Illustration schématique des techniques bottom-up (a) et top-down (b)	39
Figure 2.8 Schéma de la méthode de fabrication de NFs horizontaux par une approche top-down	40
Figure 2.9 Schéma de la méthode de fabrication de nanofils horizontaux par Approche Bottom-up	41
Figure 2.10 Schéma du mécanisme VLS.....	43
Figure 2.11 Schéma de croissance couche par couche du nanofil.....	45
Figure 2.12 Image MEB de croissance de Bi à partir de gouttes de Ga.....	45
Figure 2.13 Schéma représentatif du mécanisme VLS.....	48
Figure 2.14 Images AFM directement après l'étape de croissance de la nanostructure	52
Figure 2.15 Image SEM montrant le motif ainsi que les échantillons 1 et 2	53
Figure 2.16 Images MEB de NFs obtenus par croissance VLS/CVD	54
Figure 2.17 Schéma de l'effet Seebeck	56
Figure 2.18 a) Jonction n-p fonction en générateur électrique, b) jonction n-p fonctionnant en réfrigération	57
Figure 2.19 Image schématique 3D d'un VS-FET (schmidt, 2006), (b) Image MEB d'interconnexion de NFs InAs (Disk, 2006).....	62
Figure 2.20 schéma d'une DEL à nanofil InP et (b) émission polarisée depuis la DEL selon l'axe du nanofil.....	62
Figure 2.21 schéma d'un virus unique dans 2 états lié et non lié à la surface d'un nanofil dans un dispositif avec des anticorps avec la variation temporelle de conductance correspondante à chaque état (patolsky, 2004).....	63
Figure 3.1 Structure de NFs à base de Si avec insertion de 5 puits quantiques de SiGe	67

Figure 3.2 J(V) de la CS pin Si et Si _{0.85} Ge _{0.15} /Si allant de 0 à 14 puits quantiques.....	68
Figure 3.3 P(V) de la CS pin Si et Si _{0.85} Ge _{0.15} /Si allant de 0 à 14 puits quantiques.....	69
Figure 3.4 Variation du FF et de V _{co} en fonction du nombre des puits quantiques insérer	69
Figure 3.5 Variation de l'efficacité de conversion en fonction du nombre de puits quantiques insérés.....	70
Figure 3.6 l'effet de la température sur l'efficacité de la CS à base de NFs pin Si et Si _{0.85} Ge _{0.15} /Si pour 2, 6, 10 et 14 puits quantiques.....	71
Figure 3.7 Structure de NFs à base de Si par insertion de 4 puits quantiques de CIGS.....	72
Figure 3.8 variation de l'énergie de gap et de la déformation en fonction de la concentration d'indium.....	73
Figure 3.9 EQE de la CS sans et avec 8 PQs CIGS/Si	73
Figure 3.10 Caractéristique J-V de la CS sans, avec 4 et 8 PQs CIGS/Si	74
Figure 3.11 Caractéristique P-V de la CS sans, avec 4 et 8 PQs CIGS/Si.....	74
Figure 3.12 variation des tensions de circuit ouvert et le Facteur de Forme de la CS pour un nombre variable de puits quantiques.....	75
Figure 3.13 variation des tensions de la densité de courant et de l'efficacité le de la CS pin Si et CIGS / Si pour un nombre variable de puits quantiques.....	76
Figure 4.1 Structure d'un nanofil unique pour cellules solaires : (a) nanofil simple Si p-i-n avec insertion de PQs Si _{1-x} Ge _x dans la région intrinsèque, (b) diagramme de bande d'énergie d'une CS à NF et (c) l'effet de confinement de la structure proposé.....	80
Figure 4.2 Variation de l'énergie de la bande interdite et de la déformation en fonction de la concentration en germanium	81
Figure 4.3 Variation de l'épaisseur critique en fonction de la concentration en germanium.....	82
Figure 4.4 Variation du coefficient de réflexion en fonction de la concentration en germanium.....	83

Figure 4.5 Diagramme de bande d'énergie d'une CS à NFs : (a) Diagramme de bande d'énergie d'un nanofil Si avec insertion de QWs SiGe/Si, (b) Diagramme de bande d'énergie d'un seul puits quantique de SiGe (c), énergie de quantification des trous en fonction de profondeur et (d) énergie de transition en fonction de la profondeur..... 84

Figure 4.6 Efficacités quantiques externes en fonction de la longueur d'onde pour 0 et 4 PQ.....86

Figure 4.7 Caractéristique J-V d'un nanofil de Si avec insertion de 4 PQ..... 87

Figure 4.8 Caractéristique P-V d'un nanofil de Si avec insertion d'une CS à base de 4 PQ en fonction de la concentration en germanium..... 88

Figure 4.9 Variation du rendement en fonction de la concentration en germanium et de la température.....89

Figure 4.10 Variation de la tension en circuit ouvert et du rendement en fonction de la concentration en germanium pour 4 PQ..... 89

Figure 4.11 Variation de l'EQE en fonction de la longueur d'onde pour 0, 8 et 14 PQ..... 90

Figure 4.12 Variation du coefficient d'absorption en fonction de la longueur d'onde pour trois valeurs de puits quantiques 0, 8 et 14... .. 91

Figure 4.13 Caractéristique I-V d'une CS à base de NFs Si p-i-n et d'une CS Si_{0.95}Ge_{0.05} /Si pour différents nombres de QW insérés dans la région intrinsèque.....92

Figure 4.14 Caractéristique P-V d'une CS à base de NFs Si p-i-n et d'une CS Si_{0.95}Ge_{0.05} /Si pour différents nombres de PQs insérés dans la région intrinsèque.....92

Figure 4.15 Comparaison J-V de nos structures simulées et des NFs de Si expérimentaux.....93

Figure 4.16 Comparaison P-V de nos structures simulées et des NFs de Si expérimentaux.....94

Figure 4.17 Variation du rendement en fonction du nombre de puis quantique et du rayon.....95

Figure 4.18 : Variation du rendement en fonction du nombre de puis quantique et du rayon.....96

Liste des Tableaux

Tableau 3.1 l'influence de la concentration du silicium sur les différents paramètres de la cellule
..... 67

Tableau 3.2 Les paramètres importants de la CS pin Si et SiGe_{0.85} Ge_{0.15}/ Si allant de 0 à 14 puits
quantiques..... 70

Tableau 3.3 Les paramètres caractéristiques de la CS pin Si et CIGS/ Si allant de 0 à 14 puits
quantiques..... 76

Tableau 4.1 Caractéristiques électriques de CS de nanofil avec insertion de 4 PQ de SiGe/Si pour
différentes concentrations de Germanium..... 88

Tableau 4.2 Caractéristique électrique de la CS à PQ de SiGe/Si pour différents nombres de puits
quantiques..... 94

LISTES DES ABREVIATIONS ET SYMBOLES

ABREVIATIONS

NFs	: Nanofils.
Si	: Silicium.
Ge	: Germanium.
CIGS	: Cuivre-Indium-Sélénure de Gallium.
J-V	: Caractéristique courant-tension.
EQE	: Efficacité quantique externe.
UV	: Ultraviolet.
LV	: Lumière visible.
IR	: Infrarouge.
AM	: Notion d'Air Masse
Se	: Sélénium
Al	: Aluminium
MPPT	: Maximum Power Point Traking
P	: Phosphore
B	: Bore
DN	: Donneurs ionisés positivement
AN	: Accepteurs ionisés négativement
ZNE	: Zone d'espace de charge
Vd	: Tension de diffusion
J	: Courant inverse des porteurs de charge
CS	: Cellule solaire
SOI	: Silicon on insulator
CVD	: Chemical vapor deposition
VLS	: Vapeur liquide solide
VSS	: Vapeur solide solide
SLS	: Solide liquide solide
Au	: Or
LPCVD	: Low pressure chemical vapor deposition
MBE	: Microscope électronique à balayage
MOVPE	: Metalorganic Vapour Phase Epitaxy
As	: Arsenic
CMOS	: Complementary Metal-Oxide-Semiconductor
Cu	: Cuivre
Pt	: Platine
LTM	: Laboratoire des Technologies de la Microélectronique
AFM	: Atomic Force Microscopy

LISTES DES ABREVIATIONS ET SYMBOLES

FIB	: Focused Ions Beam
HF	: Attaque à l'acide fluorhydrique
EJM	: Epitaxie par jet moléculaire
SMD	: Semi-conducteurs magnétiques dilués
QW	: Quantum well
PQ	: Puits quantique
NWQW	: Nanowires quantum well

SYMBOLES

G	: Intensité de radiation
σ	: Constante de Stefan-Boltzman
T	: Température
D	: Rayonnement direct
S	: Rayonnement diffus
G	: Rayonnement global
λ_m	: Longueur d'onde maximal
R_γ	: Rayons gamma.
R_x	: Rayons x.
μO	: Micro-onde.
ρ	: Masse volumique.
l	: Longueur du trajet optique.
m'	: masse atmosphérique
z	: L'altitude
E_g	: Energie de gap
E_c	: Bande de conduction
E_v	: Bande de valence
R_c	: Résistance de charge
I _{ph}	: Photocourant
I _d (V)	: Courant d'obscurité
I _{cc}	: Courant de court-circuit
V _{oc}	: Tension de circuit ouvert
FF	: Facteur de Forme
η	: Rendement de conversion d'énergie
SiH ₄	: Silane
GeH ₄	: Germane
SiCl ₄	: Tétrachlorure de silicium
Si ₂ H ₆	: Disilane
GeCl ₄	: Tétrachlorure de germanium
Ge ₂ H ₆	: Digermane
C	: Catalyseur
BH ₃	: Borane
PH ₃	: Phosphine
J _{sc}	: Densité de courant
J _{cc}	: Densité de courant de court-circuit
h _c	: Epaisseur critique

LISTES DES ABREVIATIONS ET SYMBOLES

R	: Coefficient de reflexion
r	: Rayon d'un nanofil
P_m	: Puissance maximale
n	: Densité des electrons
p	: Densité des trous
n_i	: Densité intrinsèque

INTRODUCTION GENERALE

L'énergie fossile est une source d'énergie qui provient de la combustion de combustibles fossiles tels que le pétrole, le gaz naturel et le charbon. Ces ressources ont été formées à partir de matières organiques d'origine végétale et animale il y a des millions d'années, elles sont stockées dans la terre sous forme de réservoirs naturels, ces dernières ont joué un rôle central dans le développement industriel et économique du monde moderne. Elles ont fourni une grande partie de l'énergie utilisée pour alimenter les usines, les transports, les infrastructures et les systèmes de chauffage dans de nombreux pays. Cependant, l'utilisation intensive des énergies fossiles présente également des problèmes environnementaux et économiques significatifs. L'une des principales préoccupations est la contribution des combustibles fossiles aux émissions de gaz à effet de serre, en particulier le dioxyde de carbone (CO₂), qui est considéré comme l'un des principaux facteurs du changement climatique. En outre, l'extraction et la combustion des énergies fossiles peuvent avoir des effets négatifs sur l'environnement, tels que la pollution de l'air, de l'eau et des sols. De plus, les réserves de combustibles fossiles sont limitées et non renouvelables, ce qui pose des défis en termes de sécurité énergétique et de dépendance aux importations. Ces préoccupations ont conduit à un intérêt croissant pour les sources d'énergie alternatives et renouvelables, telles que l'énergie solaire, éolienne, hydraulique, géothermique et biomasse, qui offrent des avantages environnementaux et une plus grande durabilité à long terme [1].

Ces énergies renouvelables sont des sources d'énergie qui proviennent de ressources naturelles inépuisables ou constamment renouvelées. Contrairement aux énergies fossiles, elles n'épuisent pas les ressources limitées de la planète et ont un impact environnemental moindre, elles offrent de nombreux avantages, notamment la réduction des émissions de gaz à effet de serre, la diversification des sources d'énergie, la création d'emplois locaux et la diminution de la dépendance aux combustibles fossiles importés. Elles contribuent également à la sécurité énergétique et à la durabilité à long terme.

L'énergie solaire photovoltaïque est une forme d'énergie renouvelable qui convertit directement la lumière du soleil en électricité. Elle repose sur l'utilisation de cellules photovoltaïques qui captent les photons de la lumière solaire et les transforment en courant électrique continu. L'énergie solaire photovoltaïque offre de nombreux avantages en termes de

durabilité, de fiabilité et d'accessibilité. Elle est également devenue de plus en plus accessible au fil des années. Les coûts de production des panneaux solaires ont considérablement diminué, rendant cette technologie plus compétitive par rapport aux sources d'énergie traditionnelles. De plus, les progrès technologiques ont permis d'améliorer l'efficacité des cellules solaires, augmentant ainsi le rendement énergétique [2-3].

Les nanostructures sont des structures à l'échelle nanométrique, ce qui signifie qu'elles sont extrêmement petites, mesurées en milliardièmes de mètre (10^{-9} m). Elles peuvent être fabriquées à partir de divers matériaux tels que les métaux, les polymères, les semi-conducteurs et les oxydes. Les nanostructures peuvent être classées en différentes catégories, telles que les nanoparticules, les nanofils (NFs), les nanotubes, les nanocristaux et les nanoplaquettes, pour n'en citer que quelques-unes. Chaque type de nanostructure a des caractéristiques particulières et peut être utilisé dans des domaines spécifiques.

Parmi les nanostructures coexistant, nous trouvons les NFs qui sont des structures filamenteuses à l'échelle nanométrique, et qui ont des dimensions extrêmement réduites. Ils sont généralement fabriqués à partir de matériaux semi-conducteurs tels que le silicium, le germanium ou d'autres matériaux, et ont un diamètre typiquement de l'ordre du nanomètre (10^{-9} m). Les NFs possèdent des propriétés uniques en raison de leur taille et de leur structure allongée. Leur aspect filiforme leur confère une grande surface par rapport à leur volume, ce qui peut avoir un impact significatif sur leurs propriétés physiques et électroniques.

En raison de leurs dimensions nanométriques, les NFs peuvent présenter des propriétés quantiques. Les électrons à l'intérieur des NFs sont confinés dans des états quantiques discrets, ce qui peut modifier leur comportement et leurs propriétés électriques. Cela ouvre de nouvelles possibilités pour les applications électroniques et optiques à l'échelle nanométrique. Les NFs peuvent être utilisés dans un large éventail d'applications. Dans le domaine de l'électronique, ils peuvent servir de transistors ultra-miniatures, de dispositifs de stockage d'informations ou de composants pour des circuits intégrés à haute densité. Leur petite taille permet une miniaturisation accrue des dispositifs électroniques et peut contribuer à l'avancement de la nanotechnologie.

De plus, les NFs peuvent être utilisés dans des dispositifs photovoltaïques pour la conversion de l'énergie solaire en électricité. Leur grande surface permet une absorption efficace de la lumière solaire, ce qui peut améliorer l'efficacité des cellules solaires [4].

Cependant, la fabrication et la manipulation des NFs peuvent être complexes et nécessitent des techniques de fabrication avancées. Des recherches continues sont nécessaires pour améliorer la production et la compréhension des propriétés des NFs, ainsi que pour résoudre les défis techniques associés à leur intégration dans des dispositifs fonctionnels [4-5].

Dans ce contexte, la thèse se focalise essentiellement sur la modélisation et simulation des cellules solaires à NFs à base de matériaux semi-conducteurs III-V, Si, Ge, CIGS et GaAs sur substrat Si. On cherche d'une part est l'augmentation de l'efficacité de conversion qui se repose sur l'amélioration de l'absorption des photons incidentes, et d'autre part la réduction des couts approuvait par une réduction de la matière utilisée. Ce présent manuscrit est constitué d'une introduction générale et de quatre chapitres, suivie d'une conclusion générale et de perspectives.

Le premier chapitre est consacré à l'état d'art, nous avons commencé ce travail par l'explication modérée du rayonnement solaire, puis nous avons entamé ce chapitre par l'explication de l'effet photovoltaïque afin d'expliquer le principe de la conversion des photons en électricité, nous présentons ensuite, le principe de fonctionnement et les modèles électriques idéals et réels d'une cellule solaire (CS). Ainsi, nous décrivons les caractéristiques électriques principales d'une cellule photovoltaïque aussi, nous avons abordé le sujet des semi-conducteurs.

Le deuxième chapitre se résume sur le vif du sujet « les NFs », nous avons commencé ce chapitre par les méthodes de fabrication de ses derniers, puis leurs modes de croissances, la caractérisation structurale, ensuite, nous avons finalisé par l'intérêt des NFs ainsi que leurs applications.

Le troisième et le quatrième chapitre se concentrent sur les résultats de simulations menées au cours de cette étude. Nous avons examiné différentes structures de cellules solaires nanostructurées à faible dimensionnalité. Nous avons étudié l'impact de plusieurs paramètres, tels que l'intégration de puits, la température et la composition des alliages de matériaux, sur divers aspects, notamment les paramètres électriques, les caractéristiques courant-tension J-V, l'efficacité quantique externe EQE, ainsi que le coefficient d'absorption. Ces travaux nous ont permis de participer à des conférences internationales et de préparer des publications scientifiques de renommées.

1.1 Introduction

Durant cette dernière décennie, une nouvelle technologie a vu le monde, une technologie caractérisée par la miniaturisation, soit la fabrication de système à l'échelle nanoscopique, cette dernière a tendance à montrer ses compétences et ses propriétés remarquables qui répondent aux exigences de mobilité et de facilité d'utilisation. Cette nouvelle révélation a touché plusieurs disciplines, parmi lesquelles nous trouvons les énergies renouvelables.

Depuis la révolution industrielle, la consommation énergétique mondiale n'a cessé d'augmenter, une consommation en flèche a été remarquer sur plusieurs ressources d'énergie soit 81 % des énergies fossiles, 31 % proviennent du pétrole, 29 % de charbon et 21 % de gaz naturel d'après un recensement fait ces dernières années. Pour cela plusieurs chercheurs se surpasse afin de trouvé des ressources d'énergies permettant une grande longévité. L'énergie solaire photovoltaïque est la bonne solution, du fait de son abondance qui nous permet de subvenir au besoin mondial.

La technologie du photovoltaïque c'est rapidement et efficacement développé dans le contexte de la micro-optoélectronique, cependant une grande quantité de matière est nécessaire ce qui nous mène à des prix excessivement élevés pour bénéficier de ce genre de système. Pour cela plusieurs études ont été réalisées afin de développer des cellules solaires photovoltaïques à base de nanostructures avec un compromis de rendement élevé. Les NFs sont la révolution de ces études, en effet, ils permettent le piégeage de la lumière, aussi la géométrie de ses derniers permettent une collecte efficace de porteurs de charge photogénères avec des dimensions optimales pour un faible cout.

1.2 Rayonnement solaire

1.2.1 Généralités sur le soleil

Le soleil est une sphère de gaz composée principalement d'hydrogène à hauteur de 75%, d'hélium à hauteur de 23%, et de 2% d'autres constituants de l'univers. Il a une masse de $1,99.10^{30}$ kg et un rayon de 696 000km, ce qui correspond à un diamètre de $1,39.10^9$ m. À l'intérieur du soleil, se produisent des réactions thermonucléaires où les atomes d'hydrogène fusionnent pour former de l'hélium, libérant ainsi de l'énergie qui est ensuite émise sous forme de radiations dans l'espace.

La surface extérieure du soleil, appelée photosphère, atteint une température d'environ 5800 °K. Les régions internes centrales du soleil ont une température allant de 8.10^6 °K à 40.10^6 °K, et leur densité est estimée à environ 100 fois celle de l'eau. Dans cette région extérieure, la matière absorbe le rayonnement provenant des couches intérieures et le réémet vers l'extérieur. En effet, la photosphère joue le rôle d'un corps noir. Un corps noir est une entité théorique maintenue à une température constante, qui absorbe intégralement le rayonnement qu'il reçoit. Il agit comme un absorbeur de radiations électromagnétiques à 100% sur toutes les longueurs d'ondes. L'intensité du rayonnement émis par un corps noir est calculée par la loi de Stefan-Boltzmann [6-7] :

$$G = \sigma \cdot T^4 \quad (1.1)$$

avec

G : Intensité de la radiation [w/m^2] ;

σ : Constante de Stefan-Boltzman [$5.67 \cdot 10^{-8} w/m^2/k^4$] ;

T : Température absolue du corps [en kelvin].

Un corps rayonne d'autant plus qu'il est plus chaud.

1.2.2 Spectre du rayonnement solaire

Le rayonnement solaire est la propagation de la lumière émise par le soleil sous forme d'ondes électromagnétiques. Il représente une source d'énergie disponible quotidiennement, dont l'intensité varie en fonction de la localisation, de l'heure du jour et de la saison. Environ 98% de cette énergie se situe dans la plage de longueurs d'onde entre 0,25 et 4 μm , tandis que le reste se répartit en 1% au-dessus et 1% en dessous de cet intervalle. Le rayonnement solaire qui atteint la surface terrestre se compose de deux types principaux : le rayonnement direct (D) et le rayonnement diffus (S). Ensemble, ils forment le rayonnement global (G). Le rayonnement solaire direct est celui qui provient directement du soleil. Il est nul lorsque le soleil est occulté par les nuages.

Le rayonnement solaire diffus est engendré par la diffraction de la lumière solaire par les nuages et les particules présentes dans l'atmosphère. Il est nul pendant la nuit. La composante diffuse est issue de la voûte céleste, ce qui explique sa prédominance dans le spectre bleu, En raison de son absence d'orientation préférentielle, elle ne peut pas être focalisée par des instruments optiques. Pendant les mois d'hiver, lorsque le ciel est souvent nuageux, il n'est pas

nécessaire d'orienter les panneaux solaires directement vers le soleil. Cela est dû à la composante diffuse de la lumière solaire, qui représente une proportion importante (80%). Il est préférable de positionner les panneaux solaires à l'horizontale, comme illustré dans La distribution d'énergie en fonction de la longueur d'onde est la suivante [8-9] :

- Pour les longueurs d'onde comprises entre 0,25 et 0,4 μm , nous sommes dans le domaine de l'ultraviolet (invisible). Cette plage représente 7 % de l'énergie totale émise par le soleil.
- Pour les longueurs d'onde comprises entre 0,4 et 0,8 μm , nous sommes dans le domaine du visible. Cette plage représente 47,5 % de l'énergie totale émise par le soleil.
- Pour les longueurs d'onde comprises entre 0,8 et 4 μm , nous sommes dans le domaine de l'infrarouge (invisible). Cette plage représente 45,5 % de l'énergie totale émise par le soleil.

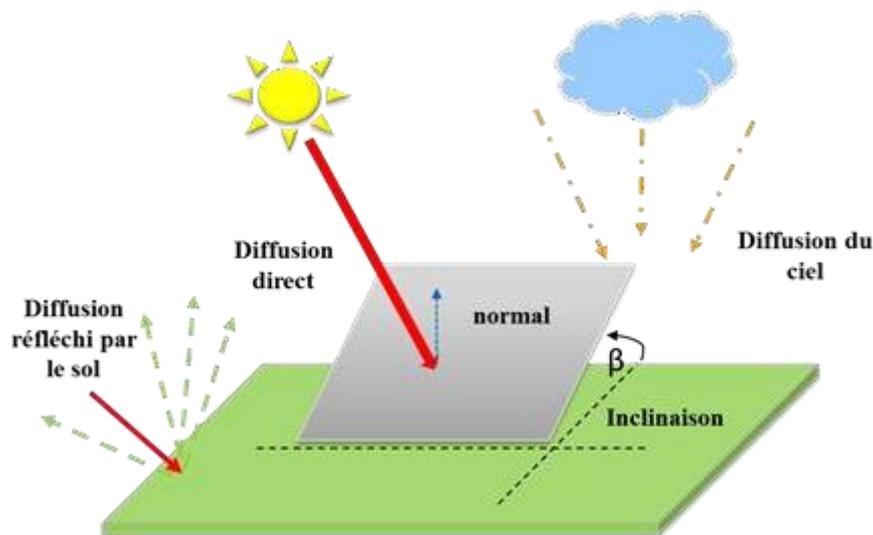


Figure 1.1 : Composante de l'éclairage global d'une surface horizontale [9].

Le rayonnement solaire peut être comparé à celui d'un corps noir ayant une température de 5800K, dans la plage spectrale allant de 0,25 μm à 4 μm [4] [2]. L'énergie émise par le soleil n'est pas répartie uniformément sur l'ensemble des longueurs d'onde. Elle atteint un maximum pour une longueur d'onde déterminée, conformément à la loi de Wien.

$$\lambda_m \cdot T = 2898 \mu\text{m} \cdot \text{K} \quad (1.2)$$

Pour une température de $T = 5800 \text{ K}$, la longueur d'onde maximale approximative est $\lambda_m \approx 0,5\mu\text{m}$.

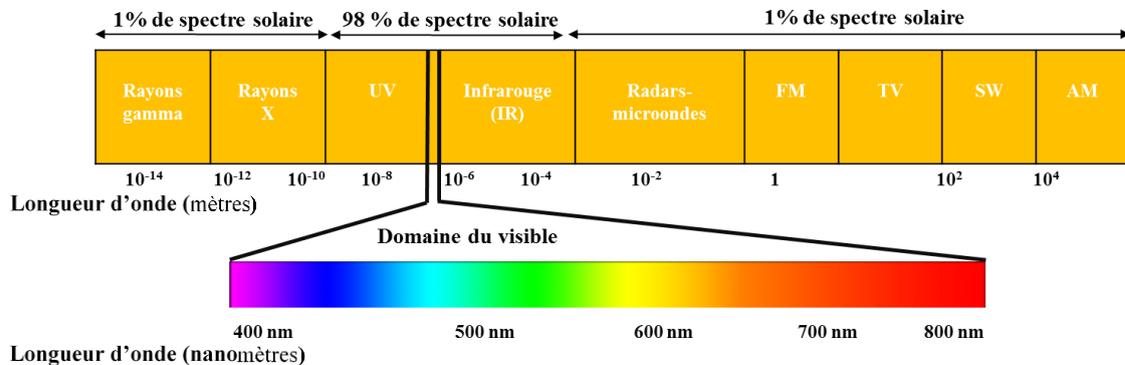


Figure 1.2 : représente la répartition spectrale de l'atmosphère [17].

1.2.3 Atténuation du rayonnement solaire atmosphérique

Le rayonnement solaire subit différentes formes d'atténuation lorsqu'il traverse l'atmosphère, qui peut être définie de la manière suivante [11] :

Atténuation par absorption : Dans ce processus, une partie du rayonnement solaire est absorbée par l'atmosphère et transformée en chaleur, ce qui fait diminuer la quantité de rayonnement utilisable au niveau du sol.

Atténuation par diffusion : Ici, le rayonnement solaire est diffusé dans différentes directions après avoir interagi avec les molécules et les particules présentes dans l'atmosphère. Ce rayonnement diffusé peut être renvoyé vers le sol ou dispersé dans l'espace.

Le rayonnement solaire reçu au niveau du sol est généralement exprimé par la somme de deux composantes : le rayonnement direct (provenant des rayons solaires parallèles) et le rayonnement diffus (issu de différentes directions de l'espace de manière non isotrope). Cette combinaison du rayonnement direct et du rayonnement diffus est appelée rayonnement global [12]. Pour une longueur d'onde donnée λ , l'atténuation du rayonnement direct (en termes d'absorption et de diffusion) dépend du type et du nombre d'obstacles rencontrés par les photons sur leur trajet.

1.2.4 L'atmosphère

L'atmosphère, qui est la couche gazeuse externe de notre planète, joue un rôle essentiel en tant qu'enveloppe protectrice. Elle est transparente aux rayons lumineux dans la plage du spectre visible. Cependant, en raison des propriétés des molécules qui la composent, elle a la capacité d'absorber une partie du rayonnement électromagnétique et de le réémettre à une autre longueur d'onde. En conséquence, seule une fraction de l'énergie solaire parvient à atteindre la surface de la Terre [13-14].

1.2.5 Composition de l'atmosphère terrestre

L'atmosphère est considérée comme un mélange complexe comprenant :

- De l'air sec et pur ;
- De la vapeur d'eau ;
- Des aérosols (de fines particules en suspension dans l'air).

L'atmosphère sèche et pure est principalement composée de 78% d'azote, 21% d'oxygène, 1% d'argon et divers autres gaz. Les caractéristiques d'absorption de l'atmosphère sont déterminées par ses différents composants. Pour étudier l'atmosphère de manière verticale, nous la divisons en différentes couches, chaque couche étant définie par un changement de la variation de la température en fonction de l'altitude [15-16]. Voici les principales couches de l'atmosphère :

- **La troposphère** : Elle s'étend depuis la surface de la Terre jusqu'à une altitude d'environ 12 km. C'est dans cette couche que se produisent les phénomènes météorologiques ;
- **La stratosphère** : Elle s'étend de 12 km à environ 50 km d'altitude ;
- **La mésosphère** : Elle s'étend de 50 km à 80 km d'altitude ;
- **La thermosphère** : Elle s'étend de 80 km à 500 km d'altitude.

1.2.6 Masse atmosphérique ou nombre d'air masse

L'étendue de l'atmosphère terrestre est immense, mais sa densité diminue progressivement jusqu'à atteindre pratiquement zéro. Par conséquent, il n'est pas possible de définir une épaisseur finie pour l'atmosphère. Cependant, lorsqu'il s'agit de l'atténuation du rayonnement, ce qui importe est la quantité de matière rencontrée par un rayon [17]. L'atténuation dépend à la fois de la longueur du trajet optique (l) et de la densité de molécules, qui est caractérisée par la masse

volumique (ρ). Le produit de ces deux paramètres, (ρ, l), représente la masse atmosphérique d'une colonne d'air ayant une longueur (l) et une section unitaire. La quantité de matière atmosphérique traversée par un rayon est souvent exprimée comme la "masse atmosphérique" (m'). La masse atmosphérique, représentée par m' , est déterminée par la variation de la densité de molécules (ρ) et de la longueur du trajet optique (l), qui sont tous deux fonction de l'altitude (z). Ainsi, la masse atmosphérique m' qui est mesurée en kilogrammes par mètre carré (kg/m^2), correspondant à une variation dl le long de la trajectoire du rayon.

Le terme d'Air-Masse (AM) a été développé pour permettre la comparaison des performances des cellules solaires de manière universelle et pour définir le spectre solaire en fonction de l'énergie rayonnée. (Figure 1.3). L'Air-Masse quantifie la quantité d'énergie absorbée par l'atmosphère en relation avec l'angle θ , qui est déterminé par la position du soleil par rapport au zénith. On distingue les valeurs suivantes :

- **AM0** : L'irradiance hors atmosphère. Cette valeur est utilisée pour prédire le comportement des cellules solaires dans des applications spatiales, et est d'environ $1350\text{W}/\text{m}^2$;
- **AM1** : Qui signifie l'irradiance directe reçue au sol lorsque $\theta = 0^\circ$ ($\text{AM}=1$). Cela correspond au soleil étant au zénith à l'endroit d'observation, et l'irradiance est d'environ $1000\text{W}/\text{m}^2$;
- **AM1.5** : Il s'agit du spectre le plus étudié, où l'irradiance reçue au sol est à un angle de 45° . On peut distinguer deux types de spectres : AM1.5D fait référence au rayonnement direct reçu au sol, avec une puissance d'environ $833\text{W}/\text{m}^2$. AM1.5G représente le rayonnement global reçu sur Terre, en tenant compte du rayonnement direct et diffus, et sa puissance est d'environ $1000\text{W}/\text{m}^2$.

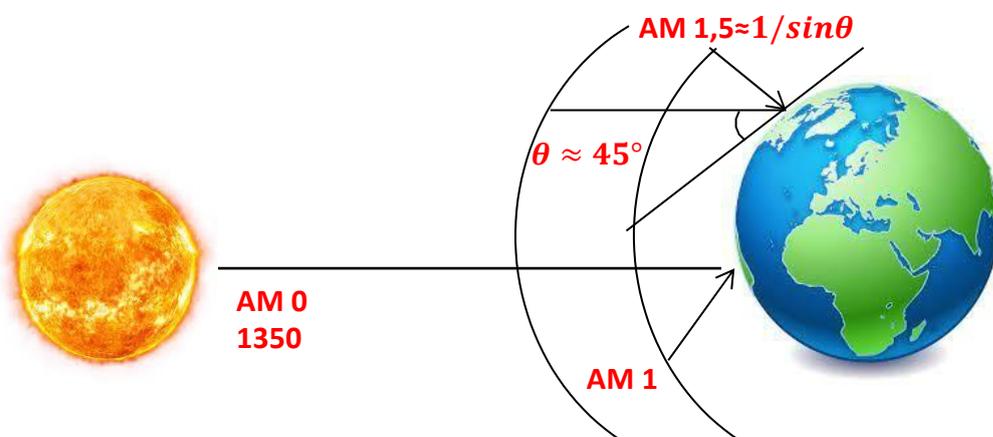


Figure 1.3 : Les trois cas du spectre solaire [17].

I.3 L'effet photovoltaïque

Le phénomène de l'effet photovoltaïque se manifeste lorsque deux matériaux distincts, mis en contact, engendrent une différence de potentiel électrique en réaction à l'irradiation solaire, provoquée par l'absorption de la lumière par un matériau semi-conducteur. Dans ce chapitre, notre objectif consiste à présenter les concepts fondamentaux de la physique des cellules photovoltaïques en vue de comprendre leur mode de fonctionnement. Nous débuterons en évoquant quelques dates historiques marquantes dans le domaine du photovoltaïque. Ensuite, nous exposerons le principe du système photovoltaïque, en évoquant ses avantages et ces inconvénients, ainsi que les paramètres des cellules photovoltaïques. [18]

Une cellule photovoltaïque est basée sur l'effet photovoltaïque, un phénomène physique qui se manifeste par la génération d'une force électromotrice lorsque la surface de la cellule est exposée à la lumière. La tension produite peut varier entre 0,3 V et 0,7 V, en fonction du matériau utilisé, de sa configuration, de la température de la cellule et de son vieillissement. La figure (1.3) illustre une cellule photovoltaïque typique, en détaillant sa structure. Sur le plan industriel, les cellules à base de silicium monocristallin atteignent un rendement énergétique de 13 à 14 %, tandis que celles en silicium polycristallin atteignent 11 à 12 %, et enfin, les cellules en silicium amorphe en films minces atteignent 7 à 8 % [19]. La CS, également appelée photopile, constitue l'élément de base d'un générateur photovoltaïque.

1.3.1 Historique de l'énergie PV

L'énergie photovoltaïque a vu le jour en 1839 grâce aux travaux du physicien français Edmond Becquerel. Il a réalisé cette avancée en étudiant le courant engendré entre deux électrodes recouvertes de platine dans un récipient contenant un électrolyte, qui était exposé à la lumière solaire. Becquerel a noté que l'intensité du courant variait en fonction de l'exposition à la lumière [20].

En 1873, l'ingénieur britannique Willoughby Smith, assisté de Joseph May, a découvert que le matériau semi-conducteur sélénium (Se) modifiait sa résistance sous l'influence de la lumière [21]. Peu après, en 1876, Adams et Day ont exploré l'effet de la lumière sur les courants traversant le sélénium en utilisant des contacts en platine, et ils ont constaté que des courants électriques pouvaient être induits à travers les échantillons lorsqu'ils étaient exposés à la lumière [22].

Fritts a confirmé l'existence de cette force électromotrice en 1883. Il a réussi à fabriquer une cellule au sélénium avec une contre-électrode en or, obtenant un rendement de conversion d'environ 1% [23]. Néanmoins, à l'époque, ces cellules solaires affichaient des rendements très limités, ce qui restreignait considérablement leur utilisation.

Par la suite, Minchin a fait un pas en avant en développant des cellules utilisant la structure Al/Electrolyte/Se/Al, générant des tensions photovoltaïques supérieures à 0,5 volt en plein jour. Minchin a également été le premier à suggérer que ces cellules photovoltaïques pourraient servir à convertir l'énergie solaire en électricité. Albert Einstein a théorisé le principe du photovoltaïque en 1905, ce qui lui a valu le prix Nobel de physique en 1921. Les années 1930 ont vu le développement des premières cellules solaires fonctionnelles à base d'oxyde cuivreux et de sélénium.

La découverte cruciale de la jonction pn a eu lieu en 1949, lorsque l'ingénieur américain Russel Ohl l'a mise en lumière. Cette avancée a ouvert la voie à la production de cellules en silicium stables, atteignant un rendement d'environ 6% en 1954 grâce aux chercheurs américains Chapin, Fuller et Pearson.

En 1955, Prince a réalisé la première étude analytique du rendement photovoltaïque, suivie par Loferski, qui a montré l'existence d'une bande interdite optimale d'environ 1,5 eV pour les cellules solaires à jonction pn. Ces découvertes ont stimulé la recherche sur d'autres matériaux tels que l'arséniure de gallium, le tellure de cadmium et le phosphore d'indium.

La période jusqu'en 1970 a été marquée par un développement intensif des cellules solaires, principalement alimenté par les besoins des programmes spatiaux. En effet, les premières cellules solaires ont été déployées en orbite en mars 1958 pour fournir de l'électricité lors des missions spatiales. La crise énergétique mondiale de 1973, due à la dépendance aux énergies fossiles, a incité les pays à explorer de nouvelles sources d'énergie renouvelable, propres et économiques. C'est devenu évident que les énergies renouvelables seraient cruciales pour les décennies à venir, ce qui a intensifié le développement des cellules solaires pour une utilisation sur Terre.

Cela explique la croissance spectaculaire de la mise en place de centrales photovoltaïques, avec une capacité cumulée atteignant plusieurs dizaines de gigawatts (GW) entre 2010 et 2017. Au cours de cette période, la puissance installée dans le parc photovoltaïque mondial est passée de 40 GW à 402 GW [24-32].

1.3.2 Système photovoltaïque

La puissance électrique produite par une seule cellule, qui est l'unité de base d'un système photovoltaïque, est très faible, généralement de 1 à 3 W avec une tension inférieure à un volt. Pour augmenter la puissance, les cellules sont regroupées pour former un module ou un panneau solaire. En connectant plusieurs cellules en série, la tension est augmentée pour un même courant, tandis que la connexion en parallèle permet d'augmenter le courant tout en conservant la tension. La plupart des modules solaires disponibles sur le marché sont composés de 36 cellules en silicium cristallin, connectées en série pour des applications en 12 V. La puissance de sortie, et donc la puissance totale du module, est proportionnelle à sa surface.

L'interconnexion des modules entre eux, en série ou en parallèle, permet d'obtenir une puissance encore plus élevée, formant ainsi un champ photovoltaïque. Le générateur photovoltaïque est constitué de ce champ de modules ainsi que d'un ensemble de composants qui adaptent l'électricité produite par les modules aux besoins des appareils. Cet ensemble, appelé également "Balance of System" ou BOS, comprend tous les équipements situés entre le champ de modules et la charge finale, tels que la structure de support (fixe ou mobile) des modules, le câblage, la batterie pour le stockage de l'énergie et son régulateur de charge, ainsi que l'onduleur lorsque les appareils fonctionnent en courant alternatif. Le système photovoltaïque englobe donc l'ensemble du générateur photovoltaïque et des équipements de consommation. [33]

1.3.3 Avantages et inconvénients

1.3.3.1 Avantages

La technologie photovoltaïque offre de nombreux avantages [34-35] :

- Premièrement, elle est extrêmement fiable car elle ne comporte pas de pièces mobiles, ce qui la rend particulièrement adaptée aux régions isolées. C'est pourquoi elle est largement utilisée dans les engins spatiaux ;
- Deuxièmement, la modularité des panneaux solaires permet un montage simple et une adaptation à une variété de besoins énergétiques. Les systèmes photovoltaïques peuvent être dimensionnés pour des applications allant de quelques milliwatts à plusieurs mégawatts ;

- Troisièmement, les coûts de fonctionnement sont très bas en raison de la réduction des besoins en entretien. De plus, ils n'exigent ni combustible, ni transport, ni personnel hautement spécialisé.

Enfin, la technologie photovoltaïque présente des avantages sur le plan environnemental. Les produits finaux sont non polluants, silencieux et n'entraînent aucune perturbation de l'environnement, à l'exception de l'occupation de l'espace pour les grandes installations. En résumé, la technologie photovoltaïque offre fiabilité, modularité, faibles coûts de fonctionnement et avantages environnementaux significatifs.

1.3.3.2 Inconvénients

Cependant, le système photovoltaïque présente également quelques inconvénients. Tout d'abord, la fabrication des modules photovoltaïques nécessite une technologie de pointe et des investissements coûteux. Ensuite, le rendement réel de conversion d'un module photovoltaïque est relativement faible. La limite théorique pour une cellule au silicium cristallin est de 28%, mais dans la pratique, les rendements sont généralement inférieurs. De plus, les générateurs photovoltaïques ne sont compétitifs par rapport aux générateurs Diesel que pour de faibles demandes d'énergie dans des régions isolées.

Enfin, lorsque le stockage de l'énergie électrique est nécessaire, sous forme de batteries par exemple, cela entraîne des coûts supplémentaires pour le système photovoltaïque.

Cependant, il est important de souligner que la fiabilité et les performances du système peuvent être maintenues à condition de choisir judicieusement la batterie et les composants de régulation associés. Malgré ces inconvénients, la technologie photovoltaïque offre toujours de nombreux avantages et continue de se développer pour répondre aux besoins croissants en énergie propre [36].

1.3.4 Différents domaines d'application

Voici quelques domaines d'application de la technologie photovoltaïque [37] :

- **Domaine spatial** : Les systèmes photovoltaïques sont largement utilisés dans l'industrie spatiale pour fournir de l'énergie aux satellites et aux engins spatiaux, où l'accès à des sources d'énergie traditionnelles est limité ;

- **Habitations isolées** : Les installations photovoltaïques sont idéales pour alimenter en électricité les maisons ou les bâtiments situés dans des zones isolées, éloignées du réseau électrique principal ;
- **Industrie isolée** : Dans les zones industrielles éloignées où l'accès à l'électricité peut être limité, les systèmes photovoltaïques peuvent être utilisés pour répondre aux besoins énergétiques des installations industrielles ;
- **Centrales de puissance** : Les grandes centrales photovoltaïques, composées de panneaux solaires interconnectés, peuvent être utilisées pour produire de l'électricité à grande échelle et contribuer à la production d'énergie renouvelable ;
- **Résidences urbaines** : Les systèmes photovoltaïques sont également utilisés dans les zones urbaines pour alimenter en électricité les maisons, les bâtiments résidentiels et les immeubles commerciaux, réduisant ainsi la dépendance aux sources d'énergie traditionnelles ;
- **Biens de consommation** : Les applications photovoltaïques se retrouvent également dans les produits de consommation courante tels que les chargeurs solaires portables, les montres solaires et d'autres dispositifs électroniques alimentés par l'énergie solaire.

Dans tous ces domaines, la technologie photovoltaïque offre une alternative propre et durable pour répondre aux besoins en énergie, en réduisant l'impact environnemental et en favorisant la transition vers des sources d'énergie renouvelable.

1.3.5 Paramètres de cellules photovoltaïques

Lorsqu'une CS est composée d'une jonction PN, l'éclairage de sa surface libre par des photons d'énergie supérieure à la largeur de la bande interdite E_g peut provoquer l'excitation de paires électron-trou dans les régions quasi-neutres P et N, comme illustré dans la figure (1.4). Les électrons et les trous ainsi créés dans les régions P et N se diffusent et atteignent la zone de charge d'espace, où ils sont accélérés par le champ électrique interne et traversent la zone de transition [38-39].

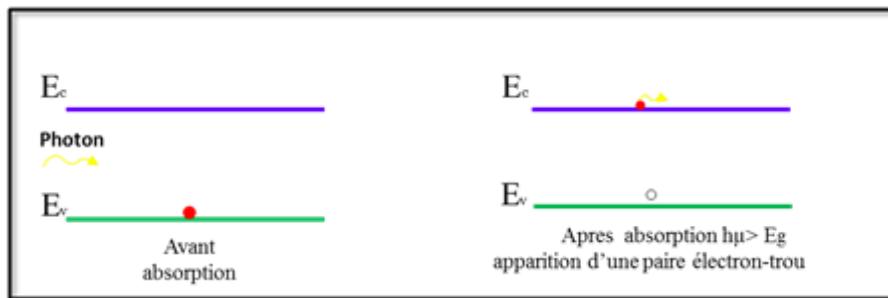


Figure 1.4 : Excitation de paires électrons trou [38].

Dans ce processus, la région N acquiert des électrons et se charge négativement, tandis que la région P accepte des trous et se charge positivement. Si les côtés de la jonction sont connectés à une charge R_c , un courant I circule à travers elle, créant ainsi une différence de potentiel.

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

avec:

I_{ph} : le photocourant;

$I_d(V)$: courant d'obscurité de la diode, permet de décrire la caractéristique courant-tension idéale d'une CS.

Cette caractéristique permet de déterminer quatre grandeurs principales qui définissent le fonctionnement des cellules solaires :

- Le courant de court-circuit I_{cc} , qui correspond au courant lorsque la tension est nulle ;
- La tension en circuit ouvert V_{oc} , qui représente la tension aux bornes de la cellule lorsque le courant est nul ;
- Le facteur de forme FF , qui est déterminé par la forme de la courbe courant-tension et reflète l'efficacité de la cellule ;
- Le rendement de conversion d'énergie η , qui mesure l'efficacité de conversion de l'énergie solaire en électricité.

Cette relation entre ces grandeurs permet de caractériser et d'analyser le fonctionnement des cellules solaires.

1.3.5.1 Caractéristique courant tension et schéma équivalent

La caractéristique courant-tension d'un panneau photovoltaïque ne peut pas être simplement définie comme une source de courant ou de tension sur toute sa plage. En réalité, le panneau photovoltaïque doit être considéré comme une source de puissance. Il existe un point, appelé P_m , où la puissance atteint sa valeur maximale. Il est donc avantageux de se positionner sur ce point afin de tirer le maximum d'énergie et d'exploiter pleinement la puissance nominale du panneau. Certains régulateurs solaires utilisent une technique d'adaptation d'impédance, appelée Maximum Power Point Tracking (MPPT), pour maintenir le système proche de ce point de puissance maximale en tout temps. Cette approche permet d'optimiser l'efficacité de la conversion énergétique [40].

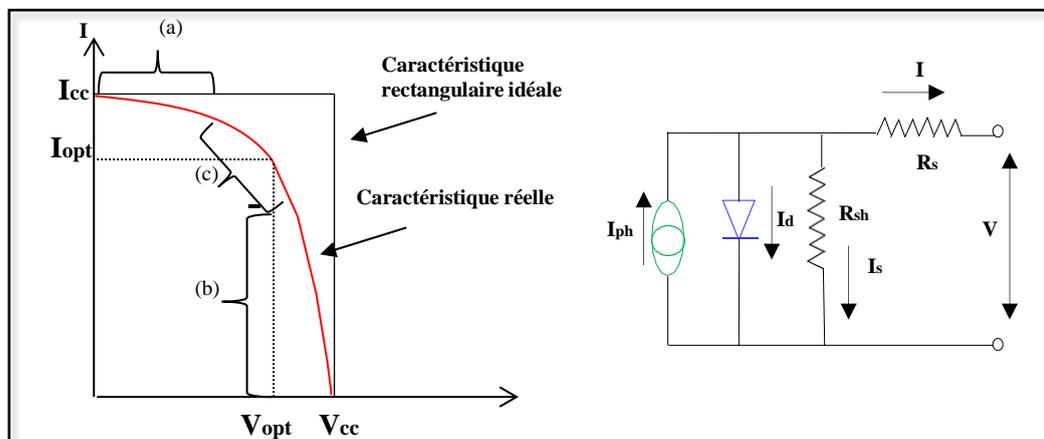


Figure 1.5 : Caractéristique et schéma équivalent d'une cellule photovoltaïque réelle [40].

La figure 1.5 représente la caractéristique réelle et le schéma équivalent d'une cellule photovoltaïque. Les valeurs des différents éléments du schéma équivalent déterminent les performances de la cellule dans des conditions réelles.

La caractéristique de la cellule se divise en trois parties distinctes :

- La zone (a) correspond à une génération de courant I_{cc} proportionnel à l'éclairement ;
- La zone (b) correspond à une génération de tension V_{co} ;
- La zone (c) correspond à une variation rapide de l'impédance interne du générateur.

Le courant de court-circuit, I_{cc} est le courant obtenu lorsque les bornes de la cellule sont court-circuitées (c'est-à-dire en mettant $V = 0$ dans le schéma équivalent). Il augmente de

manière linéaire avec l'intensité de l'éclairage, et dépend de la surface éclairée, de la longueur d'onde du rayonnement, de la mobilité des porteurs et de la température.

1.3.5.2 Tension à circuit ouvert V_{co}

La tension à circuit ouvert est la tension obtenue lorsque le courant traversant la cellule est nul. Sa valeur dépend de la barrière d'énergie et de la résistance shunt. Elle diminue avec l'augmentation de la température et ne varie que légèrement avec l'intensité lumineuse [41].

$$V_{co} = \frac{KT}{e} \ln \left(\frac{I_{cc}}{I_s} + 1 \right) \quad (1.4)$$

1.3.5.3 Facteur de Forme FF

La puissance délivrée par une cellule photovoltaïque à un circuit externe dépend de la résistance de charge connectée aux bornes de la cellule. Cette puissance atteint son maximum, noté P_{max} , lorsque la cellule fonctionne à un point spécifique P_m (I_m , V_m) de la courbe courant-tension (avec des courants compris entre 0 et I_{cc} et une tension comprise entre 0 et V_{co}). Ce point PM est déterminé en ajustant la valeur de la résistance de charge de sorte que l'aire du rectangle formé par les axes Ox, Oy et les droites $x = I_m$ et $y = V_m$ soit maximisée.

Le terme "facteur de forme" (fill factor) est utilisé en référence à la représentation graphique de cette courbe. Il est défini par la relation (1.5) [42] :

$$FF = \frac{P_m}{V_{co} * I_{cc}} = \frac{V_m * I_m}{V_{co} * I_{cc}} \quad (1.5)$$

Le rectangle représente la puissance maximale fournie à la charge.

1.3.5.4 Rendement de conversion η

Le rendement, noté η (efficacité), des cellules photovoltaïques se réfère à l'efficacité de conversion en puissance. Il est calculé en divisant la puissance maximale fournie par la cellule par la puissance lumineuse incidente, notée P_{in} .

$$\eta = \frac{P_m}{P_{in}} = \frac{FF * V_{co} * I_{cc}}{P_{in}} \quad (1.6)$$

1.4 Les semi- conducteurs

1.4.1 Généralités sur les semi-conducteurs

Les matériaux semi-conducteurs se situent généralement entre les conducteurs et les isolants en termes de résistivité, avec une plage d'environ 10^{-3} à $10^4 \Omega\text{-cm}$ (ou plus).

Dans les semi-conducteurs, l'écart d'énergie (gap) est relativement faible, ce qui permet aux porteurs de charge de passer dans la bande de conduction simplement grâce à leur énergie d'agitation thermique. Ainsi, les semi-conducteurs, en tant que mauvais conducteurs ou mauvais isolants, présentent une conductivité qui augmente avec la température [43].

Le Silicium est l'un des matériaux semi-conducteurs les plus couramment utilisés, appartenant au groupe IV. Il est largement utilisé en raison de son faible coût, de sa grande disponibilité et de sa bonne conductivité thermique. Il joue un rôle essentiel dans la réalisation de circuits intégrés et représente la technologie la plus mature. De plus, la majorité des cellules solaires sont basées sur le Silicium. Cependant, ses propriétés présentent certaines limites, telles que des mobilités de porteurs relativement faibles et des transitions électroniques indirectes au seuil d'absorption optique [44].

1.4.2 Le dopage

Le dopage d'un matériau semi-conducteur pur permet d'introduire des charges supplémentaires qui améliorent sa conductivité. Prenons l'exemple du silicium, qui a quatre électrons dans sa couche externe et forme des liaisons avec quatre autres atomes de silicium. À l'état pur, le silicium intrinsèque présente une faible photoconductivité. En dopant le silicium avec des atomes étrangers tels que le phosphore, qui possèdent cinq électrons dans leur couche externe, un électron par atome de phosphore ne pourra pas se lier aux atomes de silicium voisins. Cela entraîne un excès de charges négatives dans le cristal (voir Figure 1.6.a). Ainsi, le matériau devient potentiellement "donneur" d'électrons, favorisant la conduction électrique, et le silicium dopé est alors qualifié de type n [45].

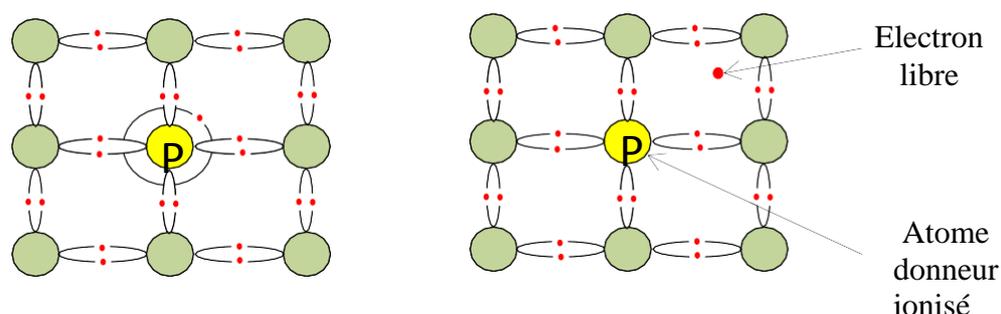


Figure 1.6 (a) : Silicium de type n [45].

En appliquant le même principe de dopage, le silicium peut également être dopé avec du bore, qui possède uniquement trois électrons dans sa couche externe.

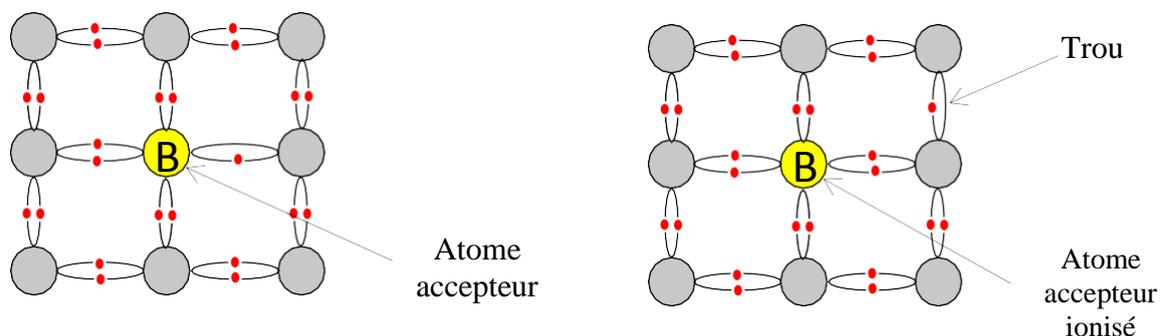


Figure 1.6 (b) : Silicium de type p [45].

En introduisant du bore dans la bande de valence du silicium, on observe la création d'un surplus de trous, correspondant à des charges positives. Cela s'explique par le fait que chaque atome de bore ne possède qu'un électron dans sa couche externe, ce qui laisse un déficit d'un électron pour compléter les quatre électrons du silicium (Figure 1.6.b). Par conséquent, le matériau se comporte comme un "accepteur" d'électrons. Ce type de silicium dopé est appelé silicium de type p [45].

1.4.3 Les bandes d'énergies

Les électrons présents dans la couche de valence, la plus éloignée du noyau, sont impliqués dans les liaisons covalentes et peuvent se comporter en tant que porteurs de charge sous l'effet de l'agitation thermique.

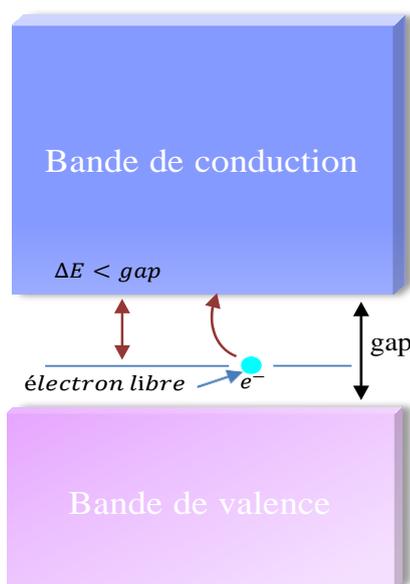


Figure 1.7 : Diagramme de bandes d'énergies des matériaux semi-conducteurs [46].

Le diagramme énergétique des semi-conducteurs se compose de deux bandes distinctes, la bande de conduction (BC) et la bande de valence (BV), séparées par une bande interdite ou "gap". Pour qu'un électron puisse passer d'une bande à l'autre, il doit acquérir une certaine quantité d'énergie, que ce soit par le biais de l'énergie thermique, de photons, etc. [46]. La figure 1.7 illustre le diagramme de bandes d'énergie pour les matériaux semi-conducteurs. Lorsque la bande interdite (gap) d'un matériau est très large, l'énergie thermique disponible à température ambiante n'est pas suffisante pour exciter un nombre significatif d'électrons de la BV vers la BC. Dans ce cas, le matériau se comporte comme un isolant. Cependant, lorsque le gap diminue, l'agitation thermique peut exciter un nombre d'électrons suffisant pour les faire passer dans la BC, ce qui confère au matériau une conductivité qui, bien qu'elle ne soit pas comparable à celle des métaux, peut devenir significative. On qualifie alors ce matériau de semi-conducteur.

1.4.3.1 L'énergie de la bande interdite

L'énergie de bande interdite (E_g) représente l'énergie nécessaire pour permettre à un électron de passer de la BV à la BC. Elle peut également être définie comme la différence d'énergie entre la bande de conduction et la bande de valence. Le type de bande interdite joue un rôle crucial dans l'interaction entre le semi-conducteur et le rayonnement électromagnétique, ainsi que dans le fonctionnement des composants optoélectroniques.

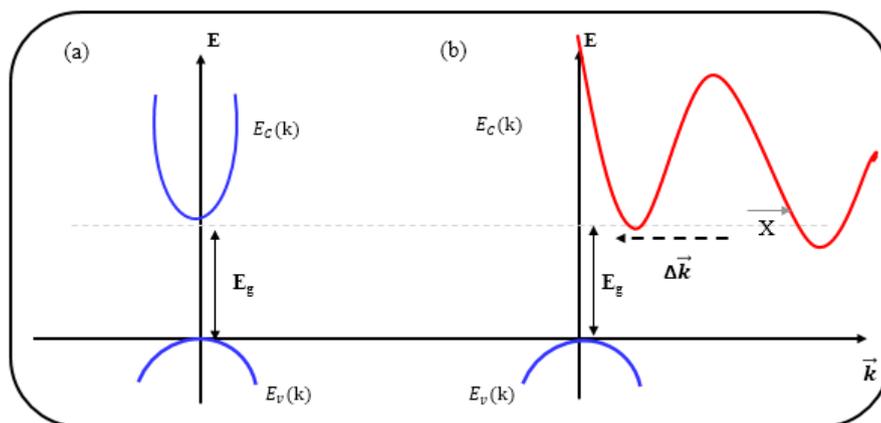


Figure 1.8 : Gap direct (a) et indirect (b) où \vec{k} est le vecteur d'onde associé à un électron [46].

Il existe deux types de bandes interdites (comme illustré dans la figure 1.8) ce qui classe les semi-conducteurs en deux catégories : les bandes interdites directes et les bandes interdites indirectes. Les semi-conducteurs à bande interdite directe ont leur minimum de bande de

conduction et leur maximum de la bande de valence situés au même point de l'espace k, tandis que les semi-conducteurs à bande interdite indirecte ont ces extrema positionnés à des points différents de l'espace k [46-47].

1.4.4 La Jonction PN

1.4.4.1 Semi-conducteur Intrinsèque

Un semi-conducteur intrinsèque est un matériau pur qui ne contient aucun défaut physique ou chimique, c'est-à-dire qu'il ne présente aucune impureté qui pourrait modifier la densité des porteurs. Les électrons présents dans la bande de conduction ne peuvent provenir que de l'excitation thermique des électrons présents dans la bande de valence [48]. Dans un semi-conducteur intrinsèque, les électrons et les trous existent toujours en paires, ce qui signifie que la densité des électrons (n) est égale à la densité des trous (p) et est également égale à la densité intrinsèque (n_i).

Les expressions suivantes décrivent la densité intrinsèque des porteurs et le niveau de Fermi intrinsèque :

- La densité intrinsèque des électrons (n_i) est donnée par l'expression :

$$n_i = N_C \exp\left(\frac{-E_C + E_F}{KT}\right) \quad (1.7)$$

Où N_C est la densité effective d'état des électrons, E_C est l'énergie de la bande de conduction, E_F est le niveau de Fermi intrinsèque, K est la constante de Boltzmann et T est la température en degrés Kelvin.

- La densité intrinsèque des trous (P_i) est donnée par l'expression :

$$P_i = N_V \exp\left(\frac{E_V - E_F}{KT}\right) \quad (1.8)$$

Où N_V est la densité effective d'état des trous, E_V est l'énergie de la bande de valence, E_F est le niveau de Fermi intrinsèque, K est la constante de Boltzmann et T est la température en degrés Kelvin.

- Le niveau de Fermi intrinsèque (E_F) est déterminé par l'équation :

$$E_F = \frac{1}{2}(E_C + E_V) + \frac{3}{4}KT \cdot \log\left(\frac{m_h^*}{m_c^*}\right) \quad (1.9)$$

Où

E_C : Energie de la bande de conduction ;

E_V : Energie de la bande de valence ;

E_g : Energie de la bande interdite (le gap) ;

m_c^* : masses effectives des électrons ;

m_h^* : masses effectives des trous.

1.4.4.2 Semi-conducteur Extrinsèque

Les semi-conducteurs extrinsèques ont une utilité limitée en tant que tels. Leur principale utilisation réside dans leur capacité à servir de base pour les semi-conducteurs dopés. En dopant ces matériaux, c'est-à-dire en y introduisant des impuretés, on peut modifier leur comportement, en particulier leurs propriétés électriques. On distingue deux types de semi-conducteurs extrinsèques [19].

❖ Semi-conducteur dopé de type N

Un semi-conducteur dopé de type N est un matériau dans lequel la densité d'électrons est plus élevée que celle des trous. On introduit généralement du Phosphore, de l'Arsenic ou de l'Antimoine à ces semi-conducteurs. Prenons l'exemple du Silicium qui possède 4 électrons dans sa couche externe, et introduisons de l'Arsenic qui a 5 électrons dans sa couche externe. À des températures supérieures à 0°K , les atomes d'Arsenic sont ionisés, ce qui signifie que les électrons du niveau donneur sont transférés vers la bande de conduction. Cela permet d'augmenter la densité d'électrons dans le matériau dopé. Ainsi, cet élément agit comme un générateur d'électrons, et la densité de porteurs libres dans le semi-conducteur, lorsque tous les donneurs sont ionisés, peut être exprimée comme suit :

$$n = n_0 + N_D \quad (1.10)$$

N_D : La concentration des atomes donneurs ;

n_0 : La densité intrinsèque des électrons à l'équilibre thermodynamique.

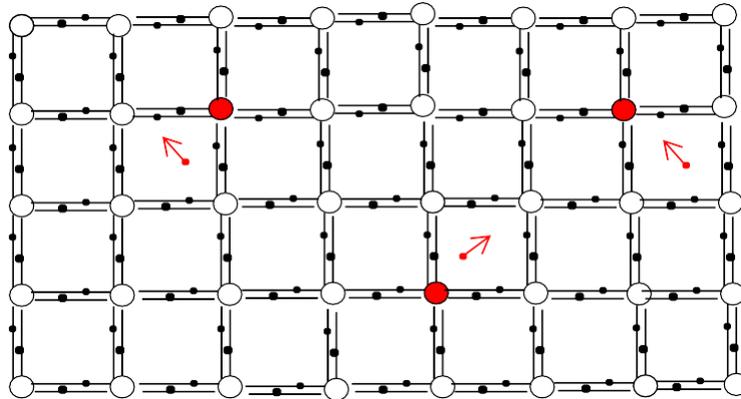


Figure 1.9 : cristal de silicium de type N dopé par les atomes d'arsenic [19].

❖ Semi-conducteur dopé de type P

Ainsi, un semi-conducteur dopé de type P est un semi-conducteur dans lequel la densité de trous est supérieure à celle des électrons. Généralement, on y introduit du Bore, de l'Aluminium ou du Gallium. Prenons l'exemple du Silicium (qui possède 4 électrons dans sa couche externe) dans lequel on introduit du Bore (qui possède 3 électrons dans sa couche externe). À des températures supérieures à 0 °K, les atomes de Bore sont ionisés, ce qui entraîne le passage d'un électron de la bande de valence vers le niveau accepteur. Ainsi, le Bore joue le rôle d'un générateur de trous, et la densité de porteurs libres du semi-conducteur devient significative lorsque tous les atomes accepteurs sont ionisés.

$$p = p_0 + N_A \quad (1.11)$$

La variable N représente la concentration des atomes accepteurs, tandis que p_0 fait référence à la densité intrinsèque des trous à l'équilibre thermodynamique.

La zone de séparation entre deux matériaux semi-conducteurs de dopages différents est appelée jonction PN. Si les deux matériaux ont le même gap, la jonction est qualifiée d'homojonction. Si les gaps sont différents, on parle alors d'hétérojonction. Avant le contact, un semi-conducteur de type N est principalement peuplé d'électrons (dopé par exemple avec du Phosphore "P"), tandis

qu'un semi- conducteur de type P est principalement peuplé de trous (dopé par exemple avec du Bore "B"), comme illustré dans la Figure 1.10.

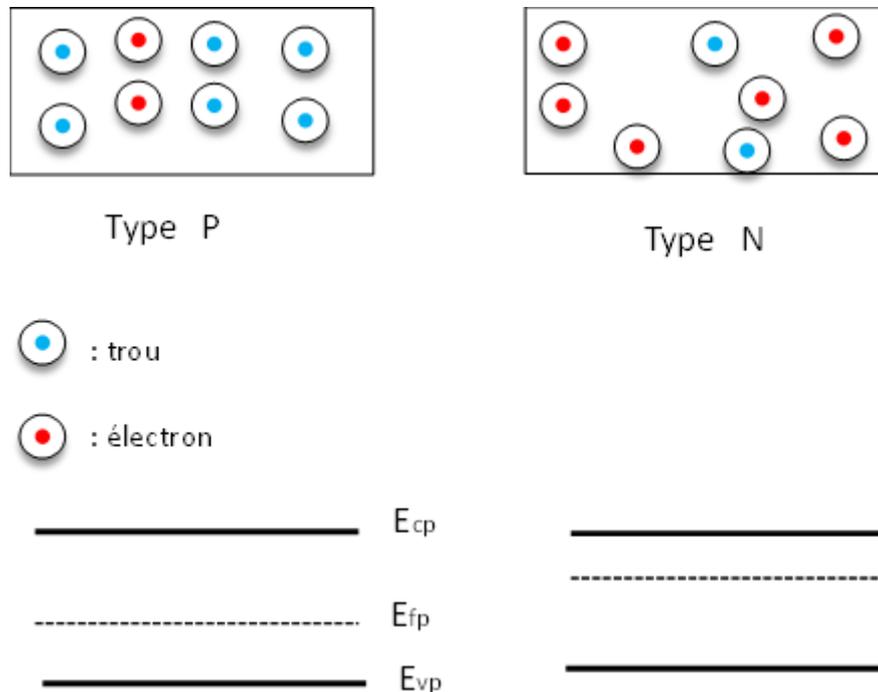


Figure 1.10 : semi-conducteur de type N et P dopé de bore [19].

Lorsque ces deux matériaux sont mis en contact, les électrons du semi-conducteur de type N se diffusent vers le semi-conducteur de type P, laissant derrière eux des atomes donneurs ionisés positivement (DN). De même, les trous du semi-conducteur de type P se diffusent vers le semi-conducteur de type N, créant des atomes accepteurs ionisés négativement (AN). Ce processus se poursuit jusqu'à ce que les niveaux de Fermi des deux types de semi-conducteurs s'alignent. La diffusion des porteurs de charge dans les deux sens crée une région dépeuplée près de la jonction, appelée Zone de Charge d'Espace (ZCE), qui est composée d'ions positifs d'un côté et d'ions négatifs de l'autre côté.

En conséquence, un champ électrique se forme dans cette région, dirigé de la zone de charge positive vers la zone de charge négative, et il est lié à la tension de diffusion V_d par un gradient. Lorsque la polarisation est directe (c'est-à-dire lorsque la zone P est polarisée positivement). En diminuant la barrière de potentiel formée par la zone de déplétion à $q(V_d)$, l'épaisseur de la zone de charge d'espace est réduite, ce qui facilite la diffusion des porteurs de charges

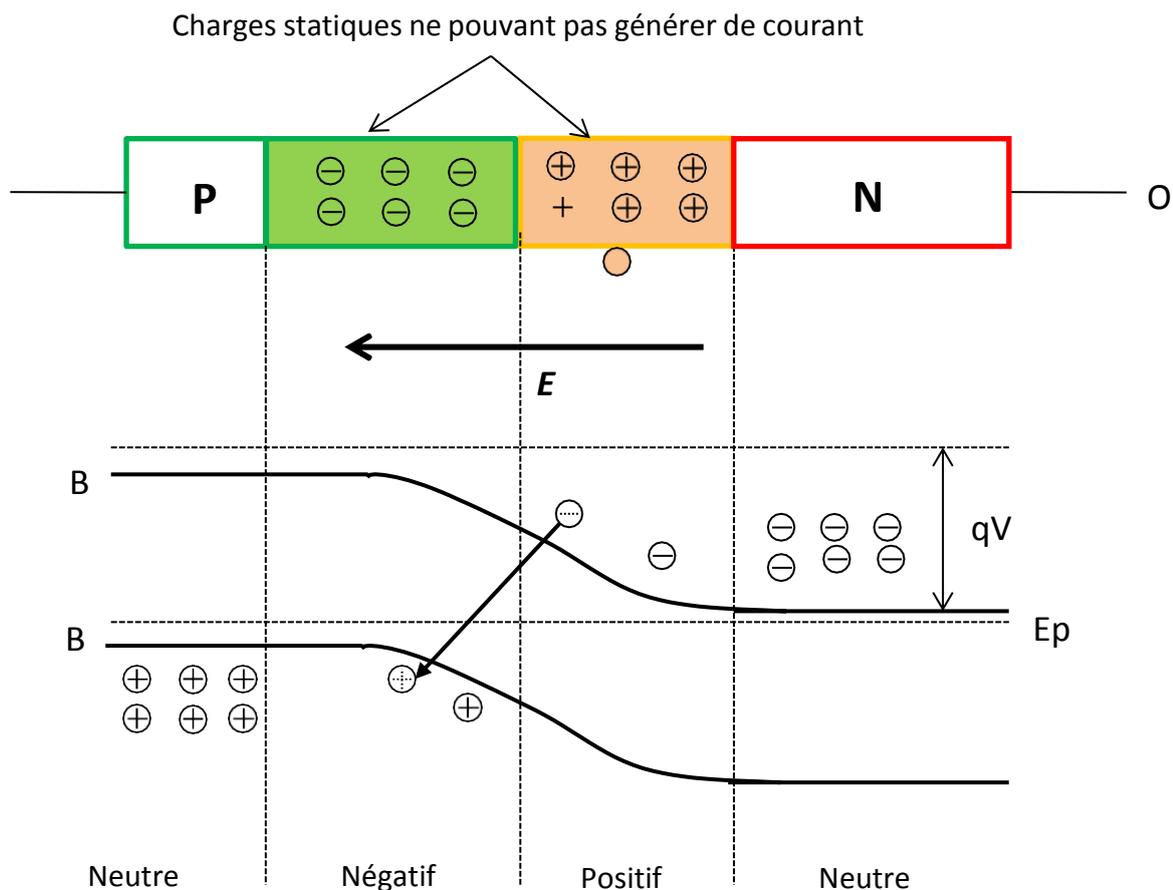


Figure 1.11 : Diagramme énergétique d'une fonction PN à l'équilibre thermodynamique (Électrons et trous) dans les deux sens [50].

Dans ce cas, le courant se manifeste sous la forme d'un courant de porteurs majoritaires. Il est décrit de manière exponentielle par l'équation suivante :

$$J_d = J_0 \left(\exp\left(\frac{q(V)}{KT}\right) - 1 \right) \quad (1.12)$$

Avec

J_0 : La densité de courant de saturation de la jonction PN ;

J_d : La densité de courant directe des porteurs de charge ;

K : La constante de Boltzmann.

En polarisation inverse, le courant qui circule à travers la jonction PN est un courant des porteurs minoritaires, et il est très faible. Ce courant est représenté par la densité de courant inverse des porteurs de charge minoritaires, notée J_0 .

$$J_i \approx -J_0 \quad (1.13)$$

1.5 Conclusion

En conclusion, l'énergie solaire, exploitée à travers l'effet photovoltaïque grâce aux semi-conducteurs, représente une voie prometteuse vers un avenir énergétique durable et propre. L'utilisation de cette technologie a ouvert la porte à une source d'énergie renouvelable inépuisable, accessible et respectueuse de l'environnement.

Les panneaux solaires, composés de semi-conducteurs comme le silicium, captent la lumière du soleil et la convertissent directement en électricité, sans produire de pollution ni d'émissions nocives. Cette méthode offre une solution viable pour réduire notre dépendance aux combustibles fossiles, contribuant ainsi à atténuer le changement climatique et à préserver notre planète.

L'efficacité des cellules solaires ne cesse de s'améliorer grâce aux progrès constants dans la recherche et le développement des semi-conducteurs. Les innovations technologiques visent à rendre l'énergie solaire plus abordable, plus efficace et plus adaptable à différents environnements, ouvrant ainsi la voie à une adoption plus large à l'échelle mondiale.

Cependant, malgré ses nombreux avantages, des défis persistent, notamment en ce qui concerne le stockage de l'énergie solaire pour une utilisation lors des périodes sans soleil et la nécessité de solutions d'intégration plus efficaces dans les réseaux électriques existants.

En somme, l'énergie solaire exploitée à travers l'effet photovoltaïque grâce aux semi-conducteurs représente une réponse essentielle et porteuse d'espoir pour répondre aux besoins énergétiques mondiaux tout en préservant notre environnement pour les générations futures. Son développement continu et son adoption croissante sont cruciaux pour une transition énergétique réussie vers un avenir durable.

2.1 Introduction

Actuellement, les domaines de la recherche sont fortement attirés par les nanosciences. À l'intérieur du vaste champ des nanotechnologies, les NFs émergent en tant qu'acteurs majeurs, offrant des perspectives hautement prometteuses. Ces NFs jouent un rôle crucial dans la création de nouveaux composants électroniques. Cela s'explique par leurs caractéristiques exceptionnelles en matière de confinement électronique et optique. Des exemples de ces caractéristiques notables incluent les transistors à effet de champ, les batteries au lithium, les photorésistances et les cellules mémoires. En disposant ces NFs en un réseau, il devient possible d'imiter certains aspects des fonctions neurologiques du cerveau humain. Cette approche ouvre même la voie à la conception d'ordinateurs extrêmement performants, potentiellement dix fois plus rapides que les systèmes actuels.

Les avancées dans l'étude des NFs ont continués, tant dans le domaine de la nanostructuration et des procédés de fabrication que dans leurs applications extrêmement prometteuses

Au cours de ce chapitre, nous allons spécifiquement traiter la technologie des cellules solaires à bande intermédiaire, en se concentrant spécifiquement sur les cellules solaires à bande intermédiaire utilisant des nanostructures de basse dimensionnalité. Nous examinerons en détail comment ces nanostructures peuvent surpasser les limites des cellules solaires classiques. Nous aborderons également les aspects généraux des nanostructures à faible dimensionnalité, en mettant l'accent sur les propriétés et les méthodes de fabrication des nanofils. Dans la première section, nous explorerons les propriétés électroniques et optiques de diverses nanostructures à faible dimensionnalité telles que les puits quantiques (PQs), et les fils quantiques (FQs) (ou nanofils). Enfin, nous décrirons la méthode ainsi que les techniques expérimentales utilisées pour fabriquer ces nanofils.

2.2 Les cellules solaires à bande intermédiaire (CS-BI)

La cellule solaire à bande intermédiaire (CSBI) présente la capacité de surpasser la limite théorique d'efficacité de Shockley-Queisser de 30% [49] pour une cellule solaire à simple jonction, grâce à une exploitation plus efficace du spectre solaire. Comme évoqué précédemment, l'une des principales pertes dans les cellules solaires à bande unique concerne la déperdition de photons sous la bande interdite. Étant donné que la région infrarouge du spectre solaire contient une quantité significative de photons de faible énergie, exploiter ces

photons devient crucial pour améliorer l'efficacité des cellules solaires. La figure 2.1 illustre le principe de la CSBI. En introduisant une bande intermédiaire (BI) à l'intérieur de la bande interdite du semi-conducteur, cette configuration permet l'absorption des photons présents sous la bande interdite. En plus de l'absorption conventionnelle des photons par les transitions électroniques entre la bande de valence (BV) et la bande de conduction (BC), un processus d'absorption à deux photons se produit, impliquant des transitions entre la BV et la BI, puis entre la BI et la BC. Chaque bande (E_{FV} , E_{FC} , E_{FI}) est associée à un niveau quasi de Fermi, étant donné que la relaxation des porteurs entre ces bandes est plus lente que celle à l'intérieur des bandes [50].

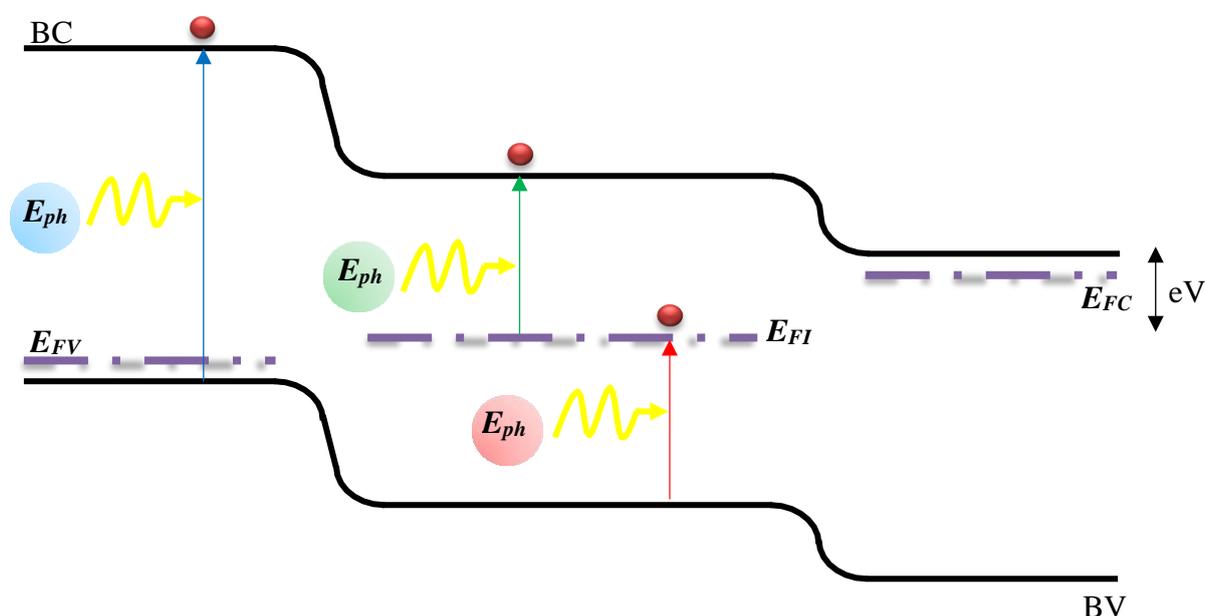


Figure 2.1 : Processus d'absorption de photons de faible énergie dans les cellules solaires à bande intermédiaire [50].

Pour accroître l'efficacité grâce au concept CSBI, il est nécessaire d'augmenter le photocourant en absorbant davantage de photons sans pour autant diminuer la tension de sortie. Les niveaux quasi-fermis individuels des bandes d'énergie sont cruciaux pour atteindre cet objectif. La tension obtenue à partir du CSBI résulte de la différence entre les niveaux de fermis pour les électrons (E_{FC}) dans la BC et les trous (E_{FV}) dans la BV, divisée par la charge électronique.

Le schéma électrique équivalent d'une cellule solaire à bande intermédiaire est présenté dans la figure (2.2). Les deux sources de courant supplémentaires symbolisent l'absorption de photons situés sous la bande interdite, tandis que les deux diodes supplémentaires représentent

de nouveaux chemins de recombinaison des porteurs. Selon les modèles, il est envisagé que, à des intensités lumineuses élevées, les CSBI dépasseront en efficacité les cellules solaires à bande unique. Ceci est dû au fait que, à des densités de courant élevées, le processus de recombinaison de la BC vers la BV (J_{CV}) prédomine par rapport à la recombinaison via la BI (J_{CI} et J_{IV}) [51].

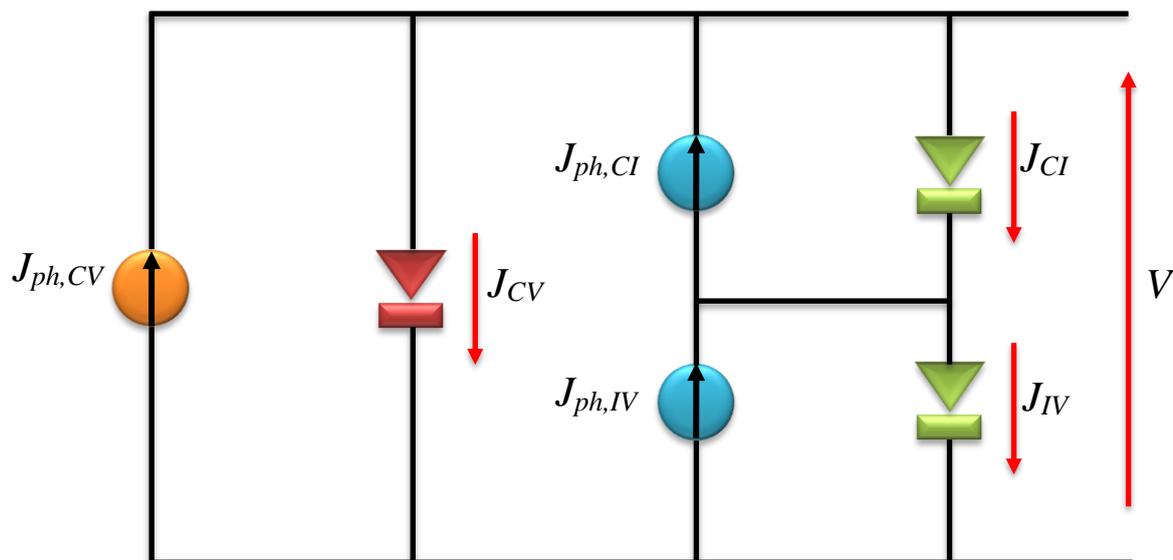


Figure 2.2 : Schéma équivalent d'une cellule solaire utilisant une bande intermédiaire [51].

Comme il a été déjà étudié, les CSMJ (Cellule Solaire Multi-Jonction) et les CSBI (Cellule Solaire à Bande Intermédiaire) sont des approches de troisième génération visant à accroître l'efficacité en captant une plus large partie du spectre solaire. Le circuit équivalent du CSMJ est composé de cellules individuelles (source de courant et diode) connectées en série. Il est pertinent de remarquer que le circuit équivalent du CSBI est également formé de cellules individuelles : deux d'entre elles connectées en série et ensuite connectées en parallèle avec une troisième.

2.3 Les cellules solaires à bande intermédiaire à base de Nanofil

Plusieurs matériaux ont été suggérés pour la conception des CSBI. Parmi ces propositions figurent le $Ti_xGa_{1-x}P$ [52], les semi-conducteurs de type chalcopyrite dopés aux métaux de transition [53], ainsi que les composés II-VI dopés au Cr [54]. Cependant, jusqu'à présent, la méthode la plus prometteuse pour mettre en œuvre les CSBI a été l'exploitation des nanostructures, notamment les Nanofils (Nf_s).

Pour bien appréhender le fonctionnement des cellules solaires à bande intermédiaire basées sur les Nf_s, il est essentiel de commencer par définir les nanostructures à faible dimensionnalité, en se concentrant spécifiquement sur les caractéristiques et les techniques de fabrication des Nf_s.

2.4 Propriétés électroniques des nanostructures de basse dimensionnalité

Dans un matériau semi-conducteur en volume, les électrons et les trous ont la liberté de se déplacer dans les trois dimensions de l'espace. Cependant, lorsque les dimensions d'un matériau sont inférieures à la longueur d'onde de De Broglie, ses propriétés subissent une transformation radicale en raison du confinement des porteurs de charge, ce qui entraîne une quantification des niveaux d'énergie de ces porteurs. Le type de nanostructure formé dépend du degré de confinement des porteurs. La longueur d'onde de De Broglie est calculée par :

$$\lambda_B = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_{c(v)}^* E}} \quad (2.1)$$

avec :

\hbar : Constante de Planck ;

m^* : Masse effective d'électron (trou) ;

E : Energie de l'électron (trou).

Pour que survienne le confinement quantique, l'énergie de l'électron (ou du trou) E doit être supérieure à l'énergie thermique $k_B T$, et la longueur d'onde associée à cette énergie est appelée la longueur d'onde de de Broglie thermique [55] :

$$\lambda_{Bth} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m^* k_B T}} \quad (2.2)$$

La densité d'états représente le nombre d'états accessibles pour un électron (ou un trou) dans une plage d'énergie donnée, et elle varie en fonction du degré de confinement des porteurs de charge dans un système donné [56]. Dans un semi-conducteur massif en trois dimensions où il n'y a pas de confinement des porteurs, on observe clairement que la densité d'états prend une forme continue, comme illustré dans la figure (2.3.b) [57].

$$\rho(E) \approx \sqrt{E - E_c} \quad (2.3)$$

Un puits quantique PQ peut être créé en insérant un matériau semi-conducteur de petit gap E_{gA} (désigné par 'A') entre deux matériaux semi-conducteurs 'B' de grand gap E_{gB} , à condition que l'épaisseur du matériau 'A' soit suffisamment réduite, comme indiqué dans la figure (2.4.a).

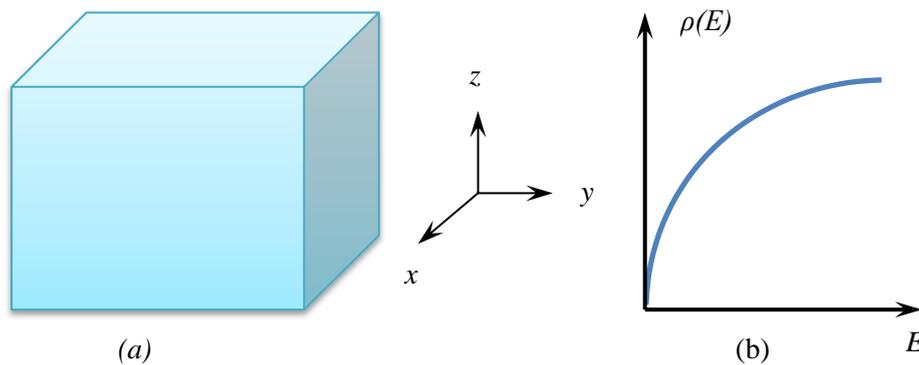


Figure 2.3 : (a) structure d'un semi-conducteur massif, (b) évolution de la densité d'états en fonction d'énergie dans un semi-conducteur massif [58-59].

Dans un puits quantique 2D, les porteurs de charge peuvent se déplacer dans deux dimensions, ce qui les confine dans une couche bidimensionnelle. L'énergie est quantifiée dans la direction de confinement (par exemple, la direction y). La densité d'états est représentée dans la figure (2.4.c) sous forme d'escaliers [57].

$$\rho(E) \approx \sum_{n_y} \theta \left(E - (E_g + E_{n_y}) \right) \quad (2.4)$$

avec :

θ : Fonction de Heaviside ;

E_{n_y} : Energie des niveaux discrets n suivant y.

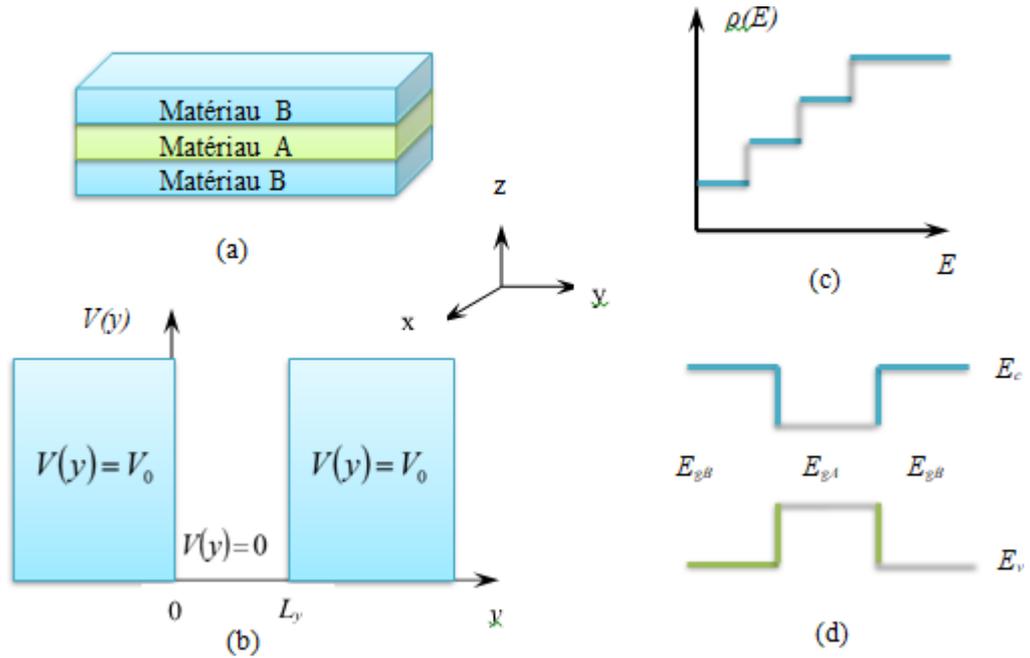


Figure 2.4 : (a) Configuration d'un puits quantique, (b) Potentiel fini dans la configuration du puits quantique, (c) Variation de la densité d'états en relation avec l'énergie dans un puits quantique, (d) Schéma d'énergie d'une configuration de puits quantique [58].

Le façonnage de la structure du puits quantique peut se réaliser par différents procédés tels que la photolithographie, la lithographie par faisceau électronique, ou encore l'utilisation d'un faisceau d'ions concentré suivant l'axe de croissance, qui dans ce cas précis est l'axe z . Ces méthodes permettent de laisser une partie du puits quantique non altérée, donnant ainsi naissance à ce qu'on appelle le fil quantique (FQ). Dans un fil quantique 1D, les porteurs de charge ont la possibilité de se déplacer dans une seule direction tout en étant confinés dans les deux autres dimensions spatiales. L'énergie subit une quantification selon ces deux directions de confinement (imaginons les directions y et z). La densité d'états est illustrée dans la figure (2.5.b), et dans ce cas précis, elle adopte la forme suivante [57].

$$\rho(E) \approx \sum_{n_y, n_z} \frac{1}{\sqrt{E - (E_g + E_{n_y} + E_{n_z})}} \quad (2.5)$$

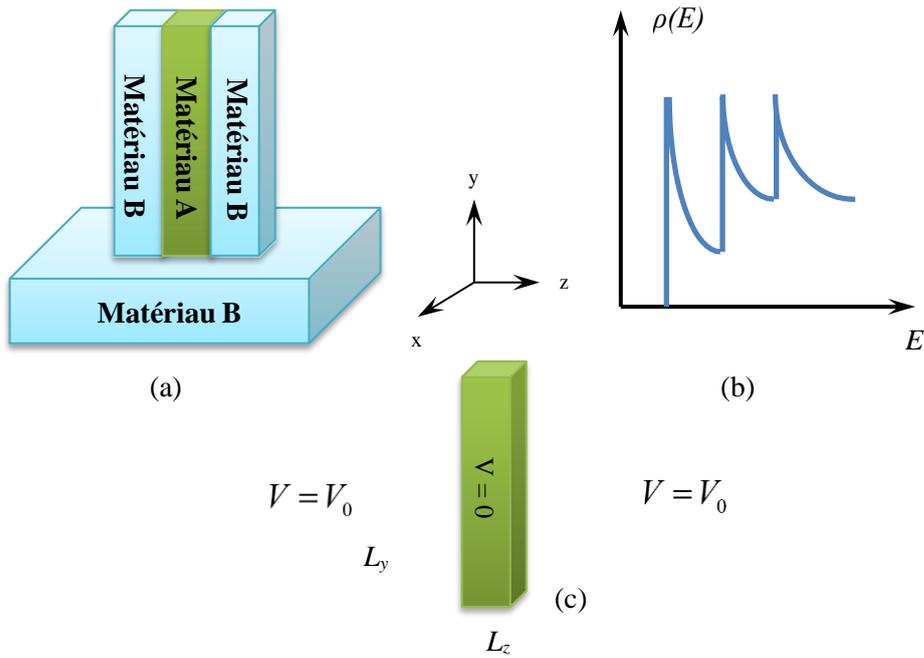


Figure 2.5 : (a) Configuration d'un fil quantique, (b) Variation de la densité d'états en fonction de l'énergie dans un fil quantique, (c) Profil de potentiel dans la structure du fil quantique [58-59].

En gravant la même structure de puits quantique, il est possible de former des piliers, comme illustré dans la figure (2.6.a). Cette nouvelle configuration prend le nom de boîte quantique (BQ). Dans une boîte quantique zéro dimension (0D), les porteurs de charge sont confinés dans les trois dimensions de l'espace, ce qui entraîne l'émergence de niveaux d'énergie discrets, similaires aux orbitales atomiques dans un cristal. La densité d'états pour une boîte quantique carrée est exposée dans la figure (2.6.b) et se présente sous la forme d'une série de fonctions de Dirac [57].

$$\rho(E) \approx \sum_{n_x, n_y, n_z} \delta\left(E - \left(E_g + E_{n_x} + E_{n_y} + E_{n_z}\right)\right) \quad (2.6)$$

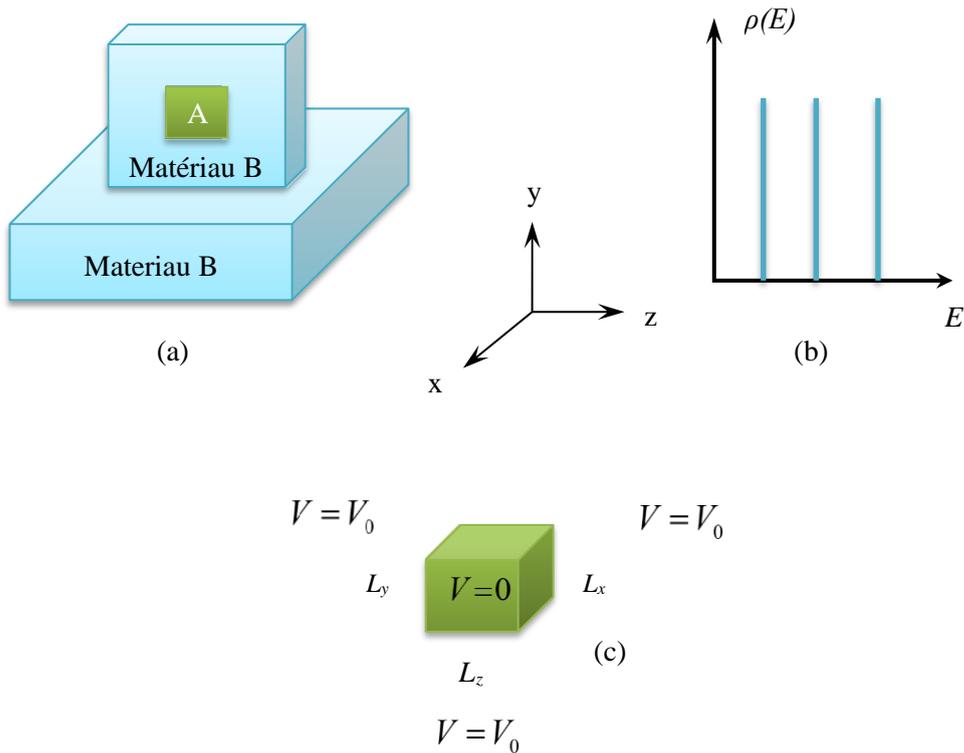


Figure 2.6 : (a) Configuration d'une boîte quantique, (b) Variation de la densité d'états en fonction de l'énergie dans une boîte quantique, (c) Profil de potentiel dans la structure de la boîte quantique [58-59].

Étant donné que les dimensions spatiales de ces nanostructures atteignent l'échelle atomique, l'utilisation de la mécanique quantique, décrite par l'équation de Schrödinger, est nécessaire pour étudier et analyser les propriétés de ces nanostructures :

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2 \psi(r)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi(r)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi(r)}{\partial z^2} \right) + V(r)\psi(r) = E\psi(r), \quad r = x, y, z \quad (2.7)$$

avec :

m^* : masse effective de l'électron (trou) ;

$V(r)$: potentiel spatial ;

$\psi(r)$: fonction d'onde qui décrit le comportement de l'électron (trou) dans le système.

Dans un puits quantique (une structure en 2D), les porteurs de charge sont confinés dans une fine plaque d'épaisseur L_y le long de l'axe y , délimitée par une barrière de potentiel

où V_0 représente la discontinuité dans la bande de conduction, tel qu'illustré dans la figure (2.4.b).

Ces porteurs de charge ne peuvent pas franchir la barrière de potentiel lorsque $E < V_0$ et demeurent à l'intérieur du puits, dans la plage $0 \leq y \leq L_y$, sans perdre d'énergie lorsqu'ils entrent en collision avec les parois du puits quantique. Le potentiel du puits est décrit dans ce cas par :

$$V(y) = \begin{cases} 0 & 0 < y < L_y \\ V_0 & y \leq 0 \text{ ou } y \geq L_y \end{cases} \quad (2.8)$$

Dans la direction de confinement y , l'équation de Schrödinger s'exprime comme suit :

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2 \psi(y)}{\partial y^2} \right) + V(y)\psi(y) = E\psi(y) \quad (2.9)$$

Dans le cas du puits quantique où $V(y) = 0$, l'équation de Schrödinger est simplifiée et se réduit à :

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2 \psi(y)}{\partial y^2} \right) = E\psi(y) \quad (2.10)$$

La solution envisageable de l'équation de Schrödinger dans cette situation est [59]:

$$\psi(y) = A \sin(k_y y) + B \cos(k_y y) \quad (2.11)$$

Avec A et B représentant des constantes qui dépendent de la largeur du puits L_y et qui doivent être déterminées en fonction des conditions limites, tandis que k_y est une fonction de l'énergie E en relation avec la direction de confinement y :

$$k_y = \frac{\sqrt{2m^* E_{n_y}}}{\hbar} \quad (2.12)$$

avec :

n_y : nombre quantique principal selon la direction y .

En dehors du puits quantique, la solution de l'équation de Schrödinger est formulée comme suit [60] :

$$\psi (y) = W \sin (\kappa_y y) + Z \cos (\kappa_y y) \quad (2.13)$$

avec :

$$\kappa_y = \frac{\sqrt{2m^* (V_0 - E_{n_y})}}{\hbar} \quad (2.14)$$

Le potentiel $V(r)$ résulte de la combinaison du potentiel de confinement dans le plan (yz) et du potentiel le long de l'axe de déplacement des porteurs x , dans un fil quantique (structure 1D) [60].

$$V (r) = V^1 (x) + V^{(2,3)} (y, z) \quad (2.15)$$

La fonction d'onde est obtenue en multipliant les deux composants, et elle s'exprime de la manière suivante [59] :

$$\psi (r) = \psi^{(1)} (x) \cdot \psi^{(2,3)} (y, z) \quad (2.16)$$

On insère ces deux équations dans l'équation (2.7) de Schrödinger, cette dernière se transforme en :

$$\left\{ \frac{-\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V^{(1)}(x) + V^{(2,3)}(y, z) \right\} \cdot \psi^{(1)}(x) \cdot \psi^{(2,3)}(y, z) = E \psi^{(1)}(x) \cdot \psi^{(2,3)}(y, z) \quad (2.17)$$

En comparant, on peut déduire deux équations à partir de l'équation (2.17) :

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2 \psi^{(1)}(x)}{\partial x^2} \right) = E^{(1)} \psi^{(1)}(x) \quad (2.18)$$

$$\left\{ \frac{-\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V^{(2,3)}(y, z) \right\} \cdot \psi^{(2,3)}(y, z) = E^{(2,3)} \cdot \psi^{(2,3)}(y, z) \quad (2.19)$$

La solution de l'équation (2.18) se présente sous la forme d'une onde plane, comme suit :

$$\psi^{(1)} (x) \approx \exp(j k_x x) \quad (2.20)$$

avec :

k_x le moment de l'électron (trou) sur le long de l'axe x .

Ainsi, l'énergie associée est déterminée par la relation de dispersion qui fournit les niveaux d'énergie dans la direction x , où l'électron (ou le trou) peut se déplacer librement :

$$E^{(1)} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} \quad (2.21)$$

Le potentiel dans le plan de confinement (yz) est exprimé par :

$$V^{(2,3)}(y, z) = \begin{cases} 0, & (0 < y < L_y) \cap (0 < z < L_z) \\ V_0, & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (2.22)$$

La fonction d'onde dans le rectangle est exprimée par :

$$\left\{ \frac{-\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \right\} \cdot \psi^{(2,3)}(y, z) = E^{(2,3)} \cdot \psi^{(2,3)}(y, z) \quad (2.23)$$

Aussi, La fonction d'onde dans cette équation peut être découpée sous la forme suivante [30] :

$$\psi^{(2,3)}(y, z) = \psi^{(2)}(y) \cdot \psi^{(3)}(z) \quad (2.24)$$

En utilisant la méthode de séparation de variables, l'énergie superposée devient [30] :

$$E^{(2,3)} = E^{(2)} + E^{(3)} \quad (2.25)$$

En insérant les équations (2.24) et (2.25) dans l'équation (2.23), nous pouvons obtenir les deux équations découpées suivantes :

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2 \psi^{(2)}(y)}{\partial y^2} \right) = E^{(2)} \psi^{(2)}(y) \quad (2.26)$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2 \psi^{(3)}(z)}{\partial z^2} \right) = E^{(3)} \psi^{(3)}(z) \quad (2.27)$$

De manière similaire aux puits quantiques, les fonctions d'onde de quantification pour ce cas dans les directions de confinement y et z sont exprimées respectivement par :

$$\Psi^{(2)}(y) = A \sin(k_y^{(2)} y) + B \cos(k_y^{(2)} y) \quad (2.28)$$

$$\Psi^{(3)}(z) = C \sin(k_z^{(3)} z) + D \cos(k_z^{(3)} z) \quad (2.29)$$

$$k_z = \frac{\sqrt{2m^* E^{(3)} n_z}}{\hbar} \quad (2.30)$$

Résolution de l'équation de Schrödinger dans un Fil Cylindrique :

Pour ce type de fil quantique (nanofil), il est préférable de considérer la symétrie cylindrique; il en résulte donc avantageux, l'utilisation de coordonnées polaires (r, θ). La fonction d'onde Ψ(y, z) peut être écrite en fonction de ces nouvelles variables. L'équation de Schrödinger pour Ψ(r) devient [162]:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}) \quad (2.31)$$

Où l'indice \vec{r} dans le terme d'énergie indique que cette valeur propre est associée au mouvement confiné «en coupe», par opposition au mouvement non confiné sur le long de l'axe du fil.

On appliquant les coordonnées cylindriques on obtient :

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(r, \theta, z) = E \Psi(r, \theta, z) \quad (2.32)$$

On considère la symétrie circulaire, ainsi, après avoir dérivé deux fois les deux membres de la relation $r = \sqrt{y^2 + z^2}$ par rapport à y et z, on obtient [162]:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (2.33)$$

Et donc, après remplacement dans l'équation (2.32) nous aurons :

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \Psi(r, \theta, z) = E \Psi(r, \theta, z) \quad (2.34)$$

Ce qui nous donne l'équation de Schrödinger avec coordonnées cylindriques comme suite :

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) \Psi(r, \theta, z) + \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \Psi(r, \theta, z) + \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \Psi(r, \theta, z) = E \Psi(r, \theta, z) \quad (2.35)$$

Dans une boîte quantique BQ (structure 0D), le confinement des porteurs s'effectue dans les trois directions de l'espace, ce qui signifie que le potentiel est décrit par :

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0, & (0 < y < L_y) \cap (0 < z < L_z) \cap (0 < x < L_x) \\ V_0, & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (2.36)$$

L'équation de Schrödinger 3D dans la boîte quantique s'écrit :

$$\left\{ \frac{-\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \right\} \cdot \Psi(x, y, z) = E \cdot \Psi(x, y, z) \quad (2.37)$$

Les fonctions d'onde de quantification pour ce cas dans les directions de confinement x, y et z peuvent être dissociées de la manière suivante :

$$\psi(x, y, z) = \psi(x) \cdot \psi(y) \cdot \psi(z) \quad (2.38)$$

avec :

$$\left\{ \begin{array}{l} \psi(x) = T \sin(k_x x) + P \cos(k_x x) \\ \psi(y) = A \sin(k_y y) + B \cos(k_y y) \\ \psi(z) = C \sin(k_z z) + D \cos(k_z z) \end{array} \right. \quad (2.39)$$

et :

$$k_z = \frac{\sqrt{2m^* E_{n_x}}}{\hbar} \quad (2.40)$$

Les constantes T et P, A et B, C et D varient en fonction de la largeur de la boîte dans les trois directions de confinement, à savoir L_x, L_y et L_z, respectivement.

2.5 Méthodes de fabrication

Il existe deux principales approches philosophiques pour la fabrication d'objets à l'échelle nanométrique. La première méthode implique la découpe d'un objet plus volumineux en éléments plus petits, ce qui est connu sous le nom d'approche descendante ou top-down. La seconde philosophie se fonde sur l'utilisation de précurseurs moléculaires. Elle démarre au niveau moléculaire et procède par synthèse chimique pour parvenir à la création d'objets à l'échelle nanométrique [61]. Cette approche est appelée approche ascendante ou bottom-up. Les deux techniques seront explorées dans les sections suivantes.

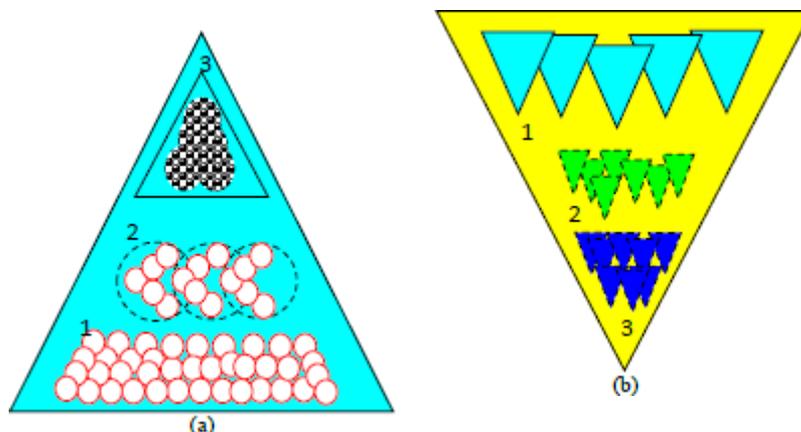


Figure 2.7 : Illustration schématique des techniques bottom-up (a) et top-down (b) [61].

2.5.1 Approche descendante (top-down)

L'essence fondamentale de cette technologie repose sur la gravure nanométrique d'un fil de silicium, débutant directement à partir d'un échantillon de silicium cristallin. Le procédé de fabrication débute par l'application d'une résine sur l'échantillon, agissant comme un masque, dont la configuration peut être altérée par le balayage d'un faisceau d'électrons, une technique connue sous le nom de lithographie par faisceau d'électrons (lithographie e-beam). Cette étape de balayage électronique dans des zones prédéfinies de l'échantillon est appelée exposition. Par la suite, une étape de développement de la résine est entreprise pour soit éliminer la partie de la résine exposée à la lumière, soit au contraire éliminer la partie qui n'a pas été exposée, en fonction de la nature de la résine utilisée.

La phase finale consiste en une gravure plasma ou chimique, qui permet finalement d'excaver le silicium qui n'est plus protégé par la résine. Les fils qui sont produits peuvent adopter une orientation verticale grâce à une gravure directe à partir d'une masse de silicium. Cependant, la longueur de ces fils est restreinte par la qualité du processus de gravure. Les côtés gravés ne parviennent à maintenir une orientation véritablement verticale que sur des distances inférieures à 2-3 μm . Pour générer des NFs disposés horizontalement, il est possible de partir de couches bidimensionnelles de SOI (silicium sur isolant) comme illustré dans la figure (2.8). Les diamètres qui peuvent être atteints par ces techniques se voient limités par la capacité à maîtriser les procédés de lithographie électronique. Dans l'industrie de la micro-électronique, des microprocesseurs sont commercialisés avec des transistors dont les dimensions sont de l'ordre de 45 nm.

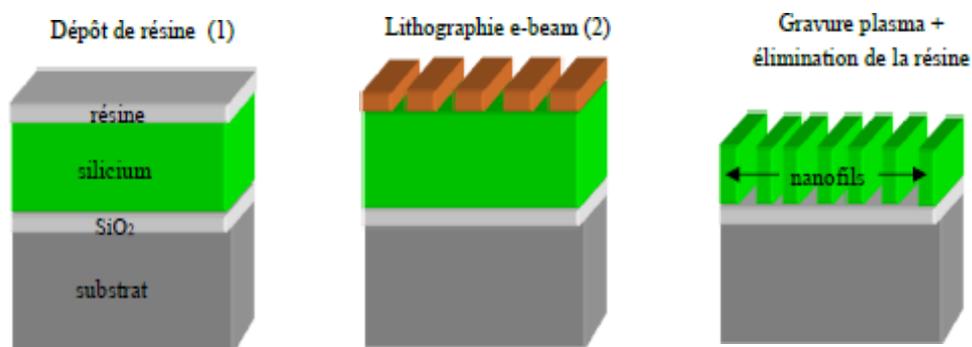


Figure 2.8 : Schéma de la méthode de fabrication de NFs horizontaux par une Approche top-down[62].

L'atout majeur de cette approche réside dans la capacité à créer des nanostructures dont les propriétés reflètent celles d'un cristal de silicium de haute qualité. Cela s'explique par le fait que la qualité du cristal initial demeure intacte, sans être altérée par ces procédés. Néanmoins, il est important de noter que cette technologie n'est pas exempte de défauts, étant donné que la qualité morphologique est compromise en raison de la rugosité de surface qui survient après la gravure.

2.5.2 Approche ascendante (bottom-up)

La confection des NFs peut également être réalisée grâce à une approche ascendante, une technologie qui tire parti de l'auto-organisation atomique pour édifier une structure cristalline à l'échelle nanométrique. Le schéma décrivant la création de ces colonnes peut être décomposé en trois étapes distinctes, comme illustré dans la figure 2.9:

Le dépôt d'un catalyseur métallique sur un substrat [61]. Un gaz (SiH_4 , Si_2H_6 , SiCl_4 , etc.) est acheminé dans un réacteur chauffé. Sous l'effet de la chaleur, le gaz subit une décomposition à hauteur de la goutte d'alliage Si-métal, conduisant à l'incorporation d'atomes de silicium dans celle-ci jusqu'à ce qu'elle soit saturée.

Le flux continu de silicium induit une sursaturation de l'alliage, ce qui amène des plans de silicium à cristalliser et à s'épitaxier sur le substrat, créant progressivement le nanofil de silicium. La méthode générique exposée ici correspond au dépôt chimique en phase vapeur (CVD pour chemical vapor deposition), et le mécanisme de croissance peut être soit VLS (vapor–liquid–solid) ou VSS (vapor–solid–solid) en fonction de la phase liquide ou solide dans laquelle l'alliage SiGe métallique se trouve, dépendant des conditions de température et de pression.

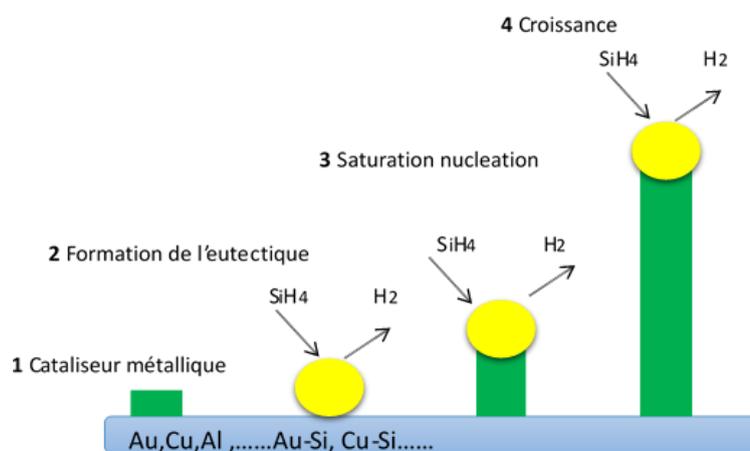


Figure 2.9 : Schéma de la méthode de fabrication de nanofils horizontaux par Approche Bottom-up [62].

L'utilisation de l'approche ascendante offre plusieurs avantages. D'une part, elle permet la création de structures tridimensionnelles incluant des fils verticaux dont la longueur peut s'étendre sur plusieurs microns, une réalisation qui s'avère particulièrement complexe dans le cadre de l'approche descendante. D'autre part, cette approche offre la possibilité de développer des hétérostructures à la fois axiales et surtout radiales. Ces hétérostructures peuvent être obtenues en modifiant les gaz réactifs ainsi que les conditions de température et/ou de pression dans le réacteur. Dans ce contexte, l'approche ascendante présente des perspectives prometteuses et ouvre de nouvelles opportunités d'applications.

Cependant, ce mode de croissance soulève des questions quant aux propriétés électroniques des NFs obtenus. Il est crucial de considérer la qualité cristalline de ces fils et la possible incorporation de particules métalliques. Ces questions joueront un rôle déterminant dans la réalisation des futures applications envisagées pour ces nano-objets.

2.6 Modes de croissance des Nanofils

Dans les paragraphes qui suivent, nous exposerons les trois modes de croissance prédominants des NFs, à savoir le mécanisme VLS (vapeur-liquide-solide), le mécanisme VSS (vapeur-solide-solide) et le mécanisme SLS (solide-liquide-solide) [63].

2.6.1 Mode Vapeur – Liquide – Solide

La notion du mécanisme de croissance des NFs basé sur la méthode de vapeur-liquide-solide (VLS) a été introduite pour la première fois par Ellis et Wagner (Wagner, 1964), puis elle a été revue ultérieurement par Wagner (Wagner, 1966) et Givargizov (Givargizov, 1971).

L'élément fondamental du mécanisme de croissance VLS réside dans le fait que la goutte forme un alliage liquide à une température de croissance qui est généralement supérieure à la température d'eutectique. Les températures de fusion des matériaux massifs tels que l'or (Au), le silicium (Si) et le germanium (Ge) sont respectivement de 1063°C, 1412°C et 938°C.

En comparaison, les températures d'eutectique des alliages Au-Si et Au-Ge sont de 363°C et 356°C. Les compositions atomiques en Si et Ge sont respectivement de 19% et 27%. La particularité de travailler dans ces conditions réside dans le fait que le système est intrinsèquement lié à la composition de l'eutectique et y revient chaque fois qu'il s'en écarte sous contrainte.

Le processus de croissance unidimensionnelle des NFs implique trois étapes [65] :

- L'incorporation sélective des espèces à faire croître depuis la phase vapeur dans la goutte métallique ;
- La diffusion de ces espèces à travers la surface de la goutte ;
- La cristallisation à l'interface entre la goutte et le substrat.

Dans ce mécanisme, le catalyseur métallique est présent sous forme de gouttes. Une goutte est exposée à un flux de gaz précurseur (vapeur). Dans des conditions définies de pression et de température, les molécules se décomposent à la surface de la goutte. Les espèces volatiles se désorbent, et l'espèce à faire croître s'incorpore et diffuse à l'intérieur de la goutte jusqu'à atteindre la sursaturation. L'excès se précipite à l'interface entre le liquide et le solide, contribuant ainsi à la croissance des NFs. Du point de vue de l'énergie, le silicium massif du substrat représente l'état stable du silicium. En revanche, le silicium sous forme de nanofil existe dans un état "métastable" avec une énergie légèrement supérieure à celle du substrat, tandis que le silicium gazeux sous forme de silane se trouve dans un autre état métastable avec une énergie encore plus élevée. Dans ces conditions, la transition du silicium de l'état gazeux vers l'état solide est une transition spontanée qui conduit à une réduction de l'énergie libre.

L'action catalytique des métaux, tels que l'or, réside dans leur capacité à amorcer sélectivement la cinétique de dissolution des espèces à faire croître dans la goutte. Autrement dit, la goutte d'or joue un rôle de catalyseur en accélérant la décomposition du silane, un processus qui aurait lieu même en l'absence d'or, mais à une vitesse plus lente.

Sur le plan énergétique, la goutte se trouve en équilibre stable avec la phase gazeuse, mais elle est métastable par rapport à la phase solide. En conséquence, elle absorbe les espèces de silicium qui se décomposent et se lient chimiquement à sa surface. À un certain point, elle atteint un niveau de sursaturation, déclenchant ainsi la précipitation de l'excès de silicium sous forme de NFs. Le processus s'enchaîne tant que le système est alimenté en silane.

goutte jusqu'à atteindre la sursaturation. L'excès se précipite à l'interface entre le liquide et le solide, contribuant ainsi à la croissance des NFs. Du point de vue de l'énergie, le silicium massif du substrat représente l'état stable du silicium. En revanche, le silicium sous forme de nanofil existe dans un état "métastable" avec une énergie légèrement supérieure à celle du substrat, tandis que le silicium gazeux sous forme de silane se trouve dans un autre état métastable avec une énergie encore plus élevée. Dans ces conditions, la transition du silicium de l'état gazeux vers l'état solide est une transition spontanée qui conduit à une réduction de l'énergie libre.

L'action catalytique des métaux, tels que l'or, réside dans leur capacité à amorcer sélectivement la cinétique de dissolution des espèces à faire croître dans la goutte. Autrement dit, la goutte d'or joue un rôle de catalyseur en accélérant la décomposition du silane, un processus qui aurait lieu même en l'absence d'or, mais à une vitesse plus lente.

Sur le plan énergétique, la goutte se trouve en équilibre stable avec la phase gazeuse, mais elle est métastable par rapport à la phase solide. En conséquence, elle absorbe les espèces de silicium qui se décomposent et se lient chimiquement à sa surface. À un certain point, elle atteint un niveau de sursaturation, déclenchant ainsi la précipitation de l'excès de silicium sous forme de NFs. Le processus s'enchaîne tant que le système est alimenté en silane.

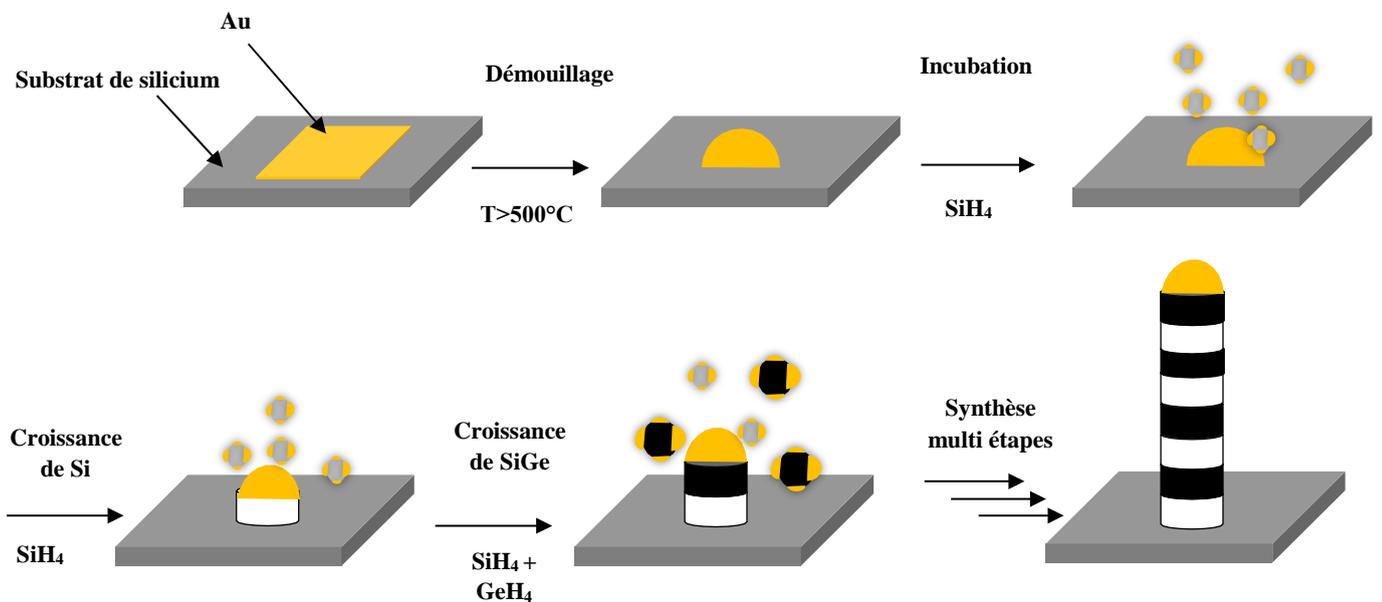


Figure 2.10 : schéma du mécanisme VLS [81].

La Figure 2.10 illustre le schéma du mécanisme VLS. Les gouttes catalytiques peuvent être engendrées par la rupture d'un film mince ou déposées par une solution de colloïdes sur le substrat. En chauffant le substrat à la température appropriée et en introduisant le matériau à faire croître, un alliage se forme. Lorsque la sursaturation de la particule est atteinte, la nucléation survient à l'interface entre la goutte et le substrat. La croissance du nanofil se poursuit tant que le matériau de croissance est fourni. En ajustant les conditions de croissance pour privilégier la croissance en deux dimensions, des hétérostructures radiales (ou cœur-coquille) peuvent être créées. Des NFs avec des hétérostructures axiales sont réalisables en modifiant le matériau de croissance. L'ajout de nouvelles gouttes à la surface des NFs, et une reprise de la croissance donnent naissance à des NFs avec des ramifications.

Un aspect notoire de la croissance VLS est son applicabilité sur une vaste gamme, couvrant des diamètres allant du nanomètre au micromètre, avec des rapports longueur/diamètre élevés pour les fils. La vitesse de croissance dépend de la pression du gaz précurseur et de la température de croissance. En ajustant ces paramètres, il est possible de réaliser des structures complexes. Par exemple, des NFs avec des hétérostructures radiales (cœur-coquille) peuvent être obtenus en favorisant la croissance en deux dimensions à un moment spécifique de la croissance [65]. De plus, des hétérostructures axiales peuvent être formées en activant et désactivant le flux de gaz précurseur [66]. Par ailleurs, des NFs avec des ramifications (nanoarbres) peuvent être obtenus en redéposant de l'or sur le fil et en reprenant la croissance ultérieurement [67].

Ces mêmes structures peuvent également être générées en créant des nanoclusters d'or initialement sur la surface latérale des NFs, servant ainsi de catalyseurs pour la croissance des ramifications à un stade ultérieur. Cette méthode a permis d'obtenir des nanoarbres de silicium avec des branches de 2 nm de diamètre via LPCVD (pour Low Pressure Chemical Vapor Deposition) [68].

Le front de croissance du nanofil présente une facette de superficie suffisamment réduite pour supposer que la croissance s'effectue atome par atome. Après la création d'un premier site de nucléation en deux dimensions, une monocouche se forme, et ainsi de suite [69]. Une représentation schématique de cette croissance couche par couche est fournie par la figure 2.11.

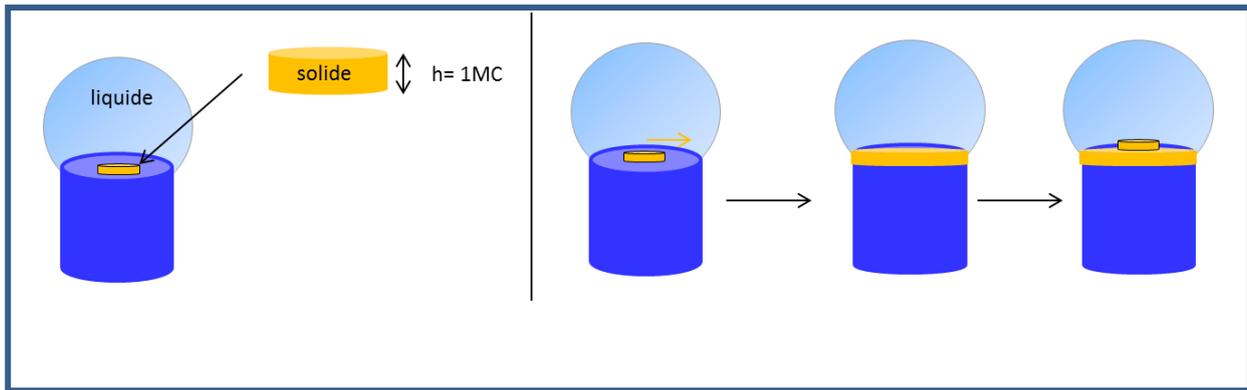


Figure 2.11 : Schéma de croissance couche par couche du nanofil [69].

Dans les premières phases de développement, la dissolution au sein de la goutte détermine le niveau de sursaturation qui ultimement déclenche la cristallisation. La nucléation au sein de la goutte peut se produire à la surface de celle-ci, entraînant la formation de filaments (Figure 2.12), ou bien se produire à l'interface liquide-solide, induisant ainsi une croissance épitaxiale dans une seule direction.



Figure 2.12 : Image MEB de croissance de Bi à partir de gouttes de Ga [70].

2.6.2 Mode Vapeur – Solide – Solide

Le mécanisme de croissance VSS partage des similitudes avec celui de la VLS, à l'exception du fait que le catalyseur métallique reste à l'état solide pendant la croissance au lieu d'être liquide. En général, la croissance des NFs est expliquée à l'aide du mécanisme VLS en impliquant un catalyseur métallique. Cependant, cela ne s'applique pas à la croissance de NFs de silicium catalysée par le titane [71]. La température de croissance, fixée à 600°C, est

bien en-dessous de la température de l'eutectique Ti-Si. Étant donné que la température de croissance est trop basse pour que la goutte soit liquide et que la réduction de la température d'eutectique due à l'effet de taille n'est pas suffisante pour expliquer, les auteurs ont supposé que le catalyseur demeure à l'état solide pendant la croissance.

De plus, le mécanisme VLS ne suffit pas à expliquer la croissance par MOVPE (Metalorganic Vapour Phase Epitaxy) de NFs d'arséniure d'indium (InAs) via des particules Au-In. Les auteurs ont conclu que la croissance des NFs InAs catalysée par l'or ne serait possible que si la goutte Au-In est solide pendant la croissance. L'or ne jouerait pas un rôle de catalyseur pour la croissance, mais présenterait une interface de basse énergie où la décomposition du matériau précurseur serait favorisée. Cela engendre une croissance plus rapide au niveau de la goutte par rapport au reste du substrat. De plus, lors de la croissance de NFs de gallium-arséniure (GaAs) et d'InAs catalysée par l'or, l'arsenic (As) n'est pas présent dans la goutte (il se retrouve à l'état de trace). Cela démontre que la goutte présente un diagramme binaire essentiel pour la croissance.

Des gouttes de PtSi ont été employées pour la croissance sub-eutectique de NFs Si [001] sur des substrats Si(001) en utilisant le silane. La croissance VSS de NFs de germanium a également été accomplie à des températures sub-eutectiques en utilisant du digermane comme gaz précurseur. L'état du catalyseur et, par conséquent, le mode de croissance, sont influencés par la pression et l'historique thermique du système. Comparativement, la croissance VSS est de 10 à 100 fois plus lente que la croissance VLS dans des conditions similaires de température et de pression de digermane [73].

2.6.3 Mode Solide – Liquide – Solide

Dans le cadre du mécanisme de croissance SLS, il n'y a pas d'utilisation de gaz précurseur pour la substance en cours de croissance. Par exemple, dans le cas des NFs de silicium (Si), les atomes de silicium se diffusent à des températures élevées depuis le substrat en silicium vers l'alliage Au-Si. Ces atomes de silicium se déplacent à l'intérieur de la goutte jusqu'à ce que la sursaturation soit atteinte, ce qui entraîne la cristallisation et la formation des NFs [74]. Étant donné que le silicium est fourni exclusivement par le substrat pendant le processus de croissance, cette méthode est qualifiée de SLS. Par ailleurs, il existe une approche appelée Solution-LS dans laquelle une solution précurseur est utilisée à la place d'un

gaz précurseur, suivant le schéma du mécanisme VLS. Cette méthode présente l'avantage de produire des NFs ayant un diamètre extrêmement réduit [75].

2.7 Élaboration des Nanofils semi-conducteurs

La fabrication de NFs nécessite des approches qui favorisent la croissance en une dimension. Deux méthodes principales sont distinguées pour la croissance des NFs : l'approche ascendante (bottom-up) et l'approche descendante (top-down). L'approche top-down implique la création de NFs à partir d'un substrat préexistant, tandis que l'approche bottom-up correspond à l'auto-assemblage unidimensionnel d'atomes sur un substrat pour former les NFs.

Parmi les techniques top-down couramment utilisées, on peut citer la lithographie par faisceau d'électrons [76], la lithographie optique [77], la lithographie par nano-impression [78], la gravure électrochimique [79], et la gravure chimique assistée par un métal [80]. Différentes méthodes bottom-up sont exploitées pour la croissance des NFs, dont le dépôt chimique en phase vapeur (CVD, Chemical Vapor Deposition) [81–83], l'épitaxie par jets moléculaires (MBE, Molecular Beam Epitaxy) [84], l'ablation laser [85], l'électrodéposition [86], l'évaporation par faisceau d'électrons [87], et l'évaporation thermique [88, 89].

2.7.1 Nanofils à structure simple de Si et de Ge

Les NFs de silicium (Si) ou de germanium (Ge) sont couramment produits en utilisant la technique de dépôt chimique en phase vapeur (CVD) assistée par un catalyseur métallique (C). Bien que la CVD ait été initialement conçue pour la formation de couches minces, elle a été adaptée pour la croissance de NFs en employant des catalyseurs métalliques.

Ces catalyseurs métalliques jouent un rôle crucial en définissant les sites de croissance des NFs. Ils se matérialisent sous forme de nanoparticules métalliques, générées à partir d'une fine couche de métal catalyseur déposée sur le substrat ou incluses dans une solution de colloïdes de dimensions calibrées. L'or est privilégié comme catalyseur pour la synthèse des NFs de silicium et de germanium.

Le processus de croissance des NFs, également connu sous le nom de processus Vapeur-Liquide-Solide (VLS) [90], a été introduit pour la première fois par Wagner et Ellis en 1964 lors de la création de "whiskers" (structures allongées) de silicium à l'échelle micrométrique. Environ trente ans plus tard, ce processus a été repris pour la croissance des NFs de silicium.

Dans ce contexte, le terme "Vapeur" dans le nom du processus désigne l'état du matériau (M) à croître, contenu dans le gaz précurseur. Pour les NFs de silicium (NF-Si), le gaz précurseur habituellement utilisé est le silane SiH_4 , tandis que le germane GeH_4 est employé pour les NFs de germanium (NF-Ge) [90]. D'autres gaz précurseurs, comme le tétrachlorure de silicium SiCl_4 et le disilane Si_2H_6 , sont utilisés pour les NF-Si, tout comme le tétrachlorure de germanium GeCl_4 et le digermane Ge_2H_6 pour les NF-Ge.

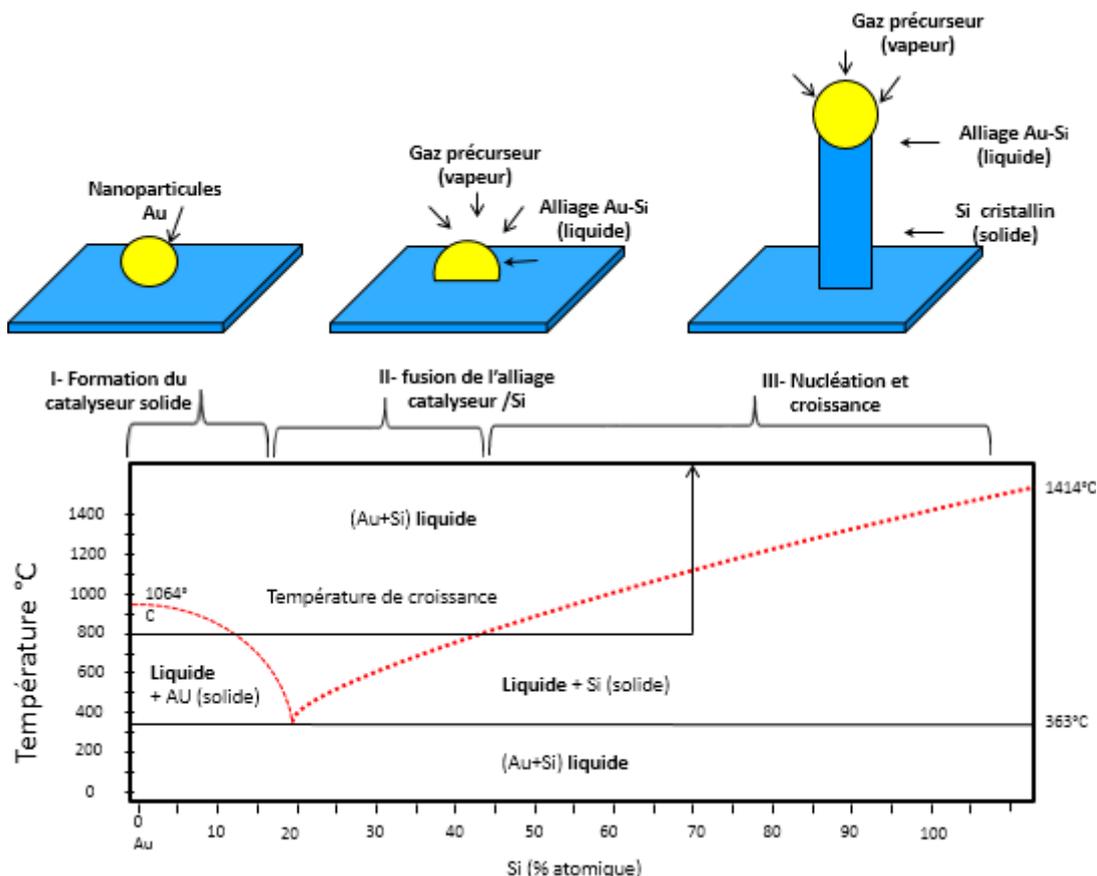


Figure 2.13 : schéma représentatif du mécanisme VLS [91].

Le matériau à croître est acheminé dans le gaz précurseur jusqu'aux sites de croissance, correspondant aux nanoparticules métalliques. Dans ce contexte, le gaz se décompose et le matériau M forme un alliage binaire C-M avec le catalyseur C. Cet alliage liquéfie à des températures et compositions spécifiques. Par exemple, les températures de fusion des alliages massifs Au-Si et Au-Ge sont proches de 363°C [92] et 361°C [93], respectivement, avec des compositions en or de 81% et 72%. Ces températures d'eutectique diffèrent considérablement des températures de fusion individuelles de l'or (1064°C), du silicium (1414°C) et du germanium (938°C).

En règle générale, la croissance VLS est possible uniquement lorsque la température de croissance dépasse la température d'eutectique d'alliage massif, permettant ainsi la formation d'un alliage C-M sous forme liquide.

Lorsque la goutte atteint une sursaturation, le matériau se précipite. La croissance verticale du nanofil débute depuis sa base. Tant que le gaz précurseur est introduit dans la chambre de réaction, le nanofil continue de croître en longueur, tandis que son diamètre évolue peu et est en grande partie déterminé par la taille du catalyseur. Quatre étapes se répètent de manière cyclique : la décomposition du gaz précurseur à la surface de la goutte d'alliage liquide, l'adsorption des atomes M sur la goutte liquide, la migration de ces atomes vers l'interface entre l'alliage liquide et le nanofil solide, et enfin la précipitation.

La direction de croissance du nanofil dépend de son diamètre, en fonction de la minimisation des énergies de surface aux interfaces, à savoir l'interface entre l'alliage liquide et le nanofil solide, ainsi que l'interface entre le nanofil solide et l'air. Les NFs de Si avec un diamètre inférieur à 20 nm privilégient la direction [110] pour leur croissance, tandis que les NFs de Si avec un diamètre supérieur à 40 nm adoptent plutôt la direction [111]. Quant aux NFs de Ge, la direction [111] prédomine indépendamment de l'orientation cristalline du substrat utilisé. Concernant la section transversale du nanofil (perpendiculaire à son axe), elle peut varier et prendre des formes triangulaires, rectangulaires, circulaires, voire hexagonales.

L'or est fréquemment choisi comme catalyseur lors de la croissance des NFs de Si et de Ge. Comparativement à d'autres catalyseurs métalliques, la croissance VLS assistée par l'or se réalise à des températures relativement basses, mais supérieures à la température de l'eutectique. Cependant, étant donné qu'il induit un niveau profond dans la bande interdite du silicium massif, des inquiétudes peuvent surgir quant à la compatibilité des NFs issus de la croissance catalysée par l'or avec la technologie de la microélectronique (Complementary Metal-Oxide-Semiconductor, CMOS).

C'est pourquoi d'autres métaux tels que l'aluminium Al, le cuivre Cu, ou le platine Pt sont étudiés comme substituts potentiels. Dans ces cas, la croissance est généralement effectuée à des températures inférieures à la température d'eutectique. L'alliage C-M se trouve alors à l'état solide, et le mécanisme de croissance est désigné comme Vapeur-Solide-Solide (VSS) [94]. La principale distinction entre le VLS et le VSS réside dans l'état de l'alliage binaire. Toutefois, les deux mécanismes partagent en commun le fait que le matériau à faire croître est contenu initialement dans un gaz précurseur. Lorsque le matériau à faire croître est présent

dans une solution précurseur, nous parlons alors de croissance en solution, ou plus spécifiquement, de mécanisme Solution-Liquide-Solide (SLS) [95]. Par ailleurs, certaines études se concentrent sur l'usage de catalyseurs oxydes (Oxide-Assisted Growth, OAG), comme le SiO_x, en remplacement des nanoparticules métalliques pour la croissance des NFs de Si.

2.7.2 Nanofils à structure simple d'alliage Si_{1-x}Ge_x

Le groupe de Thierry Baron au Laboratoire des Technologies de la Microélectronique de Grenoble (LTM) a effectué la croissance des NFs Si_{1-x}Ge_x décrits dans le deuxième chapitre [97]. Cette croissance est exclusivement réalisée par CVD en suivant le processus VLS assisté par un catalyseur à base d'or. Comme précédemment expliqué, les alliages Au-Si et Au-Ge possèdent des températures eutectiques très similaires.

Les gaz précurseurs, c'est-à-dire le silane et le germane, sont introduits simultanément dans la chambre de réaction. La composition en germanium du nanofil est principalement déterminée par le rapport du flux de gaz R défini comme suit :

$R = \frac{\text{GeH}_4}{\text{GeH}_4 + \text{SiH}_4}$ où X représente le flux du précurseur X pur. Des études ont montré que la composition en Ge de l'alliage varie de 0.12 à 0.25 en augmentant R de 0.01 à 0.038 [98]. De même, une variation linéaire de x de 0.2 à 0.46 a été observée en changeant R de 0.048 à 0.15 [96].

La première étape implique la croissance du cœur par le processus VLS catalysé par des nanoparticules d'or. L'absorption du matériau constituant le cœur se produit à la surface de la nano-goutte d'alliage liquide C-M, ce qui permet l'allongement axial du nanofil. La seconde étape vise à former la gaine. Dans cette phase, les gaz précurseurs dans la chambre de réaction CVD sont modifiés. L'objectif est de bloquer (ou supprimer) la croissance axiale et de favoriser l'adsorption du matériau de la gaine sur les côtés du nanofil. Cette stimulation de la croissance non catalysée sur les flancs du nanofil (Vapeur-Solide, VS), par opposition à la croissance catalysée, est réalisée via le contrôle de la température de croissance et de la pression partielle du gaz précurseur.

Prenons l'exemple d'un nanofil coeur/gaine Ge/Si. La croissance axiale VLS du cœur en Ge est activée à une température inférieure (280°C) à celle de l'eutectique du matériau massif. La croissance VS de la gaine en Si est favorisée soit à basse température de dépôt (< 425°C)

avec une pression partielle standard de gaz précurseur, soit à une température intermédiaire ($450^{\circ}\text{C} < T < 500^{\circ}\text{C}$) avec une pression partielle réduite du gaz précurseur [99].

Le défi de la diffusion de l'or pendant la croissance de la gaine de Si, du bout du nanofil vers sa surface latérale, est abordée. Deux solutions sont envisagées : soit ne pas effectuer la croissance de la gaine de Si immédiatement après la croissance du cœur de Ge, mais plutôt réaliser une étape intermédiaire comme l'immersion des NFs de Ge dans une solution aqueuse de HCl avec un agent d'attaque chimique pour éliminer l'or de la surface et la rendre lisse, soit déposer une couche de Si entre la nanoparticule d'or et le nanofil de Ge, agissant comme une barrière énergétique pour bloquer la diffusion de l'or.

La surface des NFs SiGe à structure coeur/gaine est souvent caractérisée par des ondulations périodiques et la présence d'îlots. La compréhension de ce phénomène reste un sujet d'investigation continu.

2.7.3 Dopage des Nanofils

La maîtrise du dopage joue un rôle fondamental dans la fabrication des jonctions p-n ou p-i-n pour les cellules solaires. Une approche pour réaliser le dopage des NFs bottom-up pendant leur croissance par CVD est le dopage in situ [100, 101]. Cela implique l'introduction d'un gaz précurseur de dopant, tel que le borane BH_3 pour un dopage de type p ou la phosphine PH_3 pour un dopage de type n, dans la chambre de réaction en plus du gaz précurseur du matériau à croître.

Le dopant peut être incorporé dans le nanofil de la même manière que le matériau à croître, soit via le mécanisme VLS (comme expliqué dans la section 2.1), soit via le mécanisme VS (comme expliqué dans la section 2.3). Le choix de favoriser l'un ou l'autre mécanisme de croissance aura un impact sur le profil radial de dopage [90]. Par exemple, le mécanisme VS peut être favorisé en introduisant le gaz précurseur de dopant après celui du matériau à croître. Dans ce scénario, l'absorption du dopant ou du matériau à croître se produit uniquement à la surface latérale du nanofil. Le résultat est un nanofil avec une structure hétérostructurée de type coeur intrinsèque/gaine dopée.

Différents types de dopage sont appliqués aux NFs d'alliage $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, ainsi qu'aux NFs coeur/gaine Si/Ge et Ge/Si [101].

2.8 Caractérisations structurales

2.8.1 La microscopie à force atomique (AFM)

La microscopie à force atomique (AFM : Atomic Force Microscopy) représente une méthode

employée pour examiner et analyser la topographie de la surface d'un échantillon avec une résolution extrêmement élevée dans la direction perpendiculaire à cette surface, également connue sous le nom d'axe Z [104].

Ce type de microscope, mis au point dans les années 80, est un exemple de microscope à sonde locale. Son principe consiste à construire une image point par point en balayant une sonde microscopique au-dessus de la surface du matériau. Ce sont les forces générées par les interactions atomiques entre les atomes de la surface de l'objet et les atomes de la pointe de la sonde (forces attractives ou répulsives) qui permettent ce balayage.

Différents modes de fonctionnement existent en fonction de la distance entre la pointe de la sonde et la surface de l'échantillon. Dans notre étude, nous avons opté pour le mode de fonctionnement en "non contact" en raison de la sensibilité de la structure que nous examinons. L'image obtenue grâce à cette technique est présentée dans la Figure 2.14 ci-dessous.

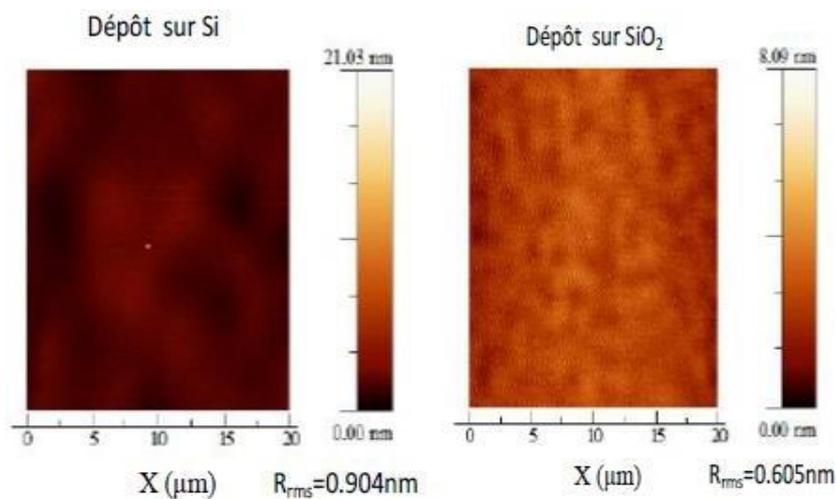


Figure 2.14 : Images AFM directement après l'étape de croissance de la nanostructure[104].

On observe une notable rugosité dans le cas du substrat SOI, cependant le dépôt demeure uniforme. Cette investigation a également joué un rôle crucial lors de la production des NFs, permettant de contrôler la rugosité de la surface et ainsi garantir l'homogénéité des NFs.

2.8.2 Microscopie électronique à balayage (MEB)

La microscopie électronique à balayage (SEM), l'une des techniques prédominantes dans le domaine des nanosciences, elle est utilisée pour examiner les surfaces après diverses manipulations ou lors de processus tels que la gravure par FIB [63].

Le microscope MBE, quant à lui, fonctionne en balayant la surface de l'échantillon à analyser avec un faisceau d'électrons. Ce faisceau entraîne l'émission d'électrons et de rayons X en réponse. L'analyse des électrons secondaires et des électrons rétrodiffusés permet d'obtenir respectivement une cartographie topographique et chimique de la surface. Ces particules sont capturées par divers détecteurs, lesquels permettent de reconstituer une image de la surface. Ce microscope est également capable de produire des images à très haute résolution de la surface d'un échantillon en exploitant les interactions entre les électrons et la matière.

Dans le premier échantillon, d'importants défauts sont observés à la surface. Ces défauts sont attribuables à l'étape d'attaque à l'acide fluorhydrique (HF), qui a été écartée du processus de fabrication afin de maintenir une surface dépourvue de défauts et de préserver l'isolation des NFs de Ge de l'environnement extérieur. Ces NFs sont ainsi bien protégés par la couche de SiO₂ formée durant l'étape d'oxydation RTA.

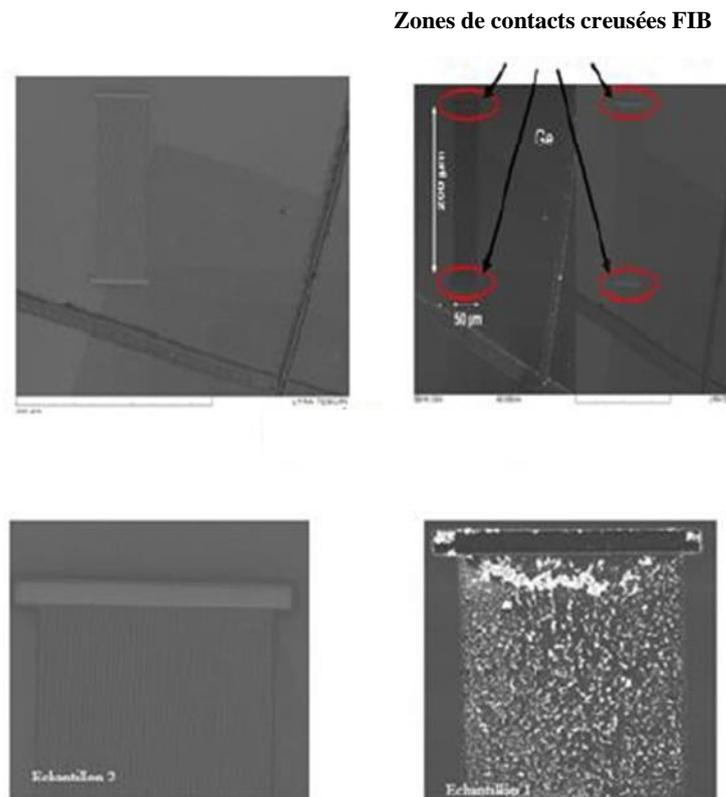
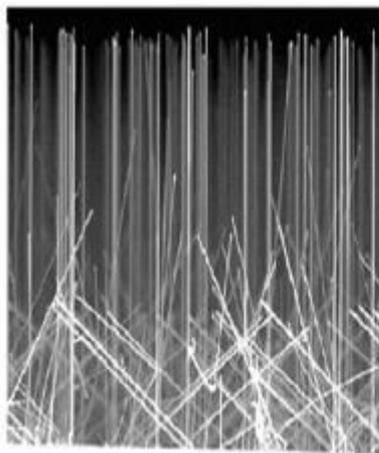


Figure 2.15 : Image SEM montrant le motif ainsi que les échantillons 1 et 2 [63].

Pendant la période dédiée à la réalisation de ce travail, la fabrication des échantillons ainsi que leur caractérisation est abordé sous différentes facettes, cette expérience a été confrontée à diverses contraintes qui ont enrichi le travail, en fournissant des informations touchant à plusieurs disciplines dans le domaine des nanosciences.

Dans le cadre de l'approche bottom-up, deux méthodes différentes coexistent en ce qui concerne la manière dont le silicium est introduit jusqu'au catalyseur. La première méthode, illustrée, implique l'utilisation d'une source gazeuse de silicium. Une autre approche consiste à apporter le silicium de manière atomique par le biais de l'épitaxie par jet moléculaire (EJM). Pour cette méthode, les atomes sont projetés sur toute la surface de l'échantillon. Leur diffusion jusqu'au catalyseur permet de le saturer. Cette méthode est plus lente que celle où la molécule de silane se décompose préférentiellement sur le site catalytique (CVD). En conséquence, le rapport entre la vitesse de croissance des nanofils et celle d'une couche plane est généralement plus élevé pour une technique de type CVD. De plus, la technique CVD s'avère généralement moins coûteuse que l'EJM, qui requiert notamment une technologie ultravide. Les figures 2.10 (a) et (b) montrent des images MEB de nanofils obtenus par les méthodes CVD et EJM. L'image MEB de la figure 2.10 (a) illustre des nanofils épitaxiés sur un substrat(111). L'orientation des fils suggère que l'axe de croissance des nanofils est principalement 111 et que les nanofils poussent en épitaxie sur le substrat.



(a) Les nanofils ont été catalysés par des colloïdes d'or de 200 nm, leur longueur est d'environ 24 μm



(b) les nanofils ont été catalysés par une couche de cuivre démouillée, leur longueur est d'environ 80 μm

Figure 2.16 : Images MEB de NFs obtenus par croissance VLS/CVD [105].

2.9 Intérêts des Nanofils

Les NFs sont des structures unidimensionnelles dont la finesse est mille fois inférieure à celle des cheveux. L'intérêt qui leur est porté a connu une expansion significative. En effet, les NFs exhibent des propriétés exceptionnelles en ce qui concerne la relaxation, le transport, ainsi que le confinement électronique et optique. À l'échelle nanométrique, la matière dévoile des propriétés singulières qui justifient une approche spécifique. Parmi ces propriétés, on compte évidemment les effets quantiques, mais également les effets de surface/volume ainsi que les effets aux bords.

Les premières nanostructures 1D à avoir été synthétisées sont les nanotubes de carbone, découverts par Iijima en 1991 [106,107]. Suite à cette découverte initiale, les chercheurs ont orienté leurs travaux vers la synthèse et la caractérisation d'autres structures 1D, notamment les NFs, les nanobâtonnets et les nanorubans. Les NFs inorganiques, comme le démontrent des études récentes, peuvent jouer un rôle de composants actifs dans les systèmes électroniques. Comme nous l'avons déjà évoqué, les propriétés hors du commun et modulables de ces nanostructures ouvrent la voie à leur intégration dans un large éventail d'applications, allant de l'électronique à l'optique, en passant par la thermoélectricité, le photovoltaïque, la biologie, la chimie et la mécanique. Nous portons un intérêt particulier aux applications liées aux microsources d'énergie, notamment dans les domaines de la thermoélectricité et du photovoltaïque, ainsi qu'aux applications en électronique.

2.9.1 Intérêt des Nanofils pour la thermoélectricité

- Les systèmes conventionnels de réfrigération, basés sur des cycles de compression-détente, impliquent des composants mobiles qui génèrent des vibrations et du bruit. En contraste, la thermoélectricité repose sur la conversion directe de l'énergie thermique en énergie électrique à travers des phénomènes de physique des solides. Les dispositifs thermoélectriques ne présentent pas de pièces en mouvement.
- L'absence de vibrations ouvre la voie à leur utilisation dans des applications où les vibrations sont fortement indésirables, comme dans les systèmes de guidage laser ou les circuits intégrés. Ils se distinguent par leur simplicité d'utilisation et leur compacité. Néanmoins, les rendements des convertisseurs thermoélectriques actuellement disponibles sur le marché atteignent environ 10%, ce qui reste inférieur

aux 30% des réfrigérateurs à compression de vapeur. La fabrication de ces nouvelles générations de convertisseurs thermoélectriques à petite échelle pourrait non seulement contribuer au refroidissement des dispositifs électroniques, mais également générer de l'électricité à partir de pertes d'énergie dues à l'effet Joule. L'intégration de nanostructures telles que les NFs dans ces convertisseurs pourrait conduire à une augmentation sans précédent de leur efficacité [108].

Ces deux applications :

- La réfrigération thermoélectrique : Cette application implique la génération d'un flux de chaleur qui va à l'encontre de la diffusion thermique. Cela se produit lorsque le courant électrique I circule à travers un matériau soumis à un gradient thermique [109].
- La génération électrique : Cette application concerne la transformation d'un flux de chaleur en un courant électrique. Cela peut être réalisé en utilisant des sources de chaleur perdue, telles que les pots d'échappement des véhicules automobiles, les cheminées d'incinérateurs ou les systèmes de refroidissement des centrales nucléaires.

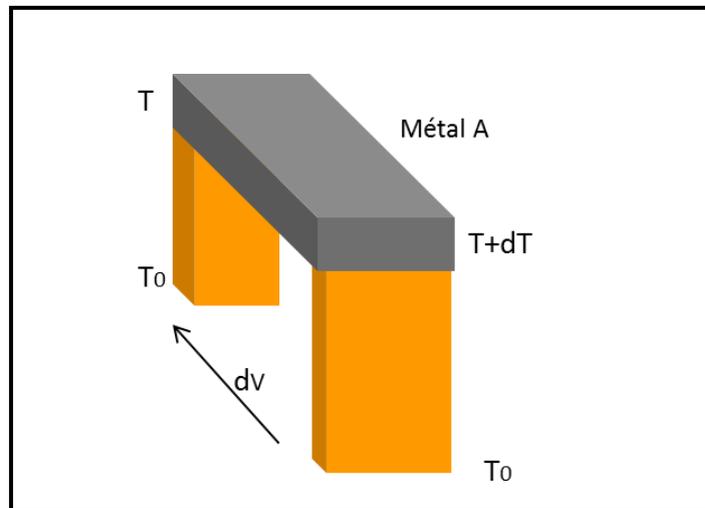


Figure 2.17 : schéma de l'effet Seebeck.

L'apport de chaleur peut être obtenu en exploitant des sources de chaleur gaspillée, telles que celles émanant des échappements des véhicules automobiles, des cheminées d'incinérateurs ou des systèmes de refroidissement des centrales nucléaires.

Trois phénomènes thermoélectriques distincts sont observés dans les matériaux : l'effet Seebeck, l'effet Peltier et l'effet Thomson. Il convient de souligner que ces phénomènes sont

associés aux propriétés volumiques des matériaux et non à leurs surfaces [110]. Ces trois phénomènes sont interconnectés par des relations simples définies dans les équations d'Onsager, nommées d'après le physicien qui les a formulées. Chacun de ces effets est caractérisé par un coefficient propre. Par conséquent, si l'évolution d'un de ces coefficients est connue en fonction de la température T , les deux autres peuvent être déduits [111].

L'effet Seebeck, découvert en 1821 par Thomas Johann Seebeck, se produit lorsque deux matériaux distincts, A et B, sont reliés au niveau d'une jonction soumise à un gradient de température T . Cela engendre une force électromotrice (f.é.m.) aux bornes de la jonction, comme illustré dans la figure 2.11. Cette action s'explique par la polarisation des éléments conducteurs dans une zone où le gradient de température est non nul. Les électrons de conduction se diffusent de l'extrémité la plus chaude vers l'extrémité la plus froide. Leur vitesse dépend de la température. Les électrons chauds, étant plus mobiles que les électrons froids, induisent une charge positive à l'extrémité chaude et une charge négative à l'extrémité froide. Un champ électrique se forme, en opposition au mouvement électronique qui l'a généré, conformément à la loi d'Heinrich Lenz. Ce champ électrique, résultant des caractéristiques des matériaux et surtout du pouvoir thermoélectrique, engendre la tension dite tension Seebeck. Le champ électrique ralentit les électrons chauds tandis qu'il accélère les électrons froids. Un équilibre dynamique est atteint : la diffusion des électrons chauds est équilibrée par la diffusion des électrons froids. Ainsi, un élément de matériau conducteur de certaine longueur peut être assimilé à un générateur élémentaire de tension.

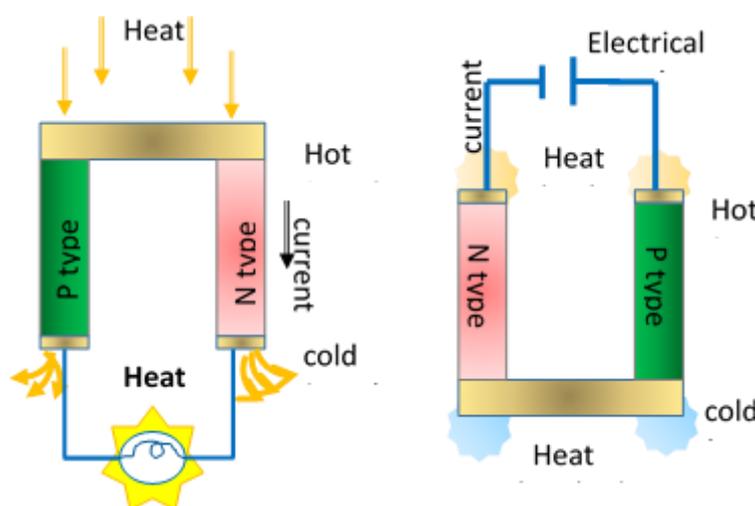


Figure 2.18 : a) Jonction n-p fonction en générateur électrique, b) jonction n-p fonctionnant en réfrigération [112].

L'effet Peltier, découvert en 1834 par Jean-Charles Athanase Peltier, se manifeste par la libération ou l'absorption de chaleur, autre que la chaleur de Joule, lorsqu'un courant électrique traverse les jonctions de deux conducteurs, A et B, maintenus à la même température. Cet effet engendre un échange minime de chaleur qui est proportionnel à l'intensité du courant électrique I dans le circuit et dépend de la température du système [110].

L'effet Thomson, découvert en 1851 par le physicien anglais William Thomson, également connu sous le nom de Lord Kelvin, établit une connexion entre les phénomènes de Seebeck et de Peltier. L'effet Thomson peut être considéré comme une extension continue de l'effet Peltier à l'intérieur du matériau, et il peut être observé individuellement dans un seul matériau. Ce phénomène se traduit par la libération ou l'absorption de chaleur, en dehors de l'effet Joule, lorsque qu'un courant électrique traverse un conducteur homogène présentant un gradient de température non uniforme. Lorsque le courant circule à contre-courant du gradient de température, une absorption de chaleur se produit. En revanche, lorsque le courant suit la direction du gradient de température (dans les cas où le coefficient Thomson est positif), il provoque une émission de chaleur [110].

2.9.2 Intérêt des Nanofils pour le photovoltaïque

Les cellules solaires tiennent une grande promesse en tant que sources d'énergie propre et renouvelable. La tendance à la miniaturisation ouvre également la possibilité d'intégrer ces cellules solaires en tant que microsources d'énergie au sein des systèmes nanoélectroniques. L'adoption de nanostructures ou de matériaux nanostructurés constitue une approche globale pour réduire à la fois les coûts et les dimensions, tout en augmentant l'efficacité photovoltaïque [113].

Pour atteindre leur efficacité maximale, les cellules solaires doivent répondre à deux critères essentiels. En premier lieu, elles doivent être en mesure d'absorber la lumière, ce qui requiert un matériau actif d'une épaisseur suffisante pour une absorption optimale. De plus, elles doivent être capables de collecter les électrons engendrés par les paires électron-trou résultant de l'absorption des photons. La qualité d'un matériau a généralement un impact sur sa capacité à limiter le piégeage des électrons. Pour concilier ces exigences, une solution consiste à utiliser des couches relativement minces et des matériaux présentant une pureté cristalline exceptionnelle, ce qui élimine les impuretés et les défauts susceptibles de capturer

les électrons. Cependant, bien que de tels matériaux donnent d'excellents résultats, leur coût élevé se reflète dans le prix final des panneaux solaires.

Les NFs proposent une alternative intéressante. D'une part, ils ont la capacité d'absorber de grandes quantités de lumière sur leur longueur. D'autre part, leur principal avantage réside dans la réduction de la distance entre la jonction n-p et le collecteur d'électrons. Quelques dispositifs ont été élaborés, et deux configurations majeures ont émergé.

La première configuration consiste à élaborer le dispositif complet autour du nanofil en utilisant des couches radiales [113]. Ainsi, les électrons parcourent une distance très courte avant d'être collectés simplement en traversant la couche appelée "coquille". Étant donné que ces couches sont minces, les risques d'emprisonnement des électrons sont réduits, ce qui permet l'utilisation de matériaux moins coûteux et comportant davantage de défauts [114].

La deuxième configuration implique l'utilisation d'une forêt de NFs comme base. La jonction n-p est réalisée de deux manières : soit le substrat est dopé de type p et les NFs sont dopés de type n [115], soit les NFs de type p sont recouverts d'un dépôt de silicium amorphe de type n conforme. Dans les deux cas, cela crée une jonction n-p.

Bien que la génération d'électricité à partir de ces cellules ait été confirmée, un long chemin reste à parcourir avant leur commercialisation à grande échelle. Pour des applications à grande échelle, il est nécessaire de cultiver des forêts denses de NFs. La principale limitation actuelle réside dans le faible rendement de ces cellules photovoltaïques. Par exemple, sur un seul fil, le rendement obtenu à partir de la lumière incidente en électricité n'est que de 3,9%, ce qui est encore loin des presque 20% obtenus avec les panneaux solaires conventionnels.

L'objectif pour augmenter le rendement de ces cellules solaires est d'obtenir des tapis de NFs plus denses, de réduire les résistances de contact, de minimiser la diffusion, d'optimiser la géométrie des NFs (distribution des diamètres, propriétés d'orientation et d'améliorer la qualité de la jonction n-p).

2.9.3 Intérêt des Nanofils pour l'électronique

Les nouvelles propriétés des nanomatériaux, en particulier leurs propriétés électroniques, ont fait des nanomatériaux des candidats privilégiés pour être intégrés dans les systèmes nanoélectroniques. Comme évoqué dans l'introduction, les effets de dimension sont un

élément clé des nanomatériaux. Ils entraînent l'émergence de nouvelles caractéristiques au niveau des structures électroniques. Par exemple, les structures électroniques des nanocristaux métalliques ou semi-conducteurs diffèrent de celles des matériaux massifs et des atomes isolés [116]. Lorsque la taille d'un nanocristal devient inférieure à la longueur d'onde de Broglie, les électrons et les trous sont confinés dans l'espace, ce qui génère des dipôles électriques et conduit à la formation d'un niveau d'énergie électronique discret, indépendamment du matériau. Cela signifie que le nombre d'états d'énergie disponibles est limité. À l'instar d'une particule dans une boîte, la séparation entre deux niveaux d'énergie adjacents augmente à mesure que les dimensions diminuent. L'effet de confinement des porteurs devient évident lorsque les dimensions de la structure diminuent.

L'effet de confinement quantique se manifeste de manière plus accentuée dans le cas des nanoparticules semi-conductrices. Cette tendance est particulièrement marquée pour les NFs de silicium, comme illustré dans la figure 2.13 qui présente les écarts de bande en fonction de leurs diamètres, basés sur des données expérimentales et théoriques [117]. Lorsque les dimensions diminuent, on observe un déplacement des bandes vers des fréquences plus élevées, entraînant ainsi une augmentation de l'écart de bande.

Depuis l'introduction de la modulation de dopage et des transistors à mobilité électronique plus élevée, la maîtrise de la composition des semi-conducteurs est devenue un paramètre critique pour les systèmes de l'électronique en deux dimensions et de la photonique. Une première conséquence de la réduction de taille est la diminution des taux de diffusion des porteurs de charge, en raison de la restriction de l'espace réciproque accessible aux porteurs. En général, la mobilité électronique est influencée par divers mécanismes de diffusion des porteurs : diffusion entre porteurs, diffusion à la surface, rugosité de surface, phonons acoustiques, phonons optiques, impuretés [116].

Les NFs établissent un lien crucial entre les matériaux massifs et moléculaires. Un ajustement systématique du diamètre des NFs permet une exploration méthodique des effets de la dimensionnalité sur le transport. En général, le diamètre à partir duquel les propriétés de transport subissent des modifications est associé au confinement des porteurs et des excitons, à la longueur d'onde de Fermi et aux interactions de Coulomb. Cependant, les NFs de plus gros diamètres peuvent également avoir un effet sur le transport électronique en raison de la diffusion à la surface, favorisée par leur rapport surface/volume [116].

Les multiples applications des NFs ont suscité un vif intérêt parmi les chercheurs, en particulier dans le domaine de l'électronique. C'est ainsi que les NFs semi-conducteurs, en tant qu'éléments fondamentaux, ont été employés pour former des dispositifs individuels ou des ensembles de dispositifs au sein de structures en forêt.

2.10 Applications des Nanofils

Les propriétés uniques des NFs en font des objets intéressants pour différentes applications dans les domaines suivants :

2.10.1 Microélectronique

De manière générale, les NFs peuvent être incorporés en tant que voies de conduction au sein de dispositifs électroniques. En raison de leur petite section, qui s'étend sur quelques nm² seulement, les propriétés électroniques des NFs diffèrent de celles des matériaux massifs. Parmi les propriétés qui subissent des modifications ou émergent, on peut citer la structure de bande et les phénomènes de transport balistique ou quasi balistique. La configuration géométrique des NFs les rend propices à être intégrés en tant que transistors à effet de champ [118].

Les NFs de silicium peuvent être appliqués dans le contexte des transistors à effet de champ à entourage vertical (VS-FET) [119]. L'avantage de cette approche réside dans l'élimination de la nécessité de recourir au polissage mécanique ou chimique, une étape critique pour les NFs ayant un diamètre d'environ 40 nm et un rapport d'aspect de 10.

Pour les générations futures de l'électronique à ultra haute densité [120], les NFs pourraient également servir d'interconnexions tridimensionnelles pour former des réseaux dotés de nouvelles fonctionnalités. La technologie reposant sur les hétérostructures unidimensionnelles a été mise en œuvre pour la fabrication de transistors à électron unique [121], ainsi que de mémoires à jonctions tunnel multiples [122].

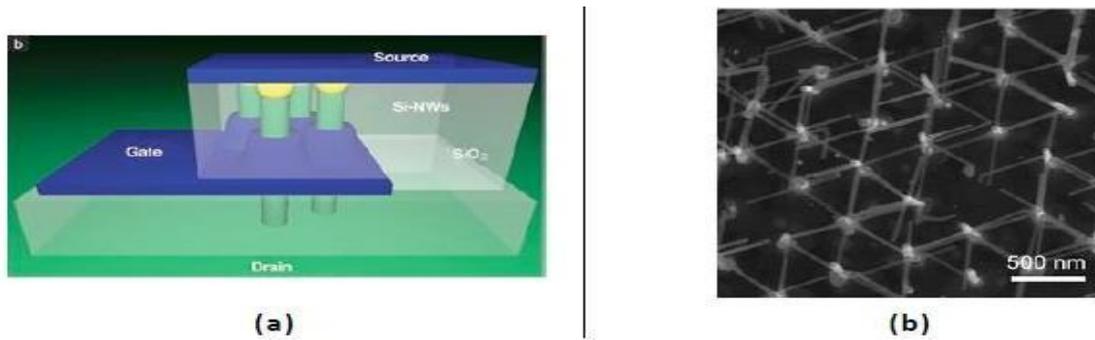


Figure 2.19 : (a) Image schématique 3D d'un VS-FET [119], (b) Image MEB d'interconnexion de NFs InAs [120].

2.10.2 Optoélectronique

Les structures hétérostructurées unidimensionnelles peuvent être incorporées dans les NFs pour former des boîtes quantiques, lesquelles peuvent servir de sources de photons individuels [123]. De plus, les NFs ont la capacité de fonctionner comme des cavités laser [124]. Par ailleurs, certains matériaux qui révèlent des défauts lorsqu'ils sont cultivés en volume se transforment en cristaux parfaits sous la forme de NFs, à l'exemple des NFs de GaN et de AlGaN [125].

Des NFs semi-conducteurs à super réseaux III-V et IV ont été fabriqués, présentant des compositions de couches multiples de GaAs et GaP pour obtenir des NFs à modulation de gap. Les analyses de photoluminescence, de transport électrique, ainsi que les mesures d'électroluminescence sur des NFs individuels de type n-Si/p-Si et n-InP/p-InP révèlent les propriétés singulières de ces NFs à super réseaux. De plus, ils ouvrent la voie à des applications potentielles allant des codes-barres à l'échelle nanométrique aux diodes électroluminescentes polarisées à l'échelle nanométrique [126].

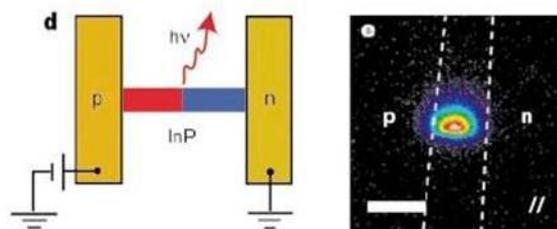


Figure 2.20 : l'image à gauche représente un schéma d'une DEL à nanofil InP. L'image de droite représente l'émission polarisée depuis la DEL selon l'axe du nanofil. Les pointillés représentent les bords de l'électrode. Barre d'échelle 3 μ m [126].

2.10.3 Détecteurs chimiques

Les NFs jouent un rôle de plus en plus significatif dans le domaine des sciences de la vie. Ils sont employés en tant que capteurs électriques ultrasensibles pour la détection d'espèces chimiques et biologiques. Grâce à leurs diamètres nanométriques, qui sont comparables à ceux des espèces chimiques et biologiques à détecter, les NFs se transforment en des transducteurs primaires exceptionnels, générant un signal qui peut interagir avec des instruments macroscopiques.

Dans les domaines de la biologie et de la chimie, l'engouement pour les NFs s'explique par leur rapport surface/volume élevé, ce qui leur permet d'effectuer une détection électrique extrêmement sensible des substances chimiques et biologiques [127]. La figure 2.16 illustre la variation de la conductance du nanofil en fonction de sa liaison ou non avec le virus [128]. Les NFs jouent un rôle de plus en plus significatif dans le domaine des sciences de la vie. Ils sont employés en tant que capteurs électriques ultrasensibles pour la détection d'espèces chimiques et biologiques.

Grâce à leurs diamètres nanométriques, qui sont comparables à ceux des espèces chimiques et biologiques à détecter, les NFs se transforment en des transducteurs primaires exceptionnels, générant un signal qui peut interagir avec des instruments macroscopiques. Dans les domaines de la biologie et de la chimie, l'engouement pour les NFs s'explique par leur rapport surface/volume élevé, ce qui leur permet d'effectuer une détection électrique extrêmement sensible des substances chimiques et biologiques [127]. La figure 2.16 illustre la variation de la conductance du nanofil en fonction de sa liaison ou non avec le virus [128].

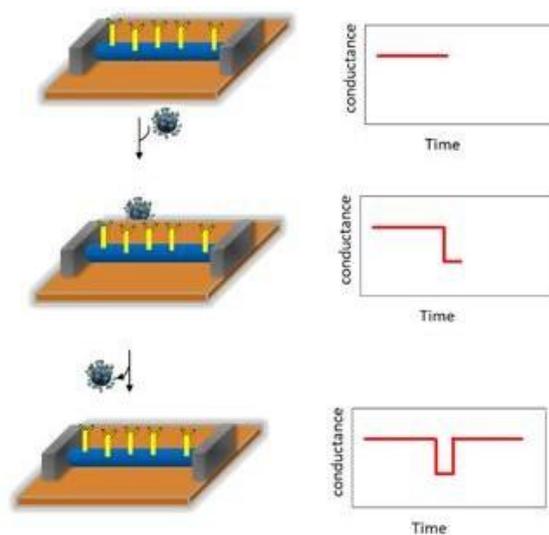


Figure 2.21 : schéma d'un virus unique dans 2 états lié et non lié à la surface d'un nanofil dans un dispositif avec des anticorps avec la variation temporelle de conductance correspondante à chaque état [128]

2.10.4 Thermoélectricité

Les NFs de silicium [129], de tellure de bismuth [130-132] et d'antimoniure d'indium [133] ont démontré la faisabilité de la création de dispositifs thermoélectriques destinés à la fois à la génération d'électricité et à la réfrigération. Ces NFs présentent une valeur élevée de la figure de mérite thermoélectrique ZT . Le processus de conversion de la chaleur en électricité est réalisé à travers l'effet Seebeck, tandis que l'inverse peut être accompli en utilisant l'effet Peltier. Par exemple, dans le cas des NFs de silicium, la figure de mérite peut dépasser celle du matériau massif de deux ordres de grandeur [134].

En règle générale, à mesure que le diamètre diminue, la conductivité électrique diminue également. Dans le contexte des semi-conducteurs, la contribution électronique à la conductivité thermique est moins significative que la contribution phononique. Dans les nanostructures, la diffusion aux bords et aux interfaces augmente, ce qui engendre une réduction de la conductivité thermique. Une autre conséquence de la diminution de la taille est l'accroissement du coefficient de Seebeck en raison de la densité d'états élevée près du niveau de Fermi.

2.10.5 Spintronique

Les NFs dopés dévoilent des applications prometteuses dans le domaine du nanomagnétisme. Cette perspective trouve sa source dans la capacité du spin de l'électron à transporter et à stocker l'information. Une attention particulière est accordée aux semi-conducteurs magnétiques dilués (SMD) qui s'harmonisent avec la technologie silicium. Actuellement, l'exploration de hétérostructures semi-conductrices dotées de propriétés ferromagnétiques connaît une expansion considérable. Les matériaux magnétiques ouvrent la voie à la création de mémoires permanentes et réinscriptibles. L'exploitation de nanomatériaux semi-conducteurs ferromagnétiques trouve des applications dans le domaine de l'électronique de spin, avec notamment la conception de composants tels que les transistors à effet de champ de spin (spin-FET) [135].

2.11 Conclusion

Les nanofils présentent un intérêt majeur en raison de leurs propriétés uniques à l'échelle nanométrique, offrant une grande surface spécifique, une conductivité améliorée et des applications diverses dans l'électronique, la médecine et l'énergie. Leur flexibilité et leur adaptabilité ouvrent la voie à la création de dispositifs miniaturisés, de capteurs hautement

sensibles, et offrent des perspectives de développement de technologies avancées pour répondre aux besoins actuels et futurs.

Les nanostructures représentent une approche générale pour réduire, à la fois, le coût et la taille et pour améliorer le rendement photovoltaïque.

3.1 Introduction

Silvaco est une entreprise de logiciels de conception et de simulation qui offre des outils puissants pour la conception de semi-conducteurs et de dispositifs électroniques. Leur suite logicielle comprend des solutions de modélisation, de simulation et de vérification destinées à aider les chercheurs dans la conception de circuits intégrés, de composants de systèmes micro-électroniques et de dispositifs optoélectroniques. Silvaco est reconnu pour ses outils de pointe permettant de simuler et d'optimiser la performance des semi-conducteurs, aidant ainsi les entreprises à accélérer le développement et à améliorer la fiabilité de leurs produits électroniques.

Le travail présenté dans cette étude se concentre sur la modélisation et la simulation de cellules photovoltaïques. Dans ce cadre, nous allons examiner l'impact de la concentration sur divers paramètres de la cellule. Ensuite, nous allons déterminer la valeur optimale de la concentration de germanium pour laquelle nous allons étudier l'effet d'insertion de puits quantiques dans un nanofil, en tenant compte de différents paramètres caractéristiques de la cellule.

3.2 Cellules solaires à Nanofils simulées à base de Si

Tout au long de ce travail, toutes les simulations ont été effectuées en utilisant l'irradiation solaire AM0 à une seule intensité de soleil.

3.2.1 Cellule Solaire à NFs à base de Si par insertion de puits quantiques de SiGe

L'étude présente dans ce travail porte sur la modélisation et la simulation d'une cellule photovoltaïque, pour cela nous avons étudié l'influence de la concentration du germanium sur les différents paramètres de la cellule, puis nous avons récupéré la valeur optimale avec laquelle nous avons étudié l'effet d'insertion des puits quantiques dans un nanofil dans différents paramètres caractéristiques de la cellule.

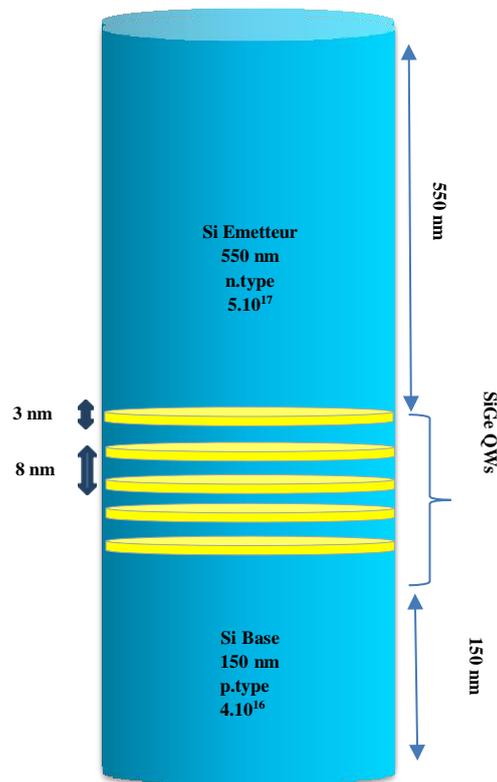


Figure 3.1 : Structure de NFs à base de Si avec insertion de 5 puits quantiques de SiGe [136].

Résultats et discussion :

Cette partie est consacrée à la simulation et à la détermination des caractéristiques de la structure $Si_{1-x}Ge_x/Si$. Tout d'abord nous avons varié la concentration du germanium, afin d'étudier son influence sur les différents paramètres de la cellule ceci est détaillé dans le tableau 3.1.

Tableau.3.1 : l'influence de la concentration du germanium sur les différents paramètres de la cellule.

x_{comp}	0.15	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6
J_{cc} (mA/cm ²)	7.80	7.81	7.82	7.84	7.88	7.95
V_{co} (V)	0.33	0.32	0.32	0.31	0.30	0.25
FF (%)	81.40	81.94	81.88	76.45	74.85	73.94
η (%)	2.10	2.09	2.03	1.85	1.55	1.50

D'après cette simulation nous avons récupéré la valeur optimale de la concentration qui nous donne un meilleur rendement de la cellule, dans notre cas la concentration est fixée à 0,15. Après le choix de la concentration adéquate, nous sommes passés à la simulation de cellules solaires à base de NFs $\text{Si}_{0.85}\text{Ge}_{0.15}/\text{Si}$ par insertion de 2,4,6,8,10,12 et 14 puits quantiques respectivement, pour indiquer l'influence de l'introduction des puits quantiques sur les différents caractéristiques de la structure.

La figure 3.2 représente la caractéristique courant-tension $I(V)$ d'une CS à base d'un NF Si pin et d'un NF $\text{Si}_{0.85}\text{Ge}_{0.15}/\text{Si}$ par insertion de 2, 4, 6, 8, 10, 12 et 14 puits quantiques respectivement.

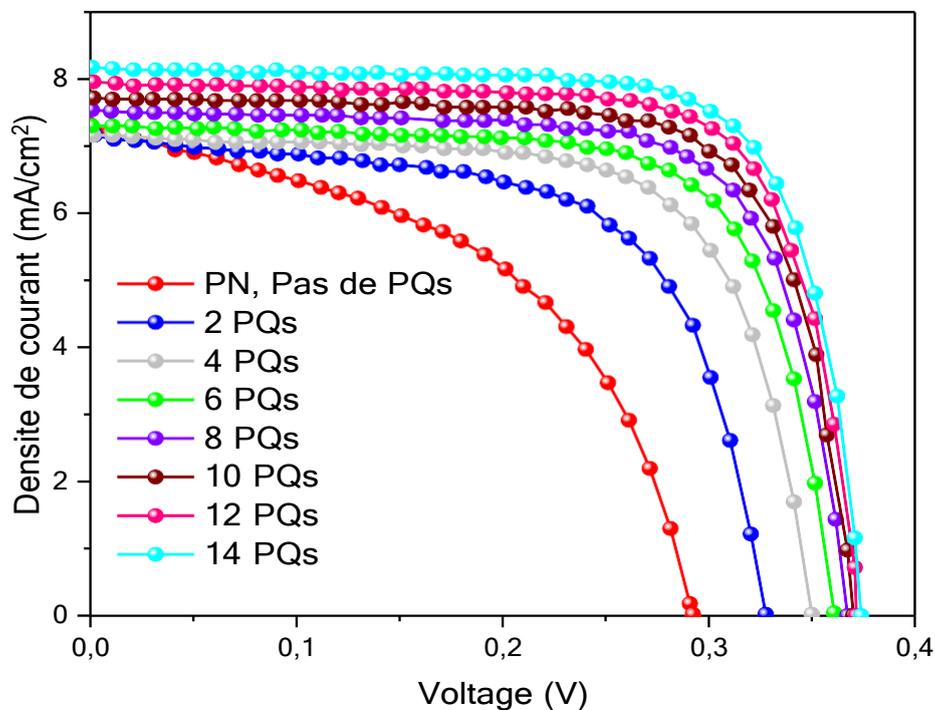


Figure 3.2 : $J(V)$ de la CS pin Si et $\text{Si}_{0.85}\text{Ge}_{0.15}/\text{Si}$ allant de 0 à 14 puits quantiques [136].

Comme on peut le voir, le courant de court-circuit augmente avec l'augmentation du nombre de puits quantiques intégrés. Cette amélioration entraîne un accroissement de la puissance délivrée par cette structure (figure 3.3). La tension de circuit ouvert et le facteur de forme augmentent lorsque le nombre de puits quantiques insérés augmente (figure 3.4). Par conséquent, l'efficacité augmente avec l'augmentation du nombre de puits quantiques insérées

jusqu'à 14 puits quantiques, au-delà de ce nombre, l'efficacité conserve la même valeur (figure 3.5). Tous les paramètres caractéristiques atteints sont listés dans le tableau (3.2).

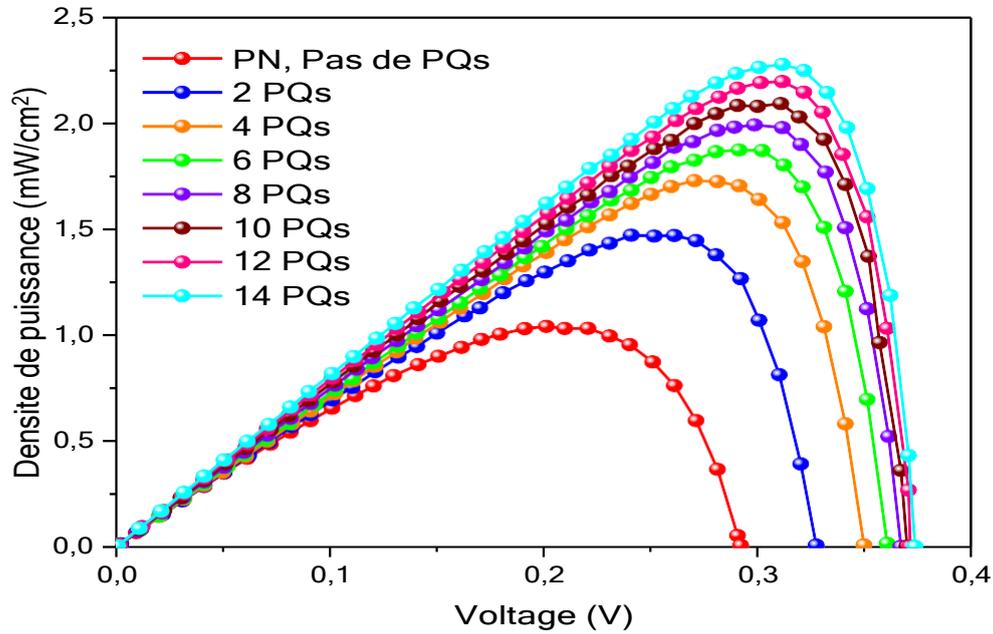


Figure 3.3 : P(V) de la CS pin Si et Si_{0.85}Ge_{0.15}/Si allant de 0 à 14 puits quantiques [136].

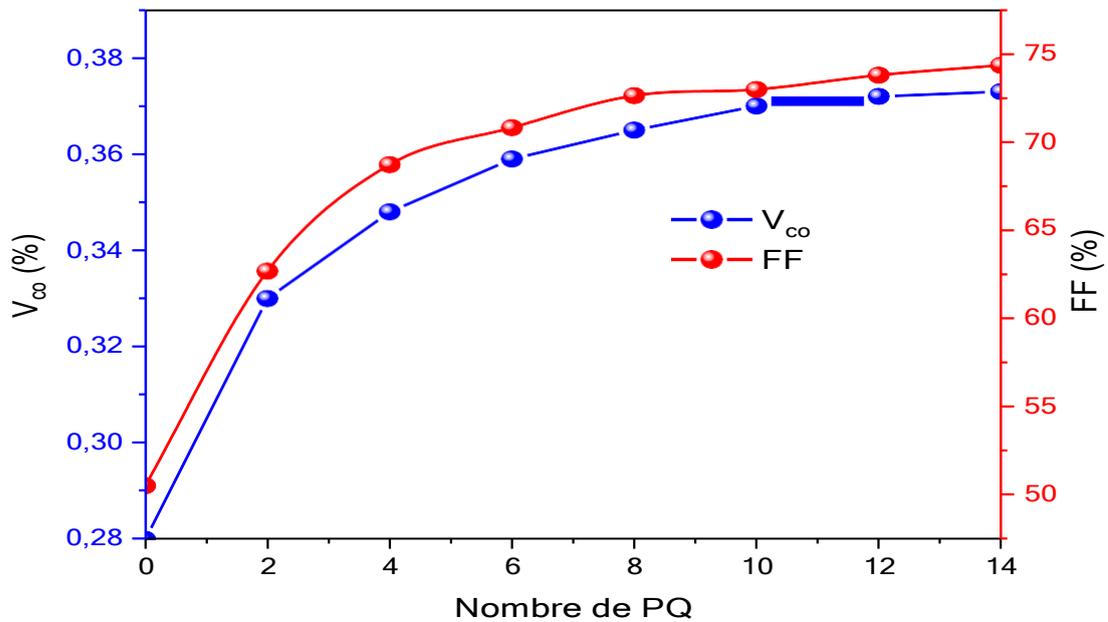


Figure 3.4 : Variation du V_{co} et du FF en fonction du nombre de puits quantiques

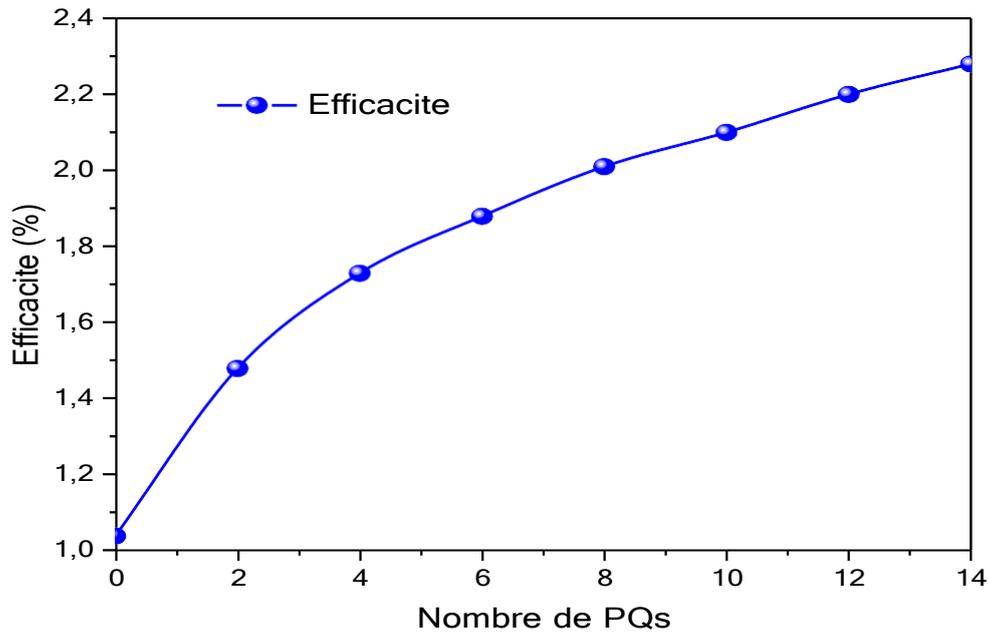


Figure 3.5 : Variation de l'efficacité de conversion en fonction du nombre de puits quantiques insérés [136].

Tableau 3.2 : Les paramètres importants de la CS pin Si et SiGe_{0.85} Ge_{0.15}/ Si allant de 0 à 14 puits quantiques.

Nombre de PQs	J _{cc} (mA/cm ²)	V _{co} (V)	FF (%)	η (%)
0	7.374	0.280	50.54	1.04
2	7.243	0.330	62.69	1.48
4	7.258	0.348	68.72	1.73
6	7.405	0.359	70.82	1.88
8	7.599	0.365	72.63	2.01
10	7.805	0.370	72.98	2.10
12	8.016	0.372	73.79	2.20
14	8.230	0.373	74.35	2.28

La figure 3.6 représente la variation de l'efficacité de conversion de la cellule en fonction de l'augmentation de la température, c'est évident que l'efficacité de conversion diminue avec l'augmentation de la température, car lorsque la CS est chauffée, le courant J_{sc} augmente,

mais la tension V_{co} diminue. Comme la tension diminue plus vite que le courant augmente, l'efficacité globale diminue.

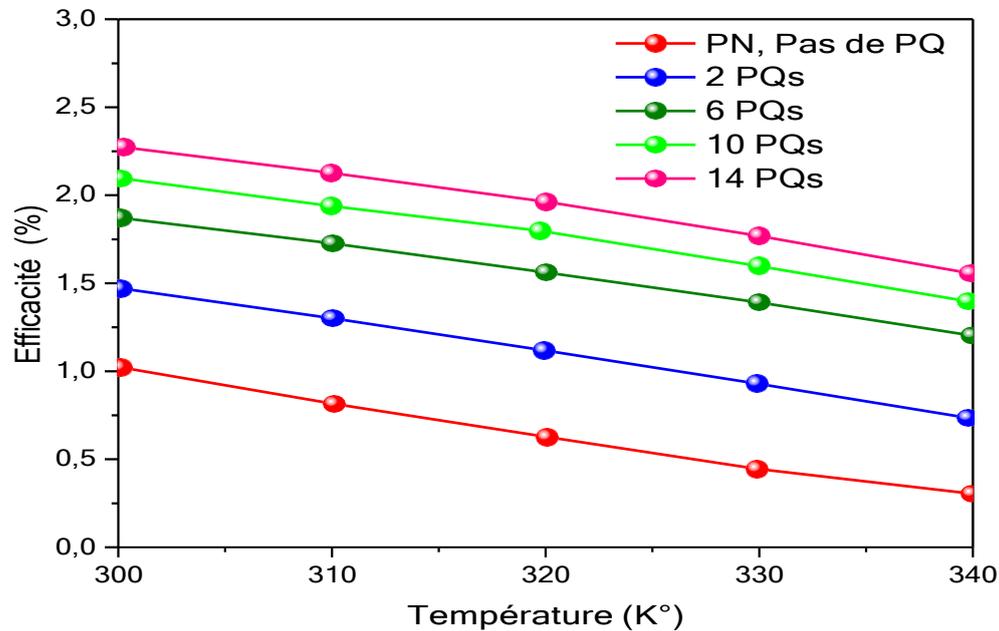


Figure 3.6 : l'effet de la température sur l'efficacité de la CS à base de NFs pin Si et $Si_{0.85}Ge_{0.15}/Si$ pour 2, 6, 10 et 14 puits quantiques [136].

3.2.2 Cellule Solaire à base de Nanofil Silicium avec l'intégration de Puits CIGS

Dans cette partie de travail nous nous sommes intéressés à la simulation d'une cellule solaire photovoltaïque, pour cela nous avons étudié l'influence de l'insertion des puits quantiques de CIGS dans un nanofil de Si pour différents paramètres caractéristiques de la cellule.

La figure 3.7 représente la structure d'un nanofil Si avec intégration de quatre couches de PQs de CIGS sur un substrat de Si. Les PQs de CIGS sont insérés dans la région intrinsèque, ils sont caractérisés par une épaisseur de 3 nm et une barrière de 8 nm.

Résultats et discussion

Au cours de cette partie de travail, nous avons utilisé les conditions de qualification des cellules solaires : un spectre solaire AM1.5 est une température de 300 K. Nous avons commencé la simulation de la CS p-i-n sans PQs. Par la suite, nous sommes passés à la simulation d'une CS à PQs CIGS/Si pour un nombre fixe de 8 couches afin de voir l'effet de l'insertion des PQs sur les paramètres caractéristiques de la cellule.

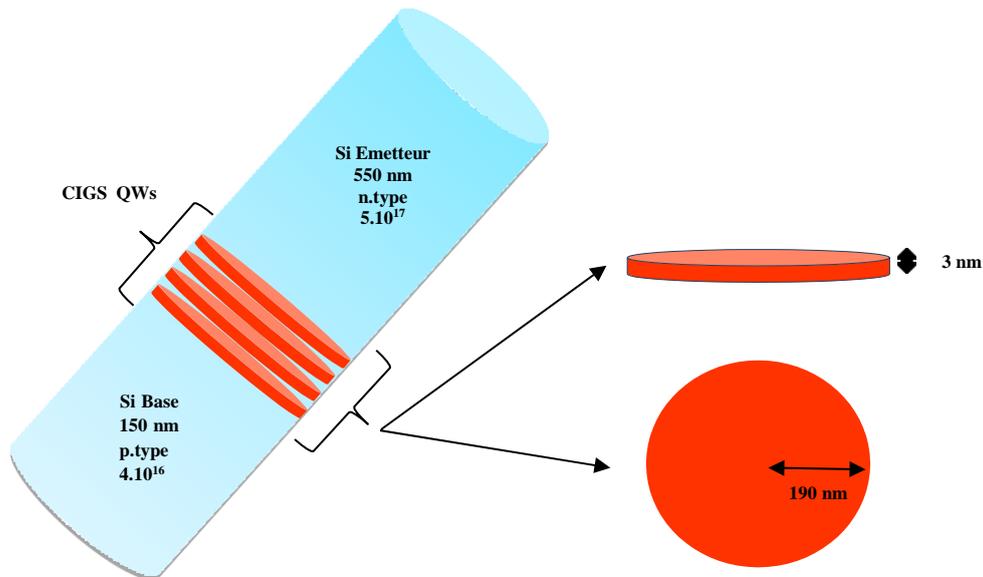


Figure 3.7 : Structure d'un NF à base de Si avec insertion de 4 puits quantiques de CIGS[137].

Ensuite nous sommes passés à la variation du nombre des PQs pour déterminer le nombre des PQs optimale qui nous donnent le meilleur rendement de la cellule. Pour chaque simulation, la caractéristique J-V, la courbe d'EQE et les paramètres caractéristiques importants d'une CS sont présentés et discutés.

La figure 3.8 illustre l'évolution de l'énergie de gap et de la déformation de la structure à PQs en fonction de la fraction molaire de l'Indium. Il est clair que l'énergie de gap augmente avec l'augmentation de la concentration x . D'autre part, on voit que la déformation diminue avec l'augmentation de x . Par conséquent, un bon compromis entre l'énergie du gap et la déformation doit être atteint à une certaine valeur optimale de x pour une bonne performance de la structure à PQs. Pour cela on a pris $x=0.1$ qui correspond à une contrainte de 4.85 % et une énergie du gap de 1.06 eV. La figure 3.9 représente l'efficacité quantique externe EQE prise en fonction de la longueur d'onde d'une CS **tout en prenant** deux structures de NFs Si : pin et avec insertion de 8 couches PQs CIGS dans la région Intrinsèque. Il est clair dans cette figure que l'EQE d'une CS à puits quantique prend des valeurs supérieures à partir de la longueur d'onde de 500 nm. L'EQE dans la gamme 500 nm à 1200 nm de la CS à PQs CIGS/Si avec 8 couches augmente d'une valeur de 7.12 % pour une longueur d'onde de 800 nm par exemple, ce qui signifie que les photons moins énergétiques dans cette plage de longueurs d'onde sont effectivement absorbés et ne sont pas perdus, donc ils ont contribué à la création de paires électron-trou.

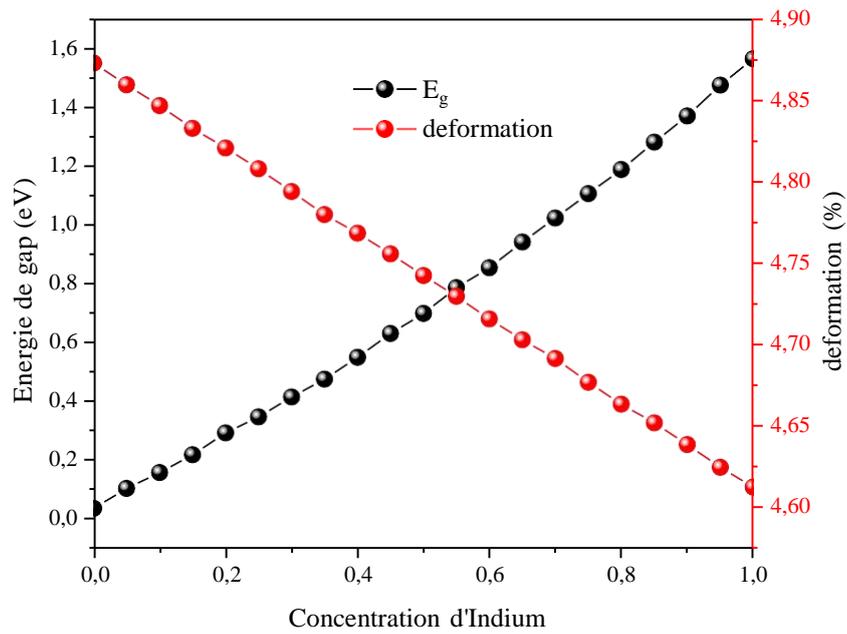


Figure 3.8 : variation de l'énergie de gap et de la déformation en fonction de la concentration d'indium [137].

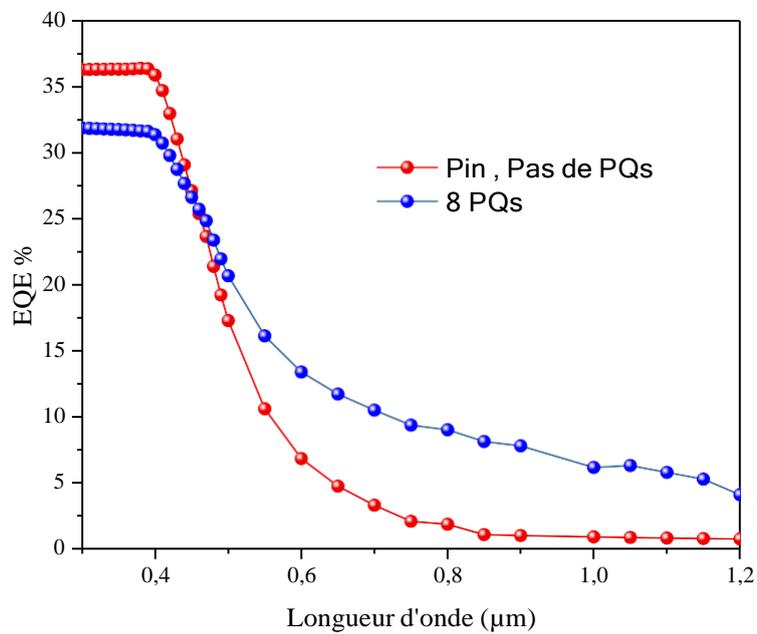


Figure 3.9 : EQE de la CS sans et avec 8 PQs CIGS/Si [137].

La figure 3.10 représente la caractéristique courant-tension I(V) d'une CS à base de NFs Si pin et d'une CS CIGS /Si par insertion de 8 puits.

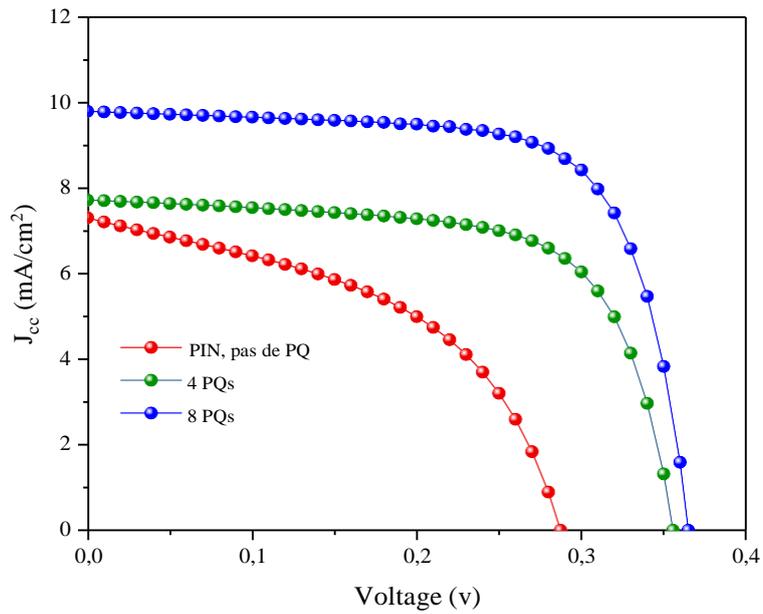


Figure 3.10 : Caractéristique J-V de la CS sans, avec 4 et 8 PQs CIGS/Si [137]

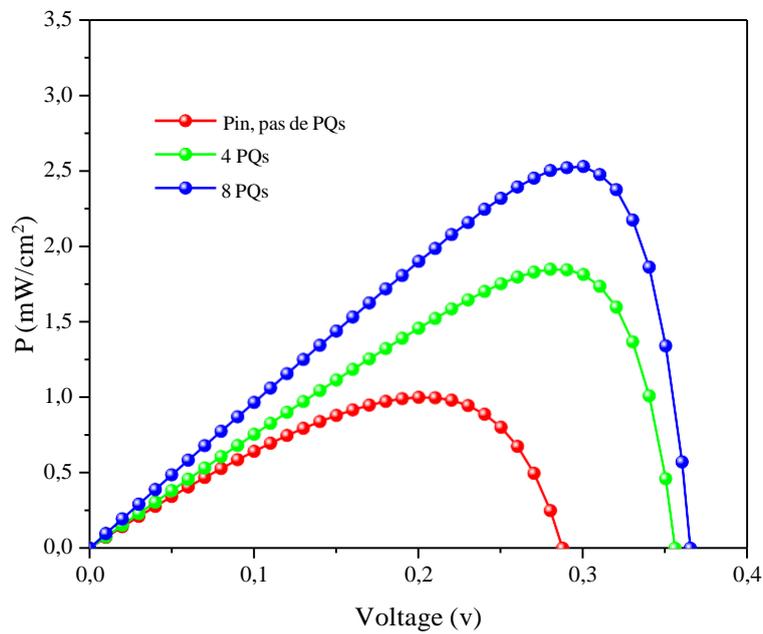


Figure.3.11 : Caractéristique P-V de la CS sans, avec 4 et 8 PQs CIGS/Si [137].

Comme on peut le voir, le courant de court-circuit et la tension de circuit ouvert augmente d'une valeur de 2.49 mA/cm² et de 0,08 V respectivement, avec l'insertion de 8

PQs. Cette amélioration entraîne un accroissement de la puissance délivrée par cette structure (Figure 3.11).

Après le choix de la concentration adéquate, ainsi qu'après avoir vu l'effet de l'insertion des PQs sur les caractéristiques de la cellule, nous sommes passés à la simulation de cellules solaires à base de NFs CIGS/Si par insertion de 2,4,6,8,10,12 et 14 puits quantiques respectivement, pour indiquer l'influence de l'introduction de ces derniers sur les différentes caractéristiques de la structure.

Les figures 3.12 et 3.13 représentent la variation des tensions de circuit ouvert et de Facteur de Forme ainsi que la variation du courant de court-circuit et du rendement d'une CS à base de nanofil Si pin et d'une CS CIGS /Si pour un nombre variable de PQs 2, 4, 6, 8, 10, 12 et 14 respectivement. Comme nous pouvons le voir, le V_{co} , le FF et J_{cc} augmentent d'une valeur de 9.22 mA/cm², 0.12 V et 25.90 % respectivement, lorsque le nombre de puits quantiques insérés augmente de 0 à 14 puits. Par conséquent, l'efficacité augmente d'une valeur de 2.17%, au-delà de ce nombre, l'efficacité conserve la même valeur. C'est le nombre de puits quantiques pour lequel nous avons la saturation.

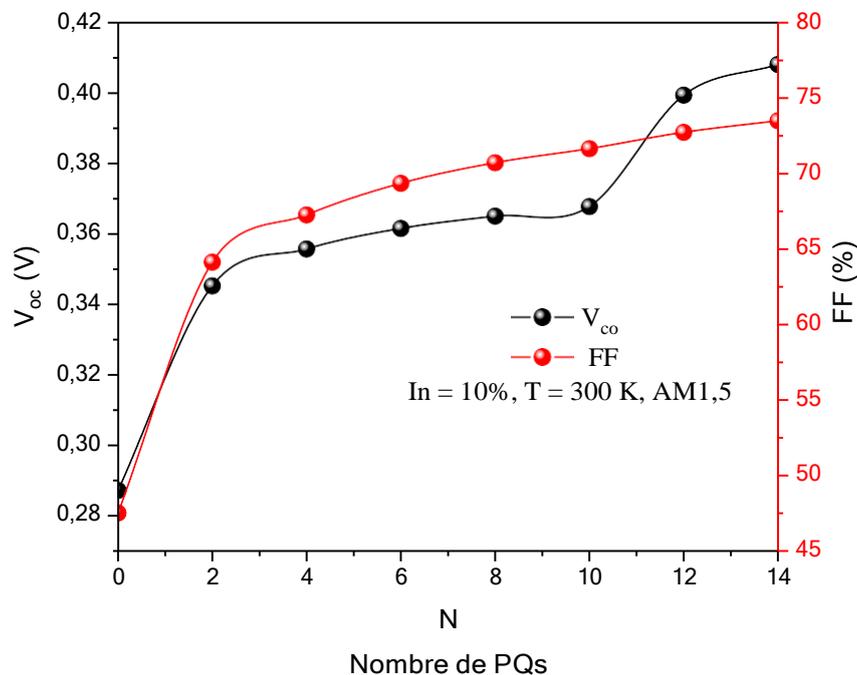


Figure 3.12 : variation des tensions de circuit ouvert et du Facteur de Forme de la CS pour un nombre variable de puits quantiques [137].

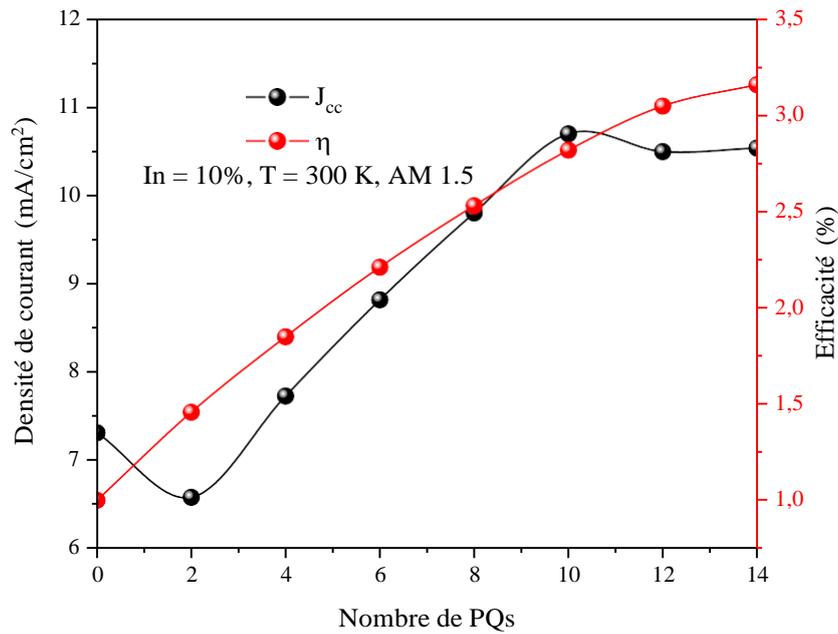


Figure 3.13 : Variation de la densité de courant et de l'efficacité de la CS pin Si et CIGS / Si pour un nombre variable de puits quantiques [137].

Tous les paramètres caractéristiques atteints sont listés dans le tableau (3.3).

Tableau 3.3 : Les paramètres caractéristiques de la CS pin Si et CIGS/ Si allant de 0 à 14 puits quantiques.

Nombre de PQs	J_{cc} (mA/cm ²)	V_{co} (V)	FF (%)	η (%)
0	7.374	0.280	50.54	1.04
2	7.243	0.330	62.69	1.48
4	7.258	0.348	68.72	1.73
6	8.812	0.361	69.34	2.21
8	9.796	0.365	70.68	2.53
10	10.691	0.367	71.62	2.82
12	10.489	0.399	72.69	3.04
14	10.530	0.407	73.46	3.16

3.3. Conclusion

Ce chapitre se concentre sur la simulation et l'optimisation de deux structures de cellules solaires à nanostructures, basées sur des NFs en utilisant deux matériaux différents. À la suite de ces simulations, nous avons démontré l'efficacité des NFs pour améliorer les performances électriques et optiques d'une CS classique, ainsi que pour sélectionner les matériaux de nanostructures et les barrières les plus appropriés.

Nous avons observé que l'utilisation du silicium en tant que matériau pour les barrières et les substrats s'avère être un choix judicieux pour la fabrication de cellules solaires à nanostructures quantiques. Ceci est attribué à sa facilité de croissance sur silicium ainsi qu'à ses propriétés exceptionnelles. En ce qui concerne les matériaux de nanostructures, notre étude sur le germanium a révélé son utilité en tant que matériau pour les puits quantiques, en les intégrant dans une matrice de silicium. Nous avons obtenu un rendement de conversion de 2.28 % pour 14 couches de puits quantiques insérés.

De plus, notre investigation sur le matériau quaternaire CIGS (cuivre, indium, gallium, sélénium) a montré que ce matériau peut également être utilisé comme matériau pour les puits quantiques, conduisant à un rendement de conversion de 3.16 % pour 14 couches de puits quantiques. Dans le prochain chapitre, nous présenterons en détail les résultats de la première structure étudiée dans cette recherche, en analysant d'autres paramètres qui influencent le rendement de notre structure.

4.1 Introduction

Dans ce chapitre nous allons continuer dans la modélisation et la simulation de structures avec insertion de PQs, où nous allons étudier l'effet de l'incorporation de ce dernier dans la région intrinsèque, sur les performances électriques de notre structure, afin de déterminer les résultats optimaux des différents éléments constituant l'alliage.

Ce travail vient apporter de nouveaux résultats par rapport à une ancienne structure déjà étudiée, plusieurs changements ont été explorés, afin de mener ce travail à satisfaction.

Pour cela une étude approfondie a été menée, ou plusieurs caractéristiques ont été évaluées, nous avons entamé le travail, par l'évaluation d'une CS à base d'un seul nanofil sans incorporation de puits quantiques, puis nous nous sommes focalisés sur l'intégration de PQs, afin d'améliorer la qualité du rendement de la cellule, enfin nous allons consolider notre travail par la détermination d'autres paramètres, et à la fin nous allons valider ce travail par la comparaison de ce dernier à une étude expérimentale.

4.2 Cellules solaires à base de Nanofil de Si

Comme nous l'avons cité dans le chapitre précédent, au cours de tous nos simulations, nous avons utilisé les conditions standards de qualification des cellules solaires : un spectre solaire AM1.5G est une température de 300 K.

4.2.1 Cellule Solaire à base de NF avec insertion de PQs Si/SiGe

Dans cette partie de travail, nous nous concentrons sur les NFs grâce à leurs applications potentielles à la récupération d'énergie solaire. Récemment, d'énormes efforts de recherche ont été lancés pour trouver de nouvelles architectures offrant une efficacité de conversion élevée. La présente étude utilise le matériau Si, dont la structure est de type diamant appartenant à la colonne IV du tableau périodique [138]. Ce matériau est connu pour être l'élément chimique le plus abondant sur terre après l'oxygène, idéal pour la production d'énergie photovoltaïque [139]. Aussi, l'alliage $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, connu pour ses propriétés électroniques et optiques intéressantes. Il est devenu un matériau favorable pour les puits quantiques, ce qui a été récemment prouvé. En comparant une CS p-i-n à base de Si avec insertion de 80 couches de puits quantiques SiGe avec une CS p-i-n à base de Si, il a été constaté que le courant de court-circuit J_{cc} augmente de 23,55 à 37,48 mA/cm² avec une augmentation relative de 59,15 % [140]. Ce dernier joue un

rôle clé dans l'amélioration des performances de dispositifs microélectroniques et optoélectroniques [141].

Dans ce but, nous avons proposé une nouvelle structure de Si-NFs p-i-n connue pour ses performances structurales ainsi que pour ses propriétés physiques intéressantes, qui a été prouvée récemment [142]. Cette structure comprenant des puits quantiques SiGe (NWQWs), a fait l'objet d'un précédent rapport [143]. Les NFs à base de silicium se caractérisent également par l'émergence de nouvelles applications potentielles dans plusieurs domaines tels que l'élaboration de composants électroniques, dispositifs photovoltaïques, capteurs biochimiques ou mécaniques, dans le domaine médical pour l'imagerie, mais aussi pour la thermoélectricité [144,145]. Dans cette étude, les caractéristiques structurales d'une CS à puits quantique SiGe/Si sont étudiées et optimisées, dans le but de montrer l'effet de la concentration en germanium et du nombre de QW sur les caractéristiques importantes d'une CS Si-Nanofil : densité de courant (J-V), tension d'alimentation (P-V) et efficacité quantique (QE).

4.2.1.1 Résultats et discussions

Tout d'abord, nous avons commencé la simulation en faisant varier la concentration en germanium afin de choisir la valeur appropriée, qui nous permettra d'obtenir les meilleures performances de la cellule en utilisant un nombre fixe de puits quantiques (4 PQs). Ensuite, nous nous intéressons à la variation du nombre de PQs insérés dans la région intrinsèque des NFs Si p-i-n afin d'étudier l'influence de leur intégration sur différentes caractéristiques de la cellule. Nous avons également renforcé cette étude en déterminant l'EQE et les coefficients d'absorption. De plus, la variation du rayon et de la température sont également discutées; les résultats de la simulation sont fournis ci-dessous.

La figure 4.1 montre la structure de la CS basée sur un seul nanofil de silicium (Fig 4.1) avec (a) nanofil simple Si p-i-n avec insertion de PQs $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ dans la région intrinsèque, (b) diagramme de bande d'énergie d'une CS à NF et (c) l'effet de confinement de la structure proposé). Le nanofil a un rayon de 190 nm et une longueur variable selon le nombre de puits quantiques insérés, ce dernier à une longueur de 3 nm suivi d'une barrière de 8 nm de longueur. La figure 1(c) montre l'effet de confinement, c'est-à-dire le phénomène d'états d'énergie créés par l'insertion des puits. Ce phénomène peut conduire à l'absorption de photons de basse énergie, car les puits intégrés provoquent la formation de sous-couches, d'où une meilleure absorption.

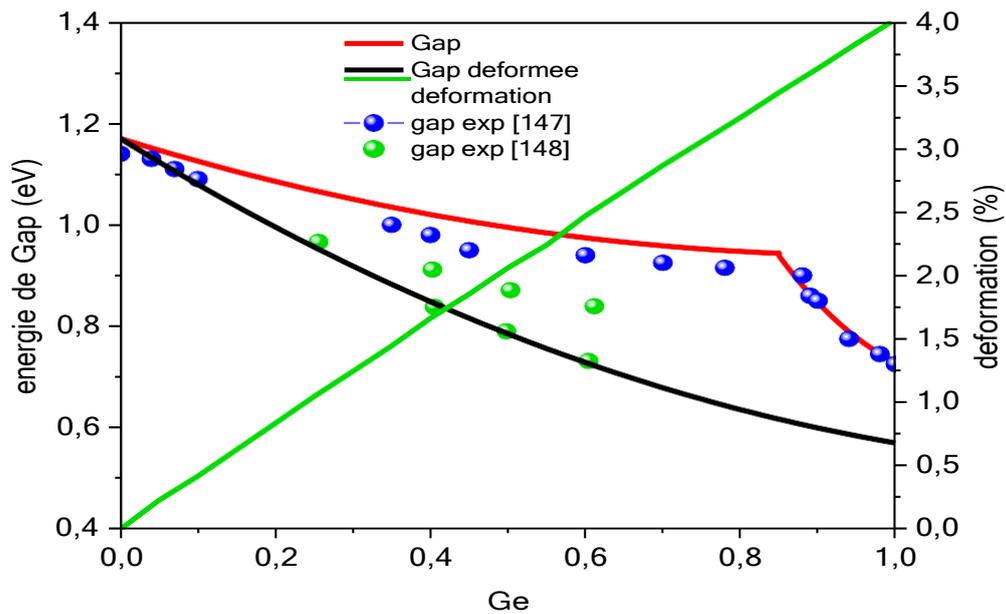


Figure 4.2 : Variation de l'énergie de la bande interdite et de la déformation en fonction de la concentration en germanium. [146]

Comme le montre la figure, lorsque la concentration en germanium augmente, d'une part l'énergie de la bande interdite diminue et d'autre part la déformation augmente. Par exemple, l'énergie de la bande interdite diminue de 1,17 à 0,58 eV et la déformation augmente de 0,02% à 4%, lorsque la concentration en germanium passe de 0 % à 100 %.

De plus, on constate qu'il n'y a qu'une seule déformation (en compression) quelle que soit la concentration en germanium. Pour cela, on va faire varier la concentration en germanium dans l'intervalle $\{0, 1\}$, afin de déterminer la meilleure valeur de concentration en germanium qui donne les meilleures performances. La figure 4.3 montre la variation de l'épaisseur critique en fonction de la concentration en germanium, les deux courbes en noir et rouge représentent nos résultats, les autres courbes (bleu, vert et magenta) représentent les résultats expérimentaux calculés par [149 -151], respectivement

Comme le représente la figure 4.3, l'augmentation de la concentration en germanium provoque une diminution de l'épaisseur critique quel que soit le modèle utilisé. A titre d'exemple, et en utilisant le modèle de Fisher, une concentration de germanium de 10 % nous donne un h_c égal à 4298Å, cependant l'expérimental (courbe bleue) produit un h_c de 9418 Å

[149], et pour $x=50\%$ l'épaisseur critique est de 674 et 104 Å, donc, il a diminué d'une valeur de $\Delta h_c=3624$ et 9314 Å respectivement.

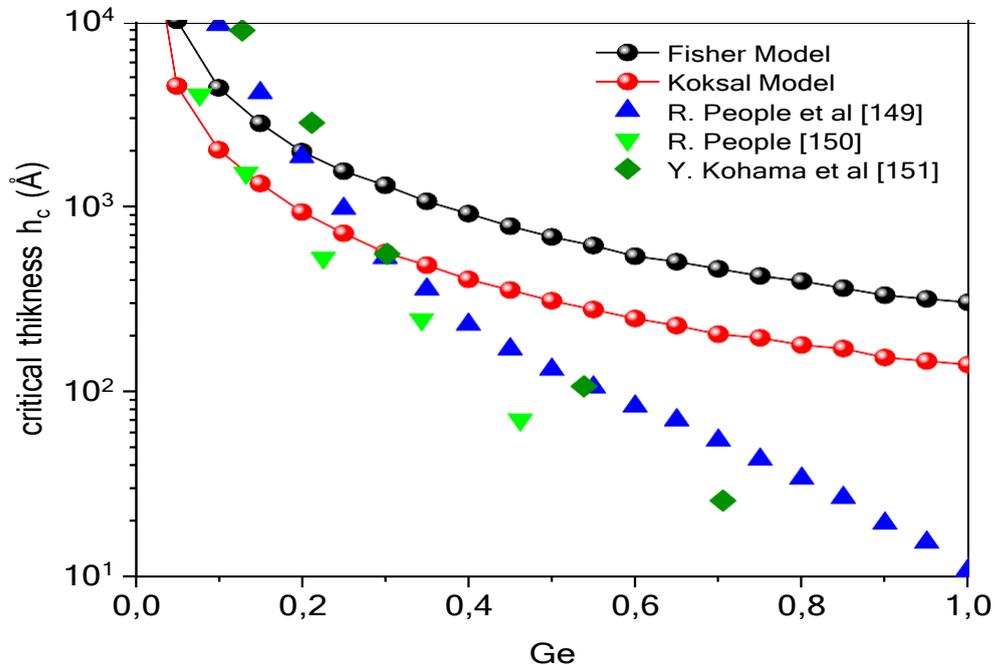


Figure 4.3 : Variation de l'épaisseur critique en fonction de la concentration en germanium [146].

D'après cette simulation, on constate que l'alliage SiGe peut être facilement mis à croître sur le substrat Si, car l'épaisseur critique reste importante (supérieure à 100Å) et les techniques d'épitaxie permettent de faire croître une couche mince inférieure à 80Å [152].

La figure 4.4 montre la variation du coefficient de réflexion en fonction de la concentration en germanium. Comme on peut le voir sur cette figure, le coefficient de réflexion pour les cas non contraint et contraint augmente avec l'augmentation de la concentration de germanium. Par exemple, le coefficient de réflexion dans le cas contraint augmente d'environ 0,025, tandis que le coefficient de réflexion dans le cas non contraint augmente de 0,594 à 0,613, lorsque la concentration en germanium augmente de 5 % à 95 %. Ce paramètre optique prouve une fois de plus que l'augmentation de la concentration entraîne une augmentation de la réflexion et donc une diminution de l'absorption, ce qui est défavorable aux applications photovoltaïques, c'est pourquoi nous privilégions les faibles concentrations.

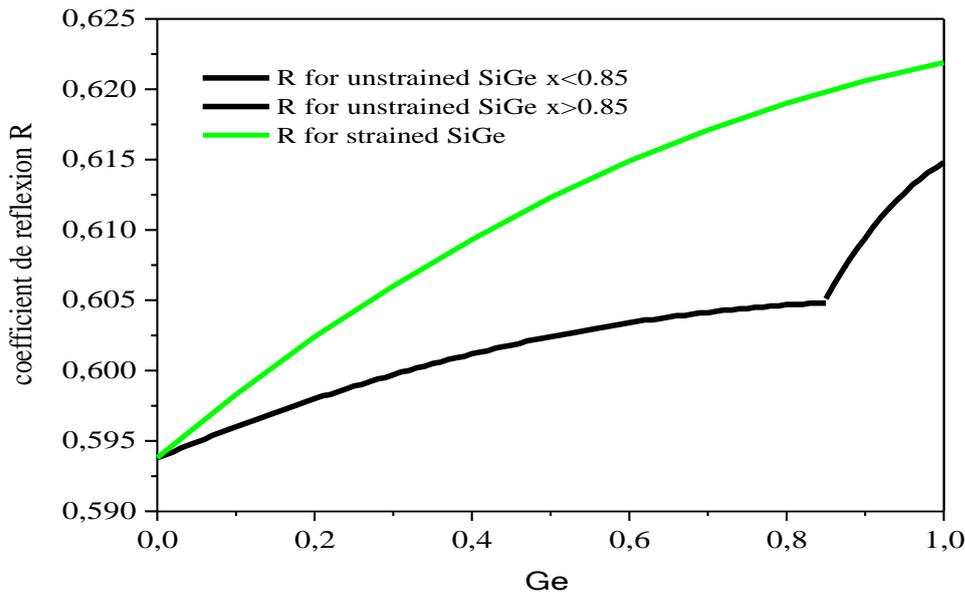


Figure 4.4 : Variation du coefficient de réflexion en fonction de la concentration en germanium [146].

La figure 4.5 (a) représente le diagramme de bande d'énergie de la CS comprenant des PQs SiGe/Si, pour cette structure nous avons un alignement de type II. Dans ce type d'alignement, les électrons sont confinés dans un matériau (matériau PQ), tandis que les trous sont confinés dans l'autre matériau (matériau barrière). Cette structure permet d'améliorer les systèmes photovoltaïques [153].

La figure 4.5 (b) illustre le diagramme d'énergie d'un seul puits quantique SiGe. Il ressort de cette figure que l'alignement des bandes est de type II et que la discontinuité de la bande de conduction est très faible de quelques meV par rapport à la bande de valence [154]. Ce diagramme nous a permis de calculer les énergies de transition entre ces états pour la structure étudiée. Les figures 5(c) et 5(d) illustrent la variation de l'énergie de quantification des trous lourds et de l'énergie de transition en fonction de la largeur du puits quantique pour les deux niveaux 1 et 2. Celles-ci montrent que les énergies de quantification et de transition diminuent de manière modérée, où l'on remarque que pour le premier niveau de trous, une réduction de 0,014 eV pour une largeur de puits quantique variant de 10 nm à 30 nm.

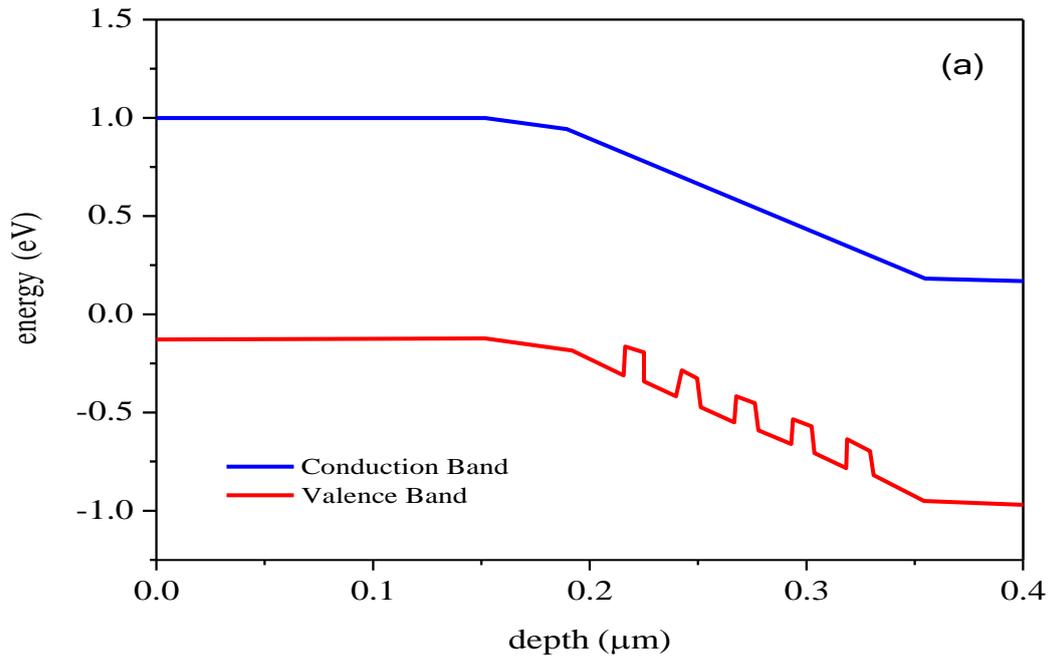


Figure 4.5 (a) Diagramme de bande d'énergie d'un nanofil Si avec insertion de PQs SiGe/Si.

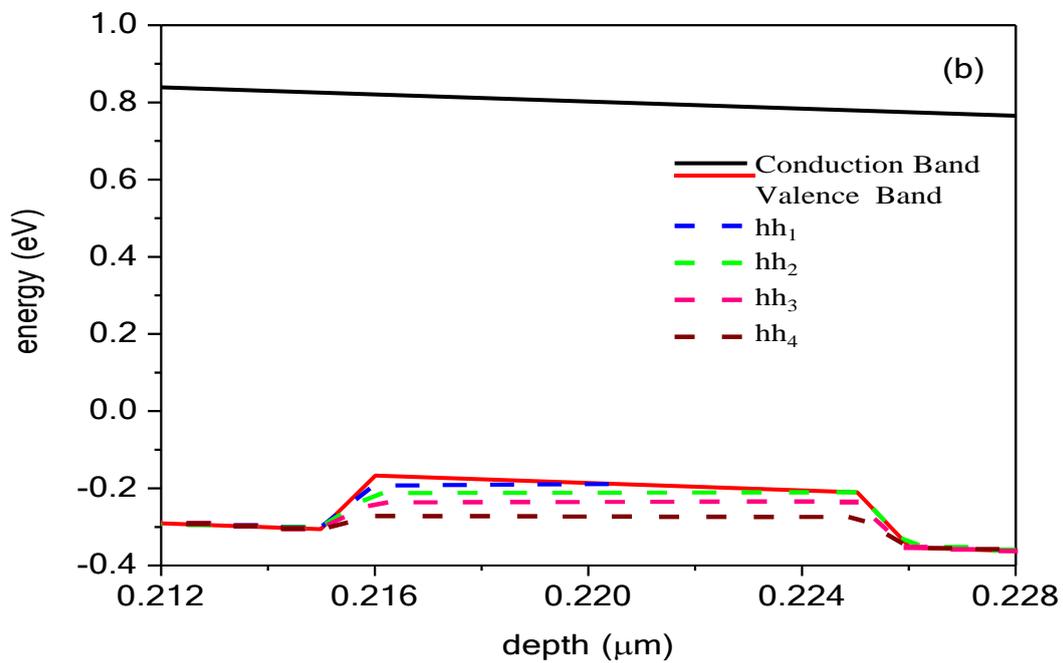


Figure 4.5 (b) Diagramme de bande d'énergie d'un seul puits quantique de SiGe.

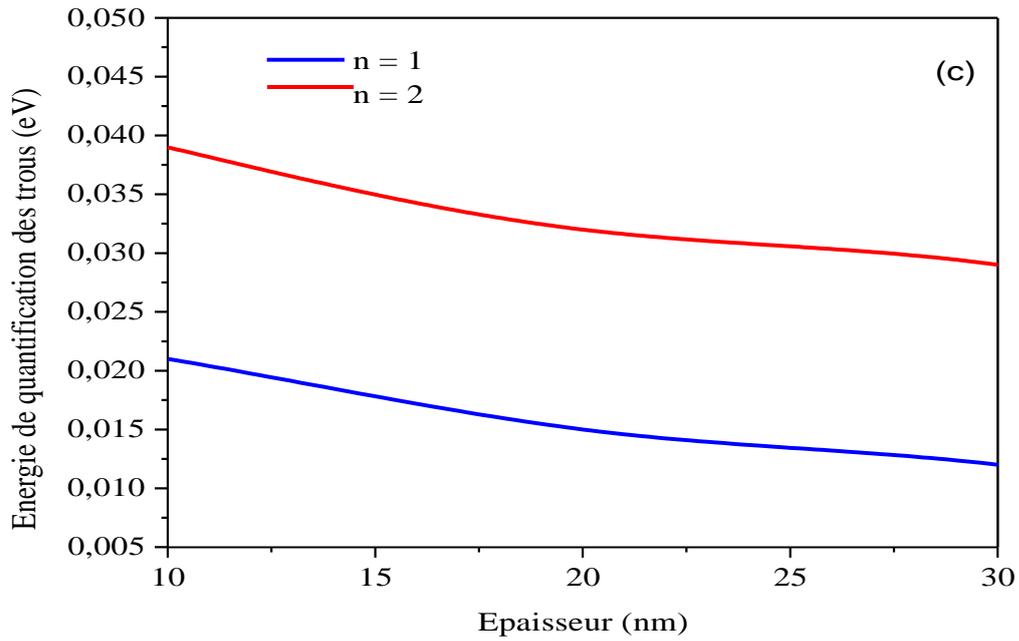


Figure 4.5 (c) énergie de quantification des trous en fonction de l'épaisseur.

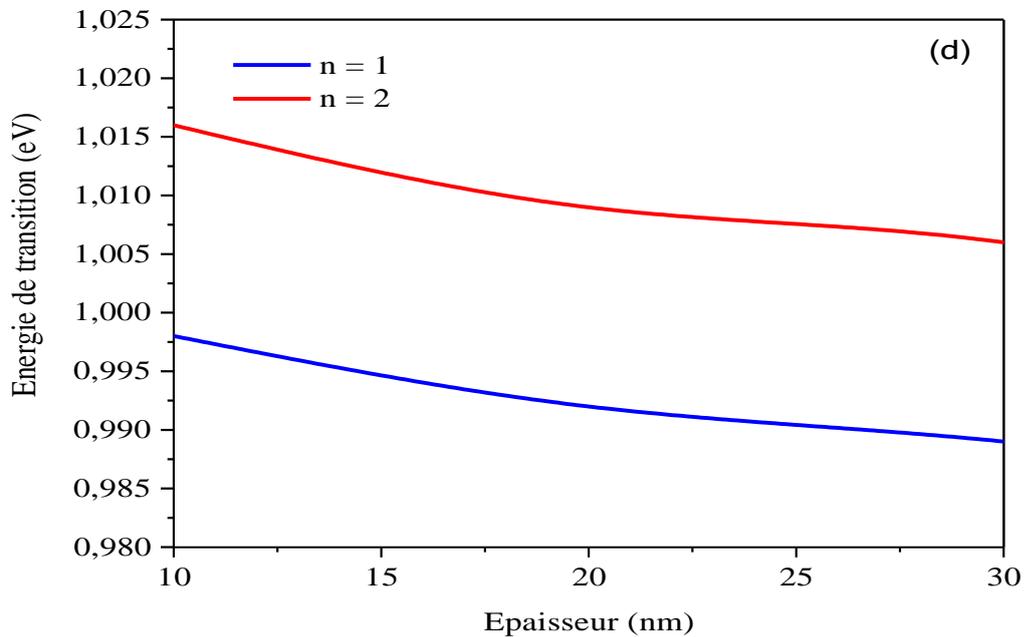


Figure 4.5 (d) énergie de transition en fonction de l'épaisseur [146].

Nous pouvons conclure que le potentiel de confinement électronique est plus important pour les petits PQs. En effet, ce dernier modifie les états énergétiques des PQ de différentes

tailles. Nous observons également que le potentiel de confinement électronique est plus profond, ce qui est lié à la déformation hydrostatique [155].

La figure 4.6 montre la réponse spectrale en fonction de la longueur d'onde pour une seule CS à base de NFs de Si sans PQ et avec l'insertion de 4 PQ, respectivement. Il est clair que l'EQE d'une CS p-i-n tend vers zéro à la longueur d'onde de 1120 nm. Il a également été remarqué que l'élargissement du spectre est étendu de 1120 nm à 1200 nm par rapport à la CS p-i-n, en raison de l'introduction des PQs. Dans cette gamme de longueurs d'onde, l'EQE augmente de 5 % lorsque le nombre de PQs augmente de 0 à 4 ; cela signifie que les photons dans cette gamme de longueurs d'onde sont efficacement absorbés et qu'ils ont donc contribué à la création de paires électron-trou. De plus, nous avons une autre amélioration dans la gamme de 300 à 600 nm, cette amélioration peut s'expliquer par l'effet de l'incorporation des puits quantiques dans la zone intrinsèque, cette inclusion augmente la largeur de la région d'appauvrissement qui à son tour augmente le champ électrique et facilite le transport de porteur de charge.

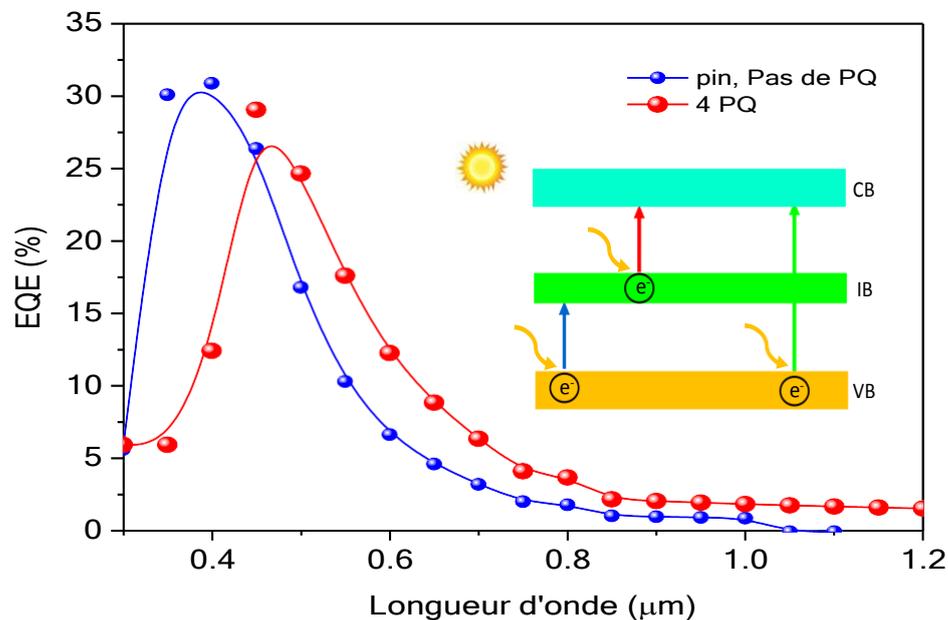


Figure 4.6 : Efficacités quantiques externes en fonction de la longueur d'onde pour 0 et 4 PQ [146].

La figure 4.7 montre la caractéristique de densité de courant (J-V) d'une CS à base de NFs de Si avec insertion de 4 QW pour différentes concentrations de germanium. Comme nous

pouvons le voir, la densité de courant de court-circuit (J_{sc}) diminue avec l'augmentation de la concentration de germanium.

Cette diminution entraîne une diminution de la puissance délivrée par la structure proposée (Figure 4.8). Par conséquent, la différence de densité de courant et de densité de puissance des deux structures est $\Delta J_{cc}=4,33 \text{ mA/cm}^2$ et $\Delta P = 1,46 \text{ mW/cm}^2$, respectivement, en comparant notre structure pour une concentration de 5 % avec celle de 85 %. Par conséquent, l'efficacité diminue d'un facteur 5,71.

Le tableau 4.1 résume toutes les principales caractéristiques de la CS SiGe/Si QWNW obtenues dans cette simulation pour différentes concentrations de germanium. Après cette simulation, nous fixons la concentration en germanium à 5%, ce qui nous donne les meilleurs résultats.

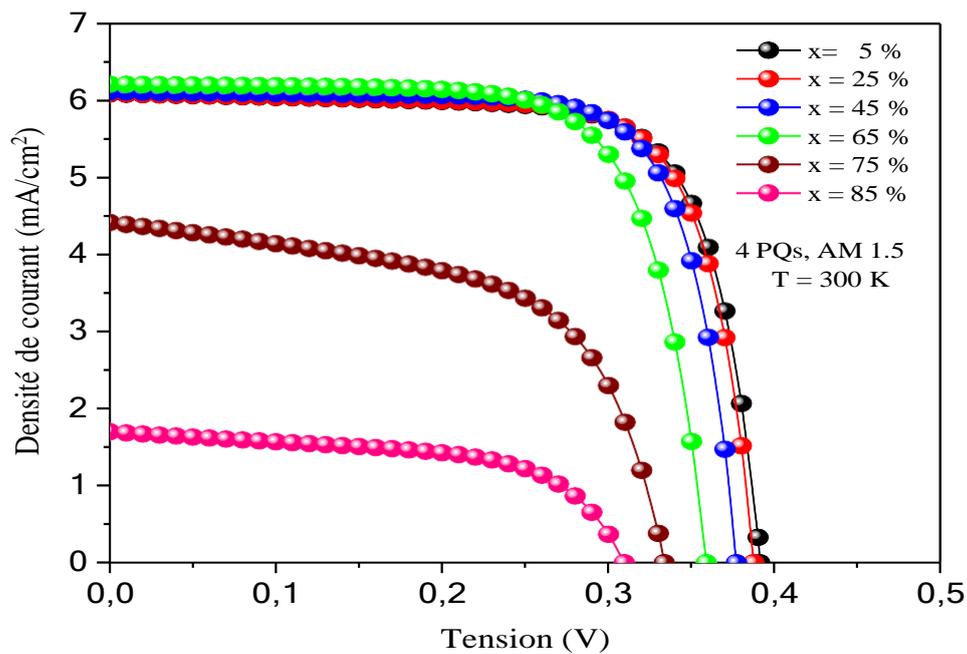


Figure 4.7 : Caractéristique J-V d'un nanofil de Si avec insertion de 4 PQs [146].

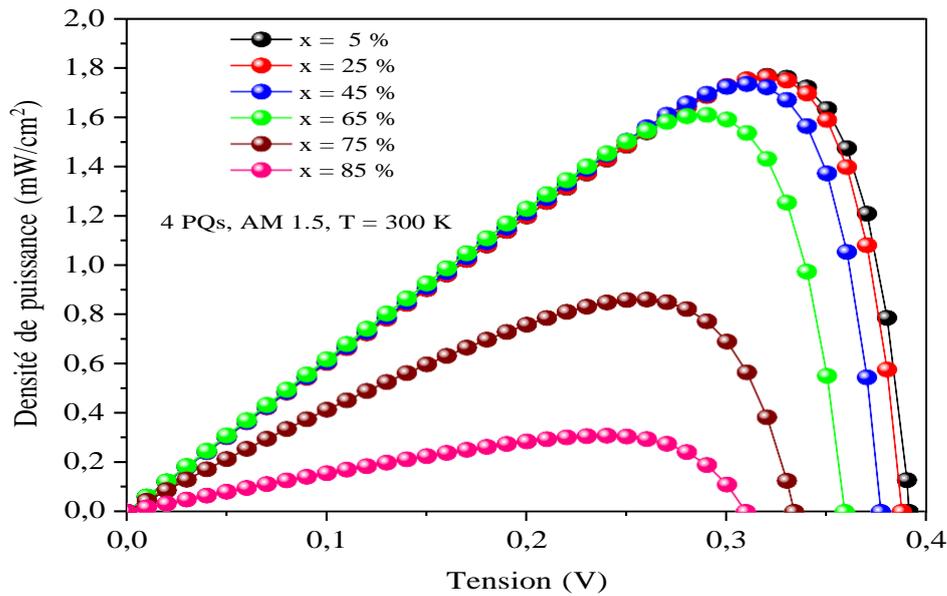


Figure 4.8 : Caractéristique P-V d'un nanofil de Si avec insertion d'une CS à base de 4 PQs en fonction de la concentration en germanium. [146].

Tableau 4.1 : Caractéristiques électriques de CS de nanofil avec insertion de 4 PQs de SiGe/Si pour différentes concentrations de Germanium.

Concentration de Ge(x)	5 %	25 %	45 %	65 %	85 %
J_{cc} (mA/cm ²)	6.08	6.084	6.10	6.21	1.70
V_{co} (V)	0.391	0.39	0.38	0.63	0.31
FF (%)	74.21	74.70	75.24	72.16	58.63
η (%)	1.77	1.76	1.73	1.61	0.31

La figure 4.9 montre l'effet de la température et de la concentration de germanium sur l'efficacité de conversion pour 4 PQ insérés dans la région intrinsèque du nanofil. Comme on peut le voir sur cette figure, l'augmentation de la température en fonction de la concentration en germanium conduit à une diminution du rendement. Il y a une diminution relative de 1,87 % de l'efficacité, lorsque la concentration passe de 0,05 à 0,55. On peut expliquer cette diminution par l'augmentation de la déformation de la structure étudiée. Par exemple, la différence de déformation de cette structure est $\Delta \leq 6,58$ %, lorsque la concentration en germanium passe de $x = 0,05$ à $x = 0,55$.

Selon cette simulation, nous pouvons à nouveau confirmer une valeur de concentration adéquate égale à 5 %.

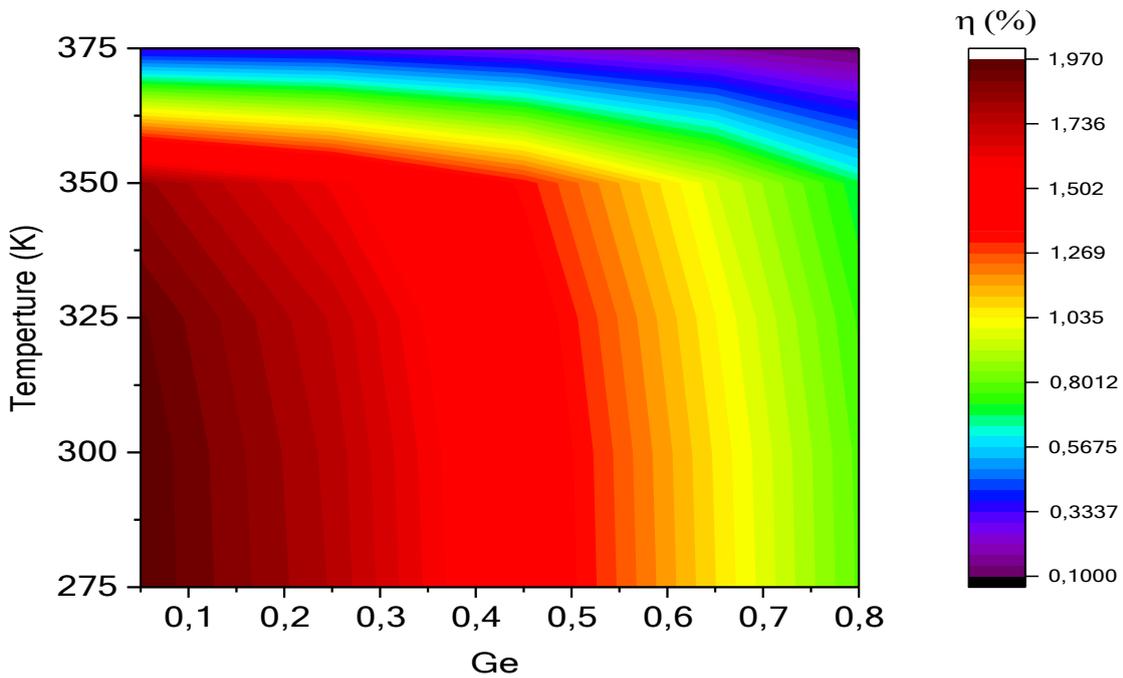


Figure 4.9 : Variation du rendement en fonction de la concentration en germanium et de la température [146].

La figure 4.10 montre la variation de la tension en circuit ouvert (V_{co}) et du rendement en fonction de la concentration en germanium, pour 4 PQs

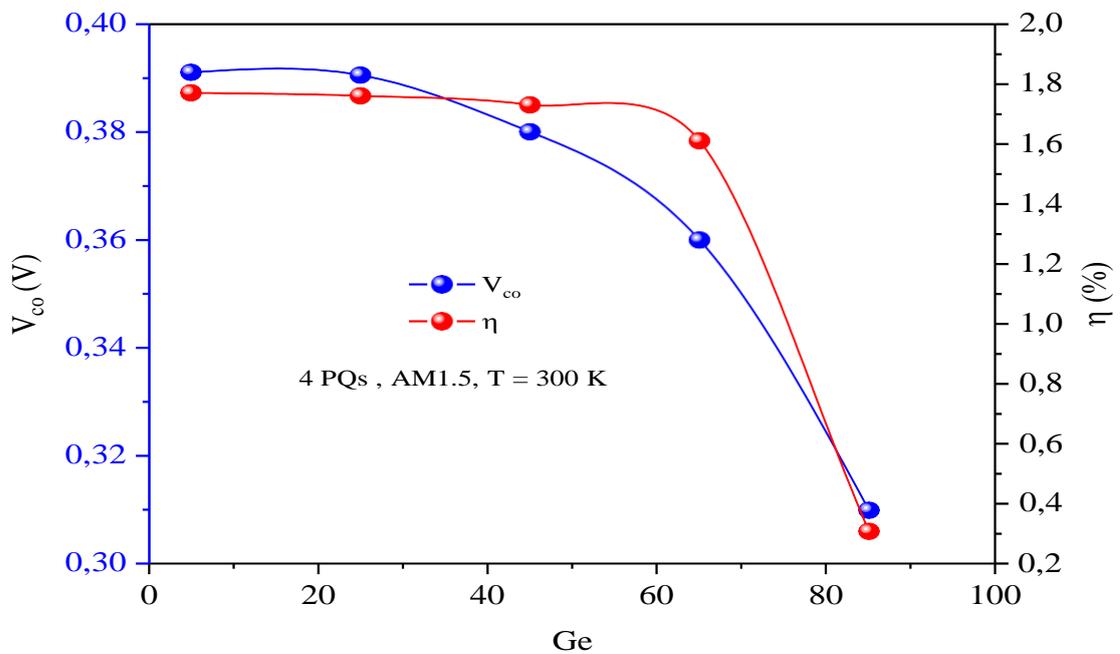


Figure 4.10 : Variation de la tension en circuit ouvert et du rendement en fonction de la concentration en germanium pour 4 PQs [146].

La figure montre que l'augmentation de la concentration en germanium de 0,05 à 0,85 entraîne une diminution relative de 17,51 % du rendement de conversion et d'environ 8,1 % de la tension en circuit ouvert.

La figure 4.11 montre l'évolution de l'efficacité quantique externe (EQE) en fonction de la longueur d'onde pour les trois structures, Si p-i-n Nanowire, 8 QWs et 14 QWs. On peut voir que la structure à 14 PQs représente une meilleure efficacité que celle de p-i-n et 8 QW sur toute la gamme de longueurs d'onde [0,3-1,2] μm . Par exemple, à une longueur d'onde de 600 nm, la différence entre les EQE des deux structures (0 PQ et 14 PQs) est $\Delta\text{EQE} = 6,14 \%$.

Cela signifie que le l'insertion des PQs dans la région intrinsèque des NFs est utile pour la CS pour absorber les photons de faible énergie. De plus, il peut y avoir une optimisation supplémentaire dans la plage de longueurs d'onde de 300 nm à 450 nm. Ce résultat peut s'expliquer par le nombre croissant de couches PQs provoquant une augmentation de l'épaisseur de la région intrinsèque de la CS p-i-n.

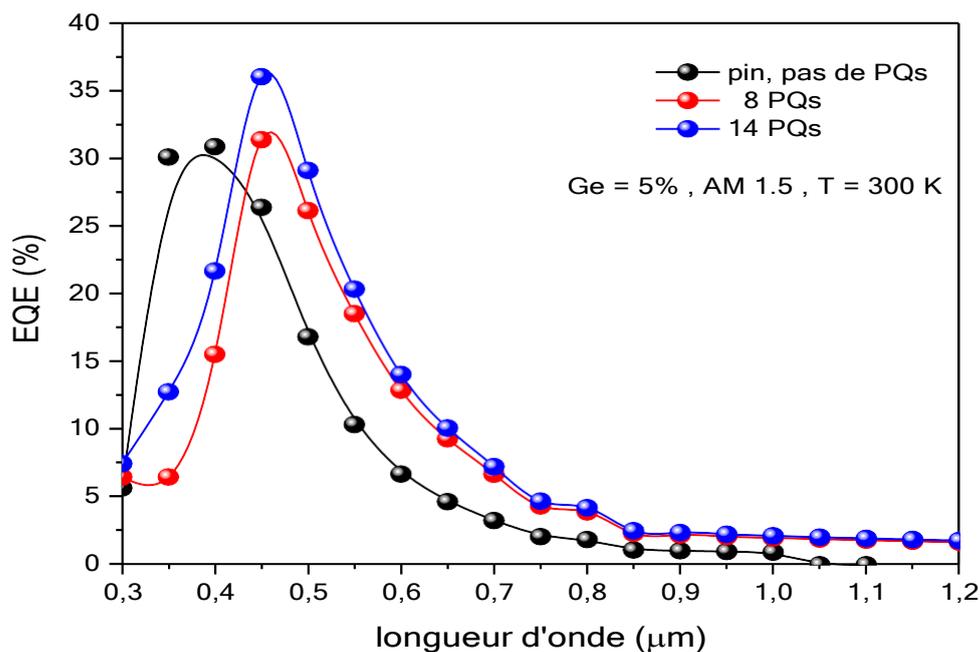


Figure 4.11 : Variation de l'EQE en fonction de la longueur d'onde pour 0, 8 et 14 PQs [146].

La figure 4.12 représente la variation du coefficient d'absorption en fonction de la longueur d'onde pour les trois structures de NFs Si p-i-n, 8 QWs et pour 14 QWs insérées dans la région intrinsèque du nanofil Si p-i-n. Cette figure confirme l'importance de l'insertion de PQs pour l'absorption des photons de basse énergie, comme le montre la figure précédente.

Pour cela, la structure à 14 PQs a un coefficient d'absorption plus élevé que la structure p-i-n à 8 PQs, sur toute la gamme de longueur d'onde. Par exemple, la différence (entre les deux structures à 400 nm) est $\Delta\alpha = 1.523.103 \text{ cm}^{-1}$. Comme décrit ci-dessus, le but principal de l'insertion de PQ est d'absorber des photons de faible énergie, ce qui signifie que ces photons contribuent à la création de paires électron/trou et nous mène à l'augmentation du courant fourni par la cellule.

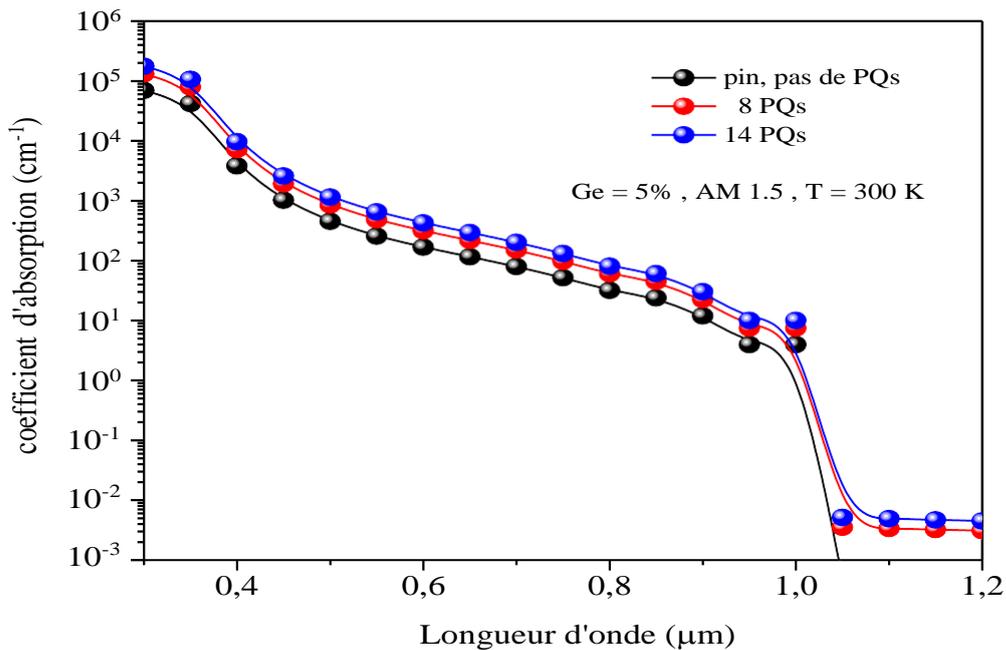


Figure 4.12 : Variation du coefficient d'absorption en fonction de la longueur d'onde pour trois valeurs de puits quantiques 0, 8 et 14 [146].

La figure 4.13 montre la caractéristique J-V d'une CS à base de NFs Si p-i-n et d'une CS $\text{Si}_{0,95}\text{Ge}_{0,05}/\text{Si}$ pour un nombre différent de PQs insérés dans la région intrinsèque. Comme nous pouvons le voir, la densité de courant augmente à mesure que le nombre de PQs insérés augmente. Cette amélioration se traduit par une augmentation de la puissance délivrée par cette structure. Par conséquent, la différence de densité de courant et de densité de puissance des deux structures est $\Delta J_{sc} = 1,46 \text{ mA/cm}^2$ et $\Delta P = 0,52 \text{ mW/cm}^2$, respectivement, en comparant notre structure à 14 PQs avec celle du nanofil Si p-i-n. Par conséquent, l'efficacité est augmentée d'un facteur de 1,37. Le tableau 4.3 résume toutes les caractéristiques principales de la CS SiGe/Si QWNW obtenue dans cette simulation pour un nombre variable de PQs insérés. Après cette simulation, il a été constaté que les meilleurs résultats sont donnés pour 14 QW, ainsi, nous avons fixé le nombre de puits quantiques à 14.

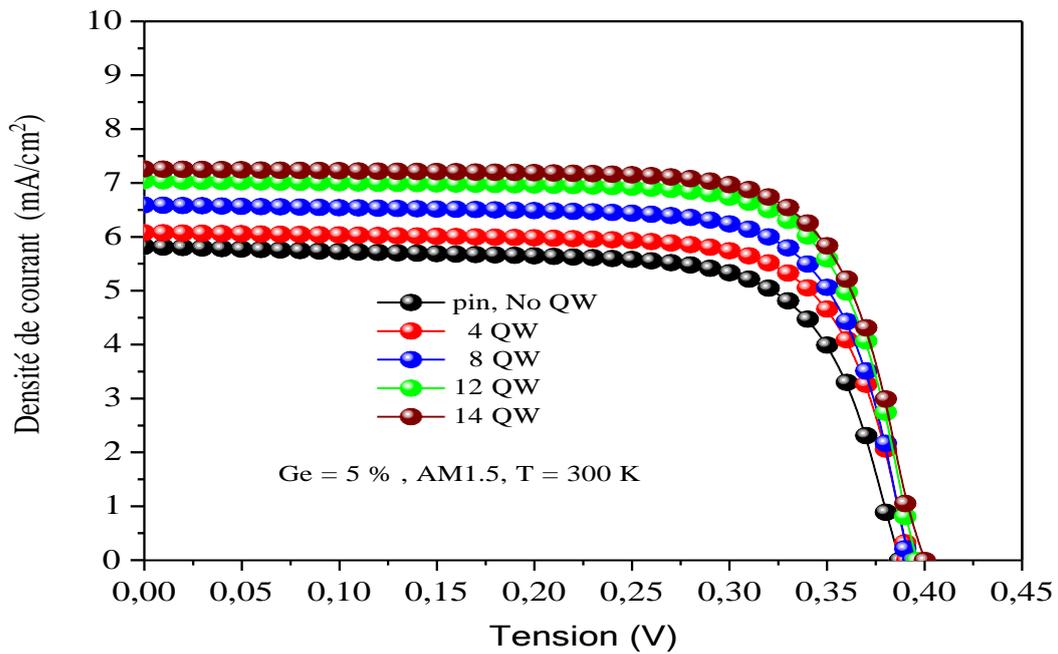


Figure 4.13 : Caractéristique I-V d'une CS à base de NFs Si p-i-n et d'une CS $\text{Si}_{10.95}\text{Ge}_{0.05}/\text{Si}$ pour différents nombres de PQs insérés dans la région intrinsèque [146].

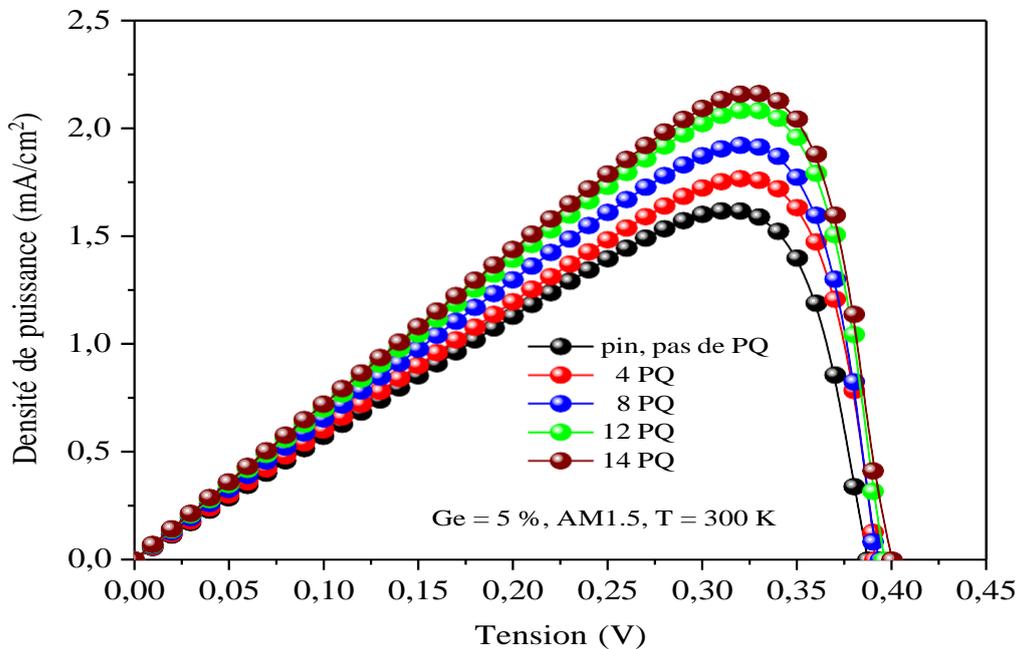


Figure 4.14 : Caractéristique P-V d'une CS à base de NFs Si p-i-n et d'une CS $\text{Si}_{10.95}\text{Ge}_{0.05}/\text{Si}$ pour différents nombres de PQs insérés dans la région intrinsèque [146].

La figure 4.15 présente les résultats de la comparaison et de la validation, les graphes noir et rouge sont déjà expliqués dans la figure 4.10 pour les NFs Si p-i-n et pour les 14 PQs insérés, respectivement. Les courbes bleu et vert sont issus de deux études précédemment validées [156] and [157] ; ces courbes représentent la densité de courant d'un seul nanofil de Si dans les mêmes conditions de notre simulation.

Nous pouvons voir que notre structure a un J_{cc} et un V_{co} plus élevés par rapport à ceux des NFs de Si expérimentaux. Une différence de ΔJ_{cc} est égale à 2,3 mA/cm² (en comparant la courbe rouge à la courbe bleue), et ΔJ_{cc} = 2,6 mA/cm² (en comparant le graphe rouge au graphe vert), une amélioration du J_{cc} expérimental est présentée dans cette partie. Alors que ΔV_{co} = 0,17 V (courbe rouge avec courbe bleue) et ΔV_{co} = 0,097 V (courbe rouge avec courbe verte). En revanche, la structure avec 14 PQs présente la valeur la plus élevée de J_{cc} et V_{co} par rapport au nanofil Si p-i-n simulé et celui du nanofil expérimental. Ceci montre l'intérêt de notre étude par intérim d'efficacité.

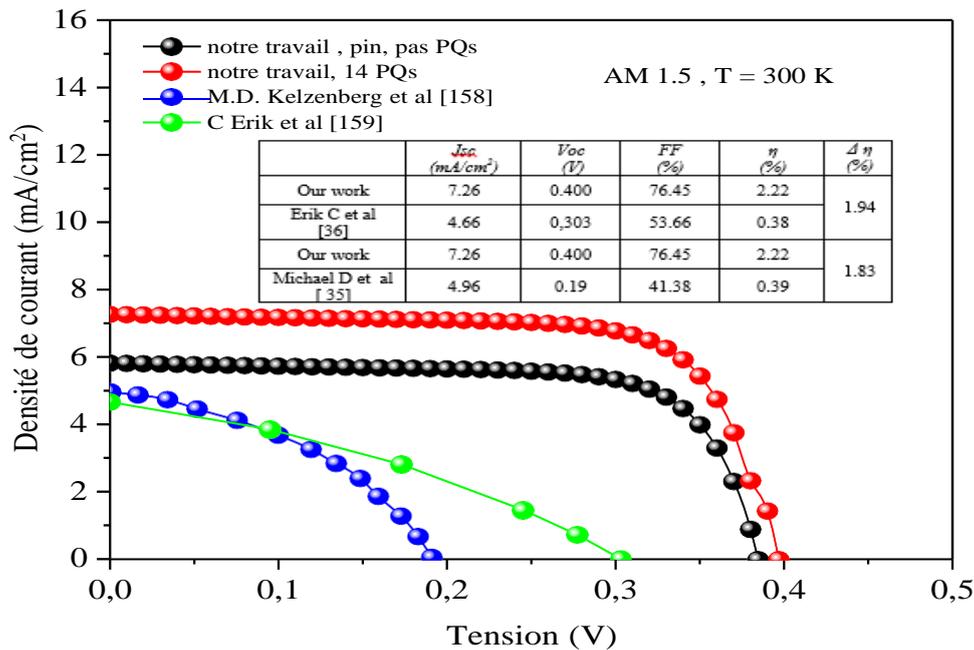


Figure 4.15 : Comparaison J-V de nos structures simulées et des NFs de Si expérimentaux [146].

Le tableau 4.2 résume toutes les principales caractéristiques des différentes structures, tandis que l'EQE de notre simulation présente des valeurs non négligées d'environ 25.85%. Cependant, en raison de l'extension du bord d'absorption, la densité de courant de court-circuit

(J_{cc}) de notre structure était plus grande que celle des structures mesurées, comme nous l'avons décrit ci-dessus.

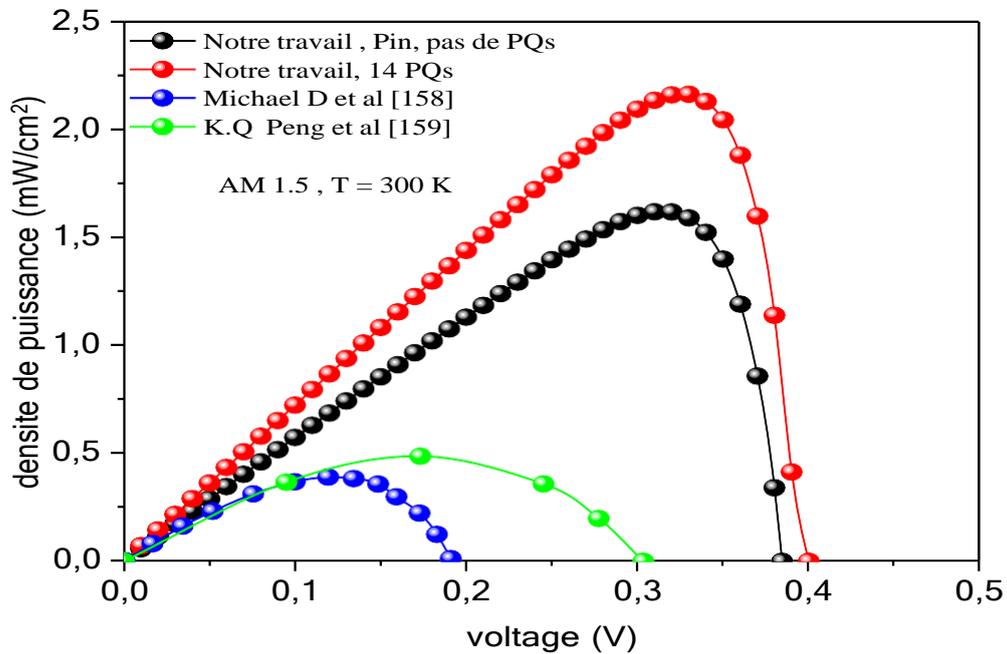


Figure 4.16 : Comparaison P-V de nos structures simulées et des NFs de Si expérimentaux [146].

Tableau 4.2 : Caractéristique électrique de la CS à PQs de SiGe/Si pour différents nombres de puits quantiques.

Nombre de couches de PQs	J_{cc} (mA/cm ²)	V_{co} (V)	FF (%)	η (%)
0	5.82	0.384	72.49	1.62
4	6.08	0.391	74.31	1.77
8	6.59	0.394	76.62	1.98
12	7.04	0.396	76.76	2.14
14	7.26	0.400	76.45	2.22

La figure 4.17 montre la variation du rendement de conversion en fonction de la température et du rayon respectivement, pour 14 PQ insérés dans la région intrinsèque du nanofil. Comme le montre cette figure, d'une part, le rendement de conversion est légèrement réduit lorsque la température augmente, et d'autre part, il augmente lorsque le rayon du nanofil augmente. Par exemple, pour un rayon de 80 nm et une température de 275 K, l'efficacité est de 0,95 %, et lorsque le rayon augmente à 240 nm à la même température, l'efficacité augmente à 4,28 %. Sinon, pour un même rayon et pour une température de 350 K, le rendement diminue d'un facteur 8,72. Cette diminution peut s'expliquer par la réduction de la bande interdite des cellules solaires qui a un effet sur la diminution de la tension en circuit ouvert [158,159].

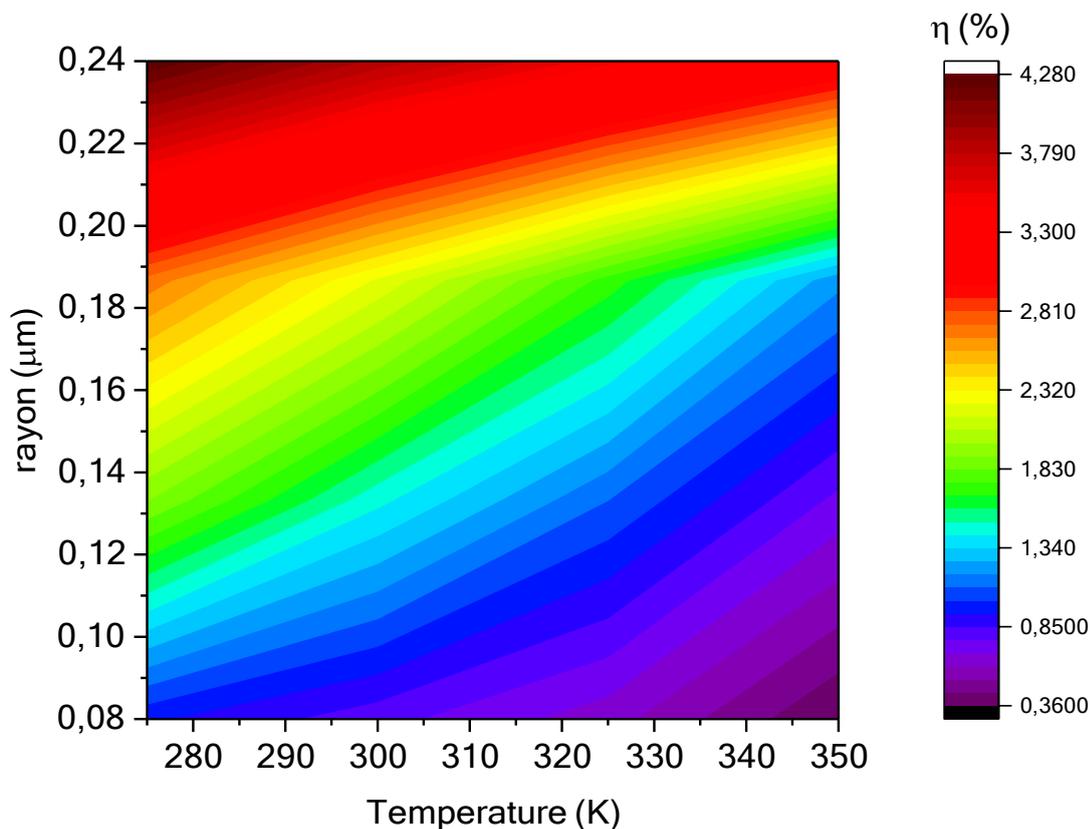


Figure 4.17 : Variation du rendement en fonction de la température et du rayon [146].

La figure 4.18 illustre la variation du rendement de conversion en fonction du nombre de PQs intégrés et du rayon. On peut voir que l'efficacité augmente avec l'augmentation du nombre de PQs. Ceci est prouvé par une meilleure absorption des électrons de basse énergie, c'est-à-

dire l'effet de confinement. De plus, l'efficacité augmente avec l'augmentation du rayon du nanofil.

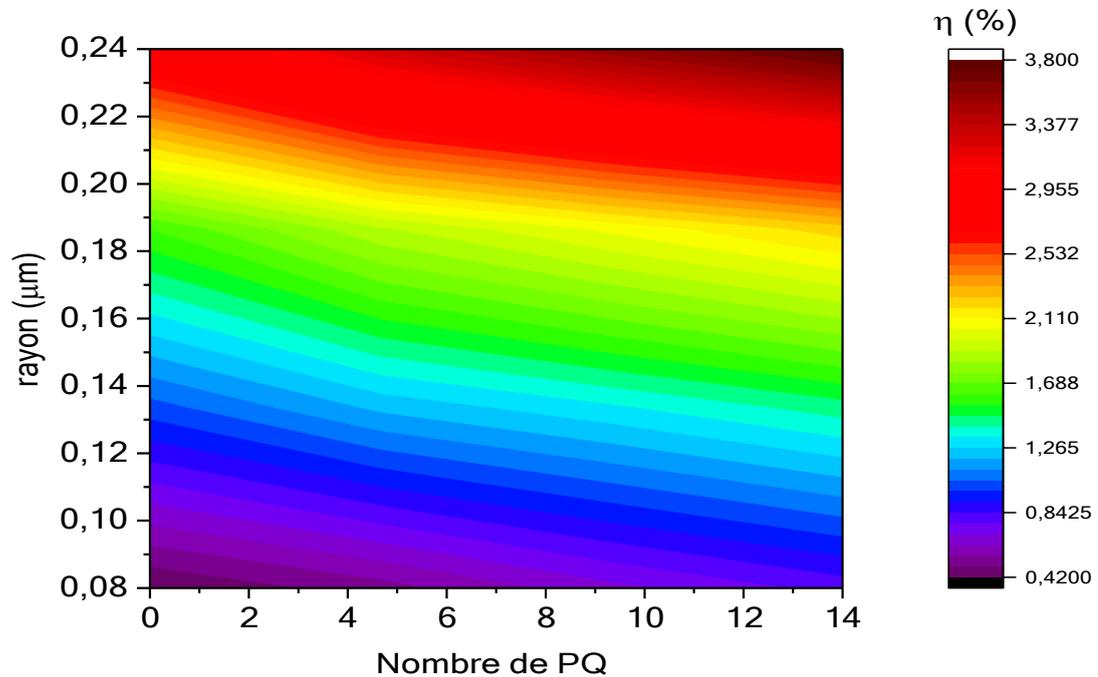


Figure 4.18 : Variation du rendement en fonction du nombre de puits quantique et du rayon.

4.4 Conclusion

Au cours de ce chapitre, nous avons étudié la modélisation d'une CS à base de NFs de silicium avec insertion de puits quantiques de SiGe dans la partie intrinsèque de la structure. Cette étude visait à démontrer l'utilité de l'insertion de puits dans l'augmentation de l'efficacité des cellules solaires. A cet effet, plusieurs caractéristiques ont été étudiées. Tout d'abord, l'effet de la concentration en germanium sur les caractéristiques de la CS a été étudié ; où une concentration de 5% a été choisie pour laquelle la cellule présente les meilleures performances. De plus, nous avons étudié l'effet de l'intégration des puits quantiques sur les performances des cellules. Pour ce dernier, l'insertion de 14 PQ en $\text{Si}_{0,95}\text{Ge}_{0,05}$ améliore le rendement de conversion cellulaire d'un facteur 1,37 par rapport à celui obtenu pour les NFs de Si p-i-n.

De plus, le calcul du coefficient d'absorption et de l'EQE nous a montré l'effet positive de l'intégration des puits quantiques pour l'absorption des photons de basse énergie. En conséquence, la structure proposée avec 14 couches de PQs de $\text{Si}_{0,95}\text{Ge}_{0,05}$ insérées dans la région intrinsèque, améliore l'efficacité de 0,6% par rapport à celle du nanofil Si p-i-n. Enfin,

la variation de température et le rayon du nanofil ont également été étudiés et nous ont conduits à optimiser le rendement de conversion d'un facteur 4,75, lorsque le rayon passe de 80 nm à 240 nm. Cette étude peut s'améliorer en utilisant de nouveaux matériaux tels que les semi-conducteurs III-V-(N,Sb).

CONCLUSION GENERALES

Au cours de la dernière décennie, la découverte des nanostructures a radicalement transformé le paysage de la recherche. Cette technologie, en tant qu'outil de conception et de caractérisation de systèmes, s'est rapidement imposée grâce à sa dimension nanométrique, qui s'avère être le facteur clé de son succès. Pour surmonter le défi d'atteindre une efficacité supérieure à 30 % par rapport à la limite de Shockley-Queisser, le développement des cellules solaires de nouvelle génération s'appuie sur l'intégration de nanostructures. Ces nanostructures, encore en cours de développement, ont déjà permis d'atteindre des taux de conversion de puissance élevés, tout en maintenant des coûts relativement bas. Il est crucial de noter que le spectre solaire contient des photons dont les énergies varient de 0,5 à 3,5 eV. Les photons ayant des énergies inférieures à la bande interdite du semi-conducteur ne sont pas absorbés, ce qui entraîne des pertes d'énergie. Afin de minimiser ces pertes, les chercheurs s'efforcent de concevoir des structures capables d'absorber le plus grand nombre de photons du spectre solaire. Dans ce contexte, les nanostructures, y compris les puits quantiques (QW), les points quantiques (QD) et les nanofils (NW), offrent la possibilité de personnaliser les propriétés des matériaux à l'échelle nanométrique, notamment en ce qui concerne leur taille et leur structure, d'une manière inatteignable à l'échelle macroscopique. Ces nanostructures visent principalement à améliorer l'absorption et la conversion des photons sur l'ensemble du spectre solaire pour générer des porteurs de charge. Les dispositifs à l'échelle nanométrique sont spécifiquement conçus pour collecter efficacement ces porteurs de charge en vue de produire de l'énergie électrique. Les domaines de recherche actuels s'intéressent également aux effets multi-excitons des nanoparticules, qui visent à créer plus d'une paire électron-trou par photon absorbé.

Dans cette étude, nous nous concentrons sur les nanofils en raison de leur potentiel dans le domaine de la récupération de l'énergie solaire. Récemment, d'importants efforts de recherche ont été déployés pour découvrir de nouvelles architectures susceptibles d'offrir des niveaux élevés d'efficacité de conversion. Cette étude repose sur l'utilisation de matériaux tels que le silicium, appartenant à la colonne IV du tableau périodique et connu pour être l'élément chimique le plus abondant sur Terre après l'oxygène, ce qui le rend idéal pour la production d'énergie photovoltaïque. De plus, l'alliage $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, reconnu pour ses propriétés

électroniques et optiques attrayantes, est devenu un matériau propice à l'intégration de puits quantiques, comme cela a récemment été démontré.

En comparant une cellule solaire avec 14 couches de puits quantiques SiGe à une cellule solaire à broches à base de silicium, il a été constaté que le courant de court-circuit (J_{cc}) augmentait de 23,55 à 37,48 mA/cm², représentant une augmentation significative de 59,15%. Cette amélioration joue un rôle essentiel dans l'optimisation des performances des dispositifs microélectroniques et optoélectroniques basés sur le silicium. Dans cette optique, nous avons présenté une nouvelle structure de nanofils de silicium axiaux, reconnue pour ses performances structurelles ainsi que ses propriétés physiques attrayantes, comme récemment confirmé. Cette structure, intégrant des puits quantiques de SiGe (NWQW), a déjà fait l'objet d'un rapport antérieur. Les nanofils en silicium ouvrent également la porte à de nouvelles applications potentielles dans divers domaines, tels que la conception de composants électroniques, de dispositifs photovoltaïques, de capteurs biochimiques ou mécaniques, l'imagerie médicale, et même dans le domaine de la thermoélectricité. Cette étude se penche sur les caractéristiques structurelles d'une cellule solaire à puits quantique SiGe/Si et les optimise dans le but d'analyser l'impact de la concentration en germanium et du nombre de puits quantiques sur des paramètres cruciaux d'une cellule solaire Si-Nanowire, notamment la densité de courant-tension (JV), la puissance-tension (PV) et l'efficacité quantique (QE).

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] G. Landrieu, Les impacts des énergies fossiles sur l'environnement. 5. Entretiens de la Villette "L'énergie : un concept des usages des enjeux", Mar 1994, Paris, France.
- [2] C. Fabienne, « Les énergies renouvelables », Courrier hebdomadaire du CRISP, vol. 2252-2253, no. 7-8, 2015, pp. 5-72.
- [3] J.L. Bal, B. Chabot, Les énergies renouvelables. État de l'art et perspectives de développement. Comptes Rendus de l'Académie des Sciences-Series IIA-Earth and Planetary Science, 333(12), 2001, 827-834.
- [4] J. MICHALLON, Étude et optimisation de l'absorption optique et du transport électronique dans les cellules photovoltaïques à base de nanofils. 2015. Thèse de doctorat. Université Grenoble Alpe.
- [5] G. LEHOUCQ, Transistors à nanofils de silicium top-down. Application à la détection biologique. 2010. Thèse de doctorat. Ecole Polytechnique X.
- [6] B. KWAL, et J. SOLOMON, La loi de Stefan et l'électrodynamique non linéaire. J. Phys. Radium, 1938, vol. 9, no 5, p. 205-208.
- [7] M. IQBAL, An introduction to solar radiation. Elsevier, 2012.
- [8] A. ZAHIA, Etude de l'influence de la température sur la puissance de la cellule photovoltaïque. 2021. Thèse de doctorat. Faculté des Sciences et Technologies.
- [9] G. TOURASSE, Mesure et Analyse Statistique Tout Temps du Spectre du Rayonnement Solaire. 2016. Thèse de doctorat. Université de Lyon.
- [10] J. BOUSSINESQ, Théorie des ondes et des remous qui se propagent le long d'un canal rectangulaire horizontal, en communiquant au liquide contenu dans ce canal des vitesses sensiblement pareilles de la surface au fond. Journal de mathématiques pures et appliquées, 1872, vol. 17, p. 55-108.
- [11] B. BECKERS, P. BECKERS, Calcul du rayonnement solaire atténué par l'atmosphère. Bulletin de la Société géographique de Liège, 2011, vol. 51, p. 5-16.
- [12] T. MARKVART, al, Practical handbook of photovoltaics: fundamentals and applications. Elsevier, 2003.
- [13] G. BÖHME, LE CALVÉ, Maxime. L'atmosphère, fondement d'une nouvelle esthétique 1. Communications, 2018, no 1, p. 25-49.
- [14] M. DANKASSOUA, S. MADOUGOU, A. ABOUBACAR, et al. Etude du rayonnement solaire global à Niamey de la période de pré-mousson et de la mousson de l'année 2013 (mai à octobre). Journal of Renewable Energies, 2017, vol. 20, no 1, p. 131-146.

- [15] J. POITOU, Composition atmosphérique et bilan radiatif. Reflets de la physique, 2013, no 33, p. 28-33.
- [16] TASSILLY, Eugène. L'atmosphère terrestre. Société d'Editions Scientifiques, 1899.
- [17] B. NAIMA, Etude du rayonnement solaire dans la région de Batna. 2008. Thèse de doctorat. Batna, Université El Hadj Lakhder. Faculté des sciences de l'ingénieur.
- [18] H. GUESMI, Modelisation et Simulation de cellules solaires à base de nanostructures.2021 thèse de doctorat. Blida, Université Saad dahleb 1, Faculté de technologie.
- [19] F. BENYETTOU, Modélisation et Simulation des structures à PQs, BQs, et NFs pour la conversion photovoltaïque.2018 thèse de doctorat. Blida, Université Saad dahleb 1, Faculté des sciences.
- [20] E. Becquerel, (1839). On electric effects under the influence of solar radiation. Compt. Rend., 9, 561.
- [21] W. Smith, (1876). The action of light on selenium.
- [22] W. G. Adams, R. E. Day, (1877). R. Soc. Proc. 24 (1876) 163. Philos. Mag, 1, 295.
- [23] C. E. Fritts, (1883). On a new form of selenium cell, and some electrical discoveries made by its use. American Journal of Science, (156), 465-472.W. (1876). The action of light on selenium.
- [24] G. M. Minchin, (1893). XXXV. The magnetic field of a circular current. The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science, 35(215), 354-365.
- [25] M. Paty, (1993). Einstein (Albert) 1879-1955.
- [26] R. S. Ohl, (1948). U.S. Patent Washington, DC: U.S. Patent and Trademark Office No. 2, 443,542.
- [27] D. M. Chapin, C. S. Fuller, G. L. Pearson, (1954). A new silicon p-n junction photocell for converting solar radiation into electrical power. Journal of Applied Physics, 25(5), 676-677.
- [28] M. Prince, (1955). Silicon solar energy converters. Journal of Applied Physics, 26(5), 534-540.
- [29] J. J. Loferski, (1956). Theoretical considerations governing the choice of the optimum semiconductor for photovoltaic solar energy conversion. Journal of Applied Physics, 27(7), 777-784.
- [30] S. S. Hegedus, A. Luque, (2003). Status, trends, challenges and the bright future of solar electricity from photovoltaics. Handbook of photovoltaic science and engineering, 1-43.
- [31] P. H., Nguyen, C. Michel, J. Bottin, (1983). Etude de la conversion PV: effets des résistances parasites des photopiles. Revue de physique Appliquée, 18(12), 775-779.

- [32] X. Zhang, T. Zhao, W. Mao, D. Tan, L. Chang, (2018). Multilevel Inverters for Grid-Connected Photovoltaic Applications: Examining Emerging Trends. IEEE Power Electronics Magazine, 5(4), 32-41.
- [33] O. GERGAUD, Modélisation énergétique et optimisation économique d'un système de production éolien et photovoltaïque couplé au réseau et associé à un accumulateur. 2002. Thèse de doctorat. École normale supérieure de Cachan-ENS Cachan.
- [34] A. SALIM, T. DALILA, Etude d'un système photovoltaïque. 2017. Thèse de doctorat. Université Mouloud Mammeri.
- [35] F. HANANOU, A. ROUABAH, Modélisation et simulation d'un système photovoltaïque. 2014. Thèse de doctorat.
- [36] M. T. BOUKADOUM, A. HAMIDAT, N. OURABIA, Le Pompage Photovoltaïque. Revue des Energies Renouvelables, NS Zones Arides, 2002, p. 69-73.
- [37] Y. Li, G. Wang, M. Akbari-Saatlu, M. Procek, H.H. Radamson, Si and SiGe nanowire for micro-thermoelectric generator: A review of the current state of the art. Frontiers in Materials, 2021, vol. 8, p. 611078.
- [38] K. HELALI, Modelisation d'une cellule photovoltaïque: etude comparative. 2012. Thèse de doctorat. Université Mouloud Mammeri.
- [39] W. BELLIL, Simulation et optimisation des structures à base de nouveaux matériaux pour améliorer le rendement des cellules solaires.2020 thèse de doctorat. Blida, Université Saad dahleb 1, Faculté des sciences.
- [40] A. BELAOUT, Etude et diagnostic des défauts fréquents aux systèmes photovoltaïques (PV) par emploi de la caractéristique courant-tension. 2018. Thèse de doctorat.
- [41] V. BOITIER, R. BAGET, C.ALONSO, Caractérisation de panneaux photovoltaïques. La Revue 3EI, 2008, vol. 55, p. 54-61.
- [42] S. S. Hegedus, W. N. Shafarman, (2004). Thin-film solar cells: device measurements and analysis. Progress in Photovoltaics: Research and Applications, 12(2-3), 155-176.
- [43] A. CHOVET, P. MASSON, Physique des semi-conducteurs. Ecole Polytechnique–université de Marseille, 2004.
- [44] J. M. ANDRÉ, L. GOUVERNEUR, G. LEROY, L'Étude Théorique Des Propriétés Conductrices Des Semi-Conducteurs Organiques. Bulletin des Sociétés Chimiques Belges, 1967, vol. 76, no 11-12, p. 661-677.

- [45] A. HABBAS, N. Djellouli, Effets du dopage sur les propriétés physiques des matériaux semi-conducteurs. 2021.
- [46] O. BONNAUD, Physique des solides, des semiconducteurs et dispositifs. Université de Rennes, 2003, vol. 1, p. 78.
- [47] YOUS, B., BERGER, J. M., FERRATON, J. P., *et al.* Gap optique et indice de réfraction du silicium amorphe préparé par “chemical vapour deposition” entre 95 K et 673 K. *Thin Solid Films*, 1981, vol. 82, no 3, p. 279-285.
- [48] CHABANE, H Etude d’une cellule solaire à base de structure PIN. 2015. Thèse de doctorat. Université de Batna 2.
- [49] W. Shockley and H. J. Queisser, “Detailed Balance Limit of Efficiency of p-n Junction Solar Cells,” *J. Appl. Phys.*, vol. 32, no. 3, p. 510, 1961.
- [50] A. Luque and A. Marti, “The intermediate band solar cell: progress toward the realization of an attractive concept.” *Adv. Mater.*, vol. 22, no. 2, pp. 160–174, Jan. 2010.
- [51] A. Marti, E. Antolin, E. Canovas, N. Lopez, P. Linares, A. Luque, C. R. Stanley, and C. D. Farmer, “Elements of the design and analysis of quantum-dot intermediate band solar cells,” *Thin Solid Films*, vol. 516, no. 20, pp. 6716–6722, Aug. 2008.
- [52] P. Palacios, J. Fernandez, K. Sanchez, J. Conesa, and P. Wahnou, “Firstprinciples investigation of isolated band formation in half-metallic $Ti(x)Ga(1-x)P$ ($x=0.3125-0.25$),” *Phys. Rev. B*, vol. 73, no. 8, pp. 1–8, Feb. 2006.
- [53] P. Palacios, K. Sanchez, J. C. Conesa, and P. Wahnou, “First principles calculation of isolated intermediate bands formation in a transition metal-doped chalcopyrite-type semiconductor,” *Phys. status solidi*, vol.203, no. 6, pp. 1395–1401, May 2006.
- [54] C. Tablero, “Optoelectronic properties of Cr-substituted II–VI semiconductors,” *Comput. Mater. Sci.*, vol. 37, no. 4, pp. 483–490, Oct. 2006.
- [55] Bimberg, D., Grundmann, M., et Ledentsov, N.N, “Quantum Dot Heterostructures”, John Wiley and Sons, 1999.
- [56] Arakawa, Y. et Sakaki, H., “Multidimensional quantum well laser and temperature dependence of its threshold current”, *Applied Physics Letters*, 40(11), p 939–41, 1982.

- [57] Zribi, J, “Croissance et caractérisation des boîtes quantiques InAs/GaAs pour des applications photovoltaïques”, Thèse de Doctorat en physique, Université de Sherbrooke, 2014.
- [58] Dupuy, E, “Croissance et spectroscopie de boîtes quantiques diluées d’InAs/InP(001) pour des applications nanophotoniques à 1.55 μm ”, Thèse de Doctorat, Université de Sherbrooke, 2009.
- [59] Balaguru, R. J. B., Jeyaprakash, B. G, “Quantum Wells, Quantum Wires, Quantum Dots, Quantum Limit of Conductance, Quantum Capacitance & Quantum HALL Effect”, NPTEL, Electrical & Electronics Engineering, Semiconductor Nanodevices.
- [60] Harrison, P, “Quantum Wells, Wires and Dots Second Edition: Theoretical and Computational Physics of Semiconductor Nanostructures”, John Wiley & Sons, second edition, 2005.
- [61] DIARRA, Mamadou. Étude théorique de nanofils semiconducteurs. 2009. Thèse de doctorat. Université des Sciences et Technologie de Lille-Lille I.
- [62] DIARRA, Mamadou. Étude théorique de nanofils semiconducteurs. 2009. Thèse de doctorat. Université des Sciences et Technologie de Lille-Lille I.
- [63] BOUKHICHA, Rym. Croissance et caractérisation des nanofils de silicium et de germanium obtenus par dépôt chimique en phase vapeur sous ultravide. 2011. Thèse de doctorat. Université Paris Sud-Paris XI.
- [64] ISRAEL, Mahmoud. Croissance et caractérisation de nanofils de Si et Ge. 2015. Thèse de doctorat. Rennes 1.
- [65] SKÖLD, Niklas, KARLSSON, Lisa S., LARSSON, Magnus W., et al. Growth and Optical Properties of Strained GaAs– Ga_xIn_{1-x}P Core– Shell Nanowires. Nano letters, 2005, vol. 5, no 10, p. 1943-1947.
- [66] BJÖRK, M. T., OHLSSON, B. J., THELANDER, Claes, et al. Nanowire resonant tunneling diodes. Applied Physics Letters, 2002, vol. 81, no 23, p. 4458-4460.
- [67] VAN DICK, Rolf, WAGNER, Ulrich, STELLMACHER, Jost, et al. The utility of a broader conceptualization of organizational identification: Which aspects really matter?. Journal of Occupational and Organizational psychology, 2004, vol. 77, no 2, p. 171-191.
- [68] KIM, Jeong Beom, ZAEHRES, Holm, WU, Guangming, et al. Pluripotent stem cells induced from adult neural stem cells by reprogramming with two factors. nature, 2008, vol. 454, no 7204, p. 646-650.
- [69] BONISSENT, A. et MUTAFTSCHIEV, B. A computer built random model for simulation of the crystal-melt interface. Philosophical Magazine, 1977, vol. 35, no 1, p. 65-73.

- [70] MANI, Radhika C., SUNKARA, Mahendra K., BALDWIN, Richard P., et al. Nanocrystalline graphite for electrochemical sensing. *Journal of The Electrochemical Society*, 2005, vol. 152, no 4, p. E154.
- [71] KAMINS, T. I., STANLEY WILLIAMS, R., BASILE, D. P., et al. Ti-catalyzed Si nanowires by chemical vapor deposition: Microscopy and growth mechanisms. *Journal of Applied Physics*, 2001, vol. 89, no 2, p. 1008-1016.
- [72] DICK, Walter, CAREY, Lou, et CAREY, James O. The systematic design of instruction. 2005.
- [73] KODAMBAKA, S. R. M. C., TERSOFF, J., REUTER, M. C., et al. Germanium nanowire growth below the eutectic temperature. *Science*, 2007, vol. 316, no 5825, p. 729-732.
- [74] HOURLIER-BAHLOUL, Djamila et PERROT, Pierre. Comprehension of the S (V) LS mechanism growth of silicon-based nanowires. *Comptes Rendus Chimie*, 2007, vol. 10, no 7, p. 658-665.
- [75] WANG, Chuankuan, YANG, Jinyan, et ZHANG, Quanzhi. Soil respiration in six temperate forests in China. *Global Change Biology*, 2006, vol. 12, no 11, p. 2103-2114.
- [76] R. Juhasz, N. Elfström, and J. Linnros. Controlled fabrication of silicon nanowires by electron beam lithography and electrochemical size reduction. *Nano Lett.* 5(2), 275–280 (2005).
- [77] N. F. Za'bah, K. S. K. Kwa, L. Bowen, B. Mendis, and A. O'Neill. Top-down fabrication of single crystal silicon nanowire using optical lithography. *J. Appl. Phys.* 112(2), 024309 (2012).
- [78] A. A. Talin, L. L. Hunter, F. Léonard, and B. Rokad. Large area, dense silicon nanowire array chemical sensors. *Appl. Phys. Lett.* 89(15), 153102 (2006).
- [79] C. Fang, H. Föl, and J. Carstensen. Long germanium nanowires prepared by electrochemical etching. *Nano Lett.* 6(7), 1578–1580 (2006).
- [80] M.-L. Zhang, K.-Q. Peng, X. Fan, J.-S. Jie, R.-Q. Zhang, S.-T. Lee, and N.-B. Wong. Preparation of large-area uniform silicon nanowires arrays through metal-assisted chemical etching. *J. Phys. Chem. C* 112(12), 4444–4450 (2008).
- [81] R. S. Wagner and W. C. Ellis. Vapor-liquid-solid mechanism of single crystal growth. *Appl* (1964).
- [82] J. Westwater, D. P. Gosain, S. Tomiya, S. Usui, and H. Ruda. Growth of silicon nanowires liquid-solid reaction. *J. Vac. Sci. Technol. B* 15, 554 (1997).
- [83] A. M. Morales and C. M. Lieber. A laser ablation method for the synthesis of crystalline semiconductor nanowires. *Science* 279, 208 (1998).

- [84] L. Schubert, P. Werner, N. D. Zakharov, G. Gerth, F. M. Kolb, L. Long, U. Gösele, and T. Y. Tan. Silicon nanowhiskers grown on $\langle 111 \rangle$ Si substrates by molecular-beam epitaxy. *Appl. Phys. Lett.* 84(24), 4968–4970 (2004).
- [85] Y. F. Zhang, Y. H. Tang, N. Wang, D. P. Yu, C. S. Lee, I. Bello, and S. T. Lee. Silicon nanowires prepared by laser ablation at high temperature. *Appl. Phys. Lett.* 72, 1835 (1998).
- [86] J. Mallet, M. Molinari, F. Martineau, F. Delavoie, P. Fricoteaux, and M. Troyon. Growth of silicon nanowires of controlled diameters by electrodeposition in ionic liquid at room temperature. *Nano Lett.* 8(10), 3468–3474 (2008).
- [87] A. Irrera, E. F. Pecora, and F. Priolo. Control of growth mechanisms and orientation in epitaxial Si nanowires grown by electron beam evaporation. *Nanotechnol.* 20(13), 135601 (2009).
- [88] H. Pan, S. Lim, C. Poh, H. Sun, X. Wu, Y. Feng, and J. Lin. Growth of Si nanowires by thermal evaporation. *Nanotechnol.* 16(4), 417 (2005).
- [89] E. Sutter, B. Ozturk, and P. Sutter. Selective growth of Ge nanowires by lowtemperature thermal evaporation. *Nanotechnol.* 19, 435607 (2008).
- [90] J. Westwater, D. P. Gosain, S. Tomiya, S. Usui, and H. Ruda. Growth of silicon nanowires via gold/silane vapor-liquid-solid reaction. *J. Vac. Sci. Technol. B* 15, 554 (1997).
- [91] H. J. Joyce, Q. Gao, H. H. Tan, C. Jagadish, Y. Kim, J. Zou, L. M. Smithand, H. E. Jackson, J. M. Yarrison-Rice, P. Parkinson, and M. B. Johnston. III V semiconductor nanowires for optoelectronic device applications. *Prog. in Quantum Electron.* 35, 23–75 (2011).
- [92] H. Okamoto and T.B. Massalski. The Au-Si (gold-silicon) system. *Bulletin of Alloy Phase Diagrams* 4, 190–198 (1983).
- [93] H. Okamoto and T.B. Massalski. The Au-Ge (gold-germanium) system. *Bulletin of Alloy Phase Diagrams* 5, 601–610 (1984).
- [94] J. L. Lensch-Falk, E. R. Hemesath, D. E. Perea, and L. J. Lauhon. Alternative catalysts for VSS growth of silicon and germanium nanowires. *J. Mater. Chem.* 19, 849–857 (2009).
- [95] J. D. Holmes, K. P. Johnston, R. C. Doty, and B. A. Korgel. Control of thickness and orientation of solution-grown silicon nanowires. *Science* 287(5457), 1471–1473 (2000).
- [96] A. Potié, T. Baron, F. Dhalluin, G. Rosaz, B. Salem, L. Latu-Romain, M. Kogelschatz, P. Gentile, F. Oehler, L. Montès, J. Kreisel, and H. Rousset. Growth and characterization of gold catalyzed SiGe nanowires and alternative metalcatalyzed Si nanowires. *Nanoscale Res. Lett.* 6, 187 (2011).

- [97] A. Potié, T. Baron, L. Latu-Romain, G. Rosaz, B. Salem, L. Montès, P. Gentile, J. Kreisel, and H. Rousset. Controlled growth of SiGe nanowires by addition of HCl in the gas phase. *J. Appl. Phys.* 110, 024311 (2011).
- [98] K.-K. Lew, L. Pan, E. C. Dickey, and J. M. Redwing. Vapor-liquid-solid growth of silicon-germanium nanowires. *Adv. Mater.* 15(24), 2073–2076 (2003).
- [99] I. A. Goldthorpe, A. F. Marshall, and P. C. McIntyre. Synthesis and strain relaxation of Ge-core/Si-shell nanowire arrays. *Nano Lett.* 8(11), 4081–4086 (2008).
- [100] Y. Cui, X. Duan, J. Hu, and C. M. Lieber. Doping and electrical transport in silicon nanowires. *J. Phys. Chem. B* 104(22), 5213–5216 (2000).
- [101] N. Fukata, K. Sato, M. Mitome, Y. Bando, T. Sekiguchi, M. Kirkham, J.-i. Hong, Z. L. Wang, and R. L. Snyder. Doping and Raman characterization of boron and phosphorus atoms in germanium nanowires. *ACS Nano* 4(7), 3807–3816 (2010).
- [102] L. J. Lauhon, M. S. Gudiksen, D. Wang, and C. M. Lieber. Epitaxial core-shell and core-multishell nanowire heterostructures. *Nature* 420, 57 (2002).
- [103] N. Fukata, M. Mitome, T. Sekiguchi, Y. Bando, M. Kirkham, J.-I. Hong, Z. L. Wang, and R. L. Snyder. Characterization of impurity doping and stress in Si/Ge and Ge/Si core-shell nanowires. *ACS Nano* 6(10), 8887–8895 (2012).
- [104] RIVOAL, Jean-Claude et FRÉTIGNY, Christian. Microscopie à force atomique (AFM). *Techniques de l'ingénieur*, 2005, vol. 1, p. 394.
- [105] Olivier Demichel, *Propriétés Électroniques de Nanofils de Silicium obtenus par Croissance Catalysée*, Université Joseph Fourier – Grenoble 1, 2010.
- [106] S. Iijima. Helical Microtubules of Graphitic Carbon. *Nature*, 354(6348) :5658, 1991.
- [107] C. N. R. Rao and A. Govindaraj. *Nanotubes and Nanowires*. RSC Publishing, 2005.
- [108] F. J. Disalvo. Thermoelectric Cooling and Power Generation. *Science*, 285(5428) :703-706, 1999.
- [109] D. Li, S. T. Huxtable, A. R. Abramson, and A. Majumdar. Thermal Transport in Nanostructured Solid-State Cooling Devices. *Journal of Heat Transfer*, 127 :108-114, 2005.
- [110] G. Bonnier and E. Devin. Couples Thermoélectriques, Caractéristiques et Mesure de Température. *Les Techniques de l'ingénieur*, R 2(590) :1-22, 1997.
- [111] X. Kleber, V. Massardier, and J. Merlin. La Mesure du Pouvoir Thermoélectrique : Une Technique Originale de Contrôle des Alliages Métalliques. *Les Techniques de l'Ingénieur*, RE 39 :1-9, 2005.
- [112] C. B. Vining. Semiconductors Are Cool. *Nature*, 413 :577602, 2001.
- [113] B. Tian, X. Zheng, T. J. Kempa, Y. Fang, N. Yu, G. Yu, J. Huang, and C. M. Lieber. Coaxial Silicon Nanowires As Solar Cells and Nanoelectronic Power Sources. *Nature*, 449 :885889, 2007

- [114] K. Bullis. Tiny Solar Cells : Photovoltaics Made of Nanowires Could Lead To Cheaper Solar Panels. MIT Technology Review, 2007.
- [115] G. Andrä, M. Pietsch, T. Stelzner, F. Falk, E. Ose, S.H. Christiansen, A. Scheel, and S. Grimm. Silicon Nanowires For Thin Film Solar Cells. 22nd Europ. Photovoltaic Solar Energy Conference and Exhibition, 09 2007.
- [116] H. S. Nalwa. Handbook of Thin Film Materials, volume 1, Deposition and Processing of Thin Films, volume 1. 2002.
- [117] Cao Nanostructures and Nanomaterials, Synthesis, Properties and Applications. Imperial College Press, 2004.
- [118] BRYLLERT, Tomas, WERNERSSON, L.-E., FROBERG, L. E., et al. Vertical high-mobility wrap-gated InAs nanowire transistor. IEEE Electron Device Letters, 2006, vol. 27, no 5, p. 323-325.
- [119] SCHMIDT, Olaf. Wood and tree fungi. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2006.
- [120] DICK, Bob. Action research literature 2004-2006: Themes and trends. Action research, 2006, vol. 4, no 4, p. 439-458.
- [121] THELANDER, Claes, MÅRTENSSON, Thomas, BJÖRK, M. T., et al. Single-electron transistors in heterostructure nanowires. Applied Physics Letters, 2003, vol. 83, no 10, p. 2052-2054.
- [122] HANSEN, A. E., BJÖRK, M. T., FASTH, Carina, et al. Spin relaxation in InAs nanowires studied by tunable weak antilocalization. Physical Review B, 2005, vol. 71, no 20, p. 205328.
- [123] LABAT, Frédéric, BARANEK, Philippe, DOMAIN, Christophe, et al. Density functional theory analysis of the structural and electronic properties of TiO₂ rutile and anatase polytypes: Performances of different exchange-correlation functionals. The Journal of chemical physics, 2007, vol. 126, no 15.
- [124] ZIMMLER, Mariano A., BAO, Jiming, CAPASSO, Federico, et al. Laser action in nanowires: Observation of the transition from amplified spontaneous emission to laser oscillation. Applied Physics Letters, 2008, vol. 93, no 5.
- [125] RISTIĆ, M., MUSIĆ, S., IVANDA, M., et al. Sol-gel synthesis and characterization of nanocrystalline ZnO powders. Journal of Alloys and Compounds, 2005, vol. 397, no 1-2, p. L1-L4.
- [126] LAUHON, Lincoln J., GUDIENSEN, Mark S., WANG, Deli, et al. Epitaxial core-shell and core-multishell nanowire heterostructures. nature, 2002, vol. 420, no 6911, p. 57-61.
- [127] CUI, Yi, LAUHON, Lincoln J., GUDIENSEN, Mark S., et al. Diameter-controlled synthesis of single-crystal silicon nanowires. Applied Physics Letters, 2001, vol. 78, no 15, p. 2214-2216.
- [128] PATOLSKY, Fernando, ZHENG, Gengfeng, HAYDEN, Oliver, et al. Electrical detection of single viruses. Proceedings of the National Academy of Sciences, 2004, vol. 101, no 39, p. 14017-14022.

- [129] BOUKAI, Akram I., BUNIMOVICH, Yuri, TAHIR-KHELI, Jamil, et al. Silicon nanowires as efficient thermoelectric materials. *nature*, 2008, vol. 451, no 7175, p. 168-171.
- [130] GROYSBERG, Boris, LEE, Linda-Eling, et NANDA, Ashish. Can they take it with them? The portability of star knowledge workers' performance. *Management Science*, 2008, vol. 54, no 7, p. 1213-1230.
- [131] DE VILLARTAY, Jean-Pierre, LIM, Annick, AL-MOUSA, Hamoud, et al. A novel immunodeficiency associated with hypomorphic RAG1 mutations and CMV infection. *The Journal of clinical investigation*, 2005, vol. 115, no 11, p. 3291-3299.
- [132] ZHOU, Wenchun, KOLB, Frederic L., et RIECHERS, Dean E. Identification of proteins induced or upregulated by Fusarium head blight infection in the spikes of hexaploid wheat (*Triticum aestivum*). *Genome*, 2005, vol. 48, no 5, p. 770-780.
- [133] VISSCHER, Peter M., YANG, Jian, et GODDARD, Michael E. A commentary on 'common SNPs explain a large proportion of the heritability for human height' by Yang et al.(2010). *Twin Research and Human Genetics*, 2010, vol. 13, no 6, p. 517-524.
- [134] BOUKAI, Akram I., BUNIMOVICH, Yuri, TAHIR-KHELI, Jamil, et al. Silicon nanowires as efficient thermoelectric materials. *nature*, 2008, vol. 451, no 7175, p. 168-171.
- [135] DATTA, Supriyo et DAS, Biswajit. Electronic analog of the electro-optic modulator. *Applied Physics Letters*, 1990, vol. 56, no 7, p. 665-667.
- [136] M. Safi, A. Aissat, H. Guesmi, F. Benyettou and I. Barbezier, "Modeling of Si-Based Nanowires by Insertion of SiGe Quantum Wells (QWNW)," 2018 6th International Renewable and Sustainable Energy Conference (IRSEC), Rabat, Morocco, 2018, pp. 1-4.
- [137] SAFI, Meriem, AISSAT, Abdelkader, GUESMI, Houcine, et al. Improvement of Silicon Nanowire-Based Photovoltaic Solar Cell with the Integration of CIGS Quantum Wells. In : *International Conference on Electronic Engineering and Renewable Energy Systems*. Singapore : Springer Nature Singapore, 2022. p. 119-126.
- [138] A.J. Nozik, *Nano Lett*, 10(8), 2735 (2010).
- [139] N. N. Greenwood, A.Earnshaw, "Chemistry of the Elements 2nd Edition", Butterworth-Heinemann, 328 (1997); ISBN-13. 978-0750633659
- [140] A. Aissat, F. Benyettou, J. P. Vilcot, Modélisation et simulation des cellules solaires à puits quantique à base de SiGe/Si, *International Journal of Hydrogen Energy*, 10, 1(2016).

- [141] P. Ashburn, D. M. Bagnall, "silicon-Germanium : Properties, growth and Applications", Springer Handbook of Electronic and Photonic Materials, 481 (2006);
- [142] Y. Li, G.Wang, M. Akbari-Saatlu, M.Procek and H. H. Radamson, *Frontiers in Materials*, 8, 611078 (2021); <https://doi.org/10.3389/fmats.2021.611078>
- [143] M.Safi, A.Aissat , H.Guesmi, I.Barbezier, Modeling of Si-Based Nanowires by Insertion of SiGe Quantum Wells (QWNW). 6th International Renewable and Sustainable Energy Conference (IRSEC) (pp. 1-4), (2018) IEEE;
- [144] L. Fonseca, I. Donmez-Noyan, M. Dolcet, D. Estrada-Wiese, J. Santander, M. Salleras, A. Tarancon , *Nanomaterials journal*, 11(2), 517 (2021) ; <https://doi.org/10.3390/nano11020517>
- [145] X. Shi, J. Zou, Z. Chen, *Advanced Thermoelectric Design: From Materials and Structures to Devices*, *chemical reviews*, 120(15), 7399 (2020); <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.0c00026>
- [146] SAFI, M., AISSAT, A., GUESMI, H., et al. SiGe quantum wells implementation in Si based nanowires for solar cells applications. *Digest Journal of Nanomaterials and Biostructures*, 2023, vol. 18, no 1, p. 327-342.
- [147] R. Braunstein, A. R. Moore, and F. Herman, *Phys. Rev.*, 109(3),695 (1958); <https://doi.org/10.1103/PhysRev.109.695>
- [148] D. V. Lang, R. People, J. C. Bean, and A. M. Sergent, *Appl. Phys, Lett.* 47(12), 1333 (1985); <https://doi.org/10.1063/1.96271>
- [149] R. People and J. Bean, *Applied Physics Letters*, 49(4), 229 (1986); <https://doi.org/10.1063/1.97637>
- [150] R. People, *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 22(9), 1696 (1986);[DOI: 10.1109/JQE.1986.1073152](https://doi.org/10.1109/JQE.1986.1073152)
- [151] Y. Kohama, Y. Fukuda and M. Seki , *Appl. Phys, Lett*, 52(5), 380 (1988); <https://doi.org/10.1063/1.99472>
- [152] T. Soga, "Nanostructured Materials for Solar Energy Conversion", Elsevier Science (2006).
- [153] D. Rekioua, E. Matagne, "Optimization of Photovoltaic Power Systems:
- [154] BLOESS, Andreas, SCHILL, Wolf-Peter, et ZERRAHN, Alexander. Power-to-heat for renewable energy integration: A review of technologies, modeling approaches, and flexibility potentials. *Applied Energy*, 2018, vol. 212, p. 1611-1626.
- [155] People, R., et al. "Modulation doping in Ge_xSi_{1-x}/Si strained layer

heterostructures." *Applied Physics Letters* 45.11 (1984): 1231-1233.

[156] Lynch, and K. Baldwin, *Appl. Phys. Lett.*, 45(11), 1231 (1984); <https://doi.org/10.1063/1.95074>

[157] A .Faraji, S. Sabri, R. Malek, K. Kassmi, *Materials Today: Proceedings*, 45, 7329 (2021); <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2021.01.001>

[158] M.D. Kelzenberg, B. Turner-Evans, M. Kayes, A. Filler, C. Putnam, S. Lewis, H.A. Atwater, *Nano Letters*, 8(2), 710 (2008); <https://doi.org/10.1021/nl072622p>

[159] K. Q. Peng, S. T. Lee, *Adv. Mater.*, 23(2), 198 (2011); <https://doi.org/10.1002/adma.201002410>

[160] P. Singh, S. N. Singh, M. Lal, M. Husain, *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 92(12), 1611 (2008); <https://doi.org/10.1016/j.solmat.2008.07.010>

[161] P. Singh, N. M. Ravindra, *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 101,36 (2012); <https://doi.org/10.1016/j.solmat.2012.02.019>

[162] MA'ARIF, Miftahul, NAUFAL, M., SUPARMI, A., *et al.* Exact Solutions of Schrodinger Equation in Cylindrical Coordinates for Double Ring-Shaped Coulomb Oscillator Potential Using SUSY QM Method. In : *Journal of Physics: Conference Series*. IOP Publishing, 2019. p. 012005.

PUBLICATIONS

1. **M. Safi**, A. Aissat, Guesmi. H and J.P. Velcot. "SiGe quantum wells implementation in Si based nanowires for solar cells applications", Digest Journal of Nanomaterials and Biostructures 18(1):327-342
2. **Guesmi. H**, A. Aissat, M. Safi and I. Berbezier. "Efficiency improvement of GaAs Quantum Dot in GaAs_{1-x}P_x matrix for solar cell applications." Microelectron. J. 99 (2020): 104738.

CONFERENCES

1. H. Guesmi, A. Aissat, **M. Safi**, F. Benyettou and I. Berbezier, "Simulation and optimization of GaAs_{1-x}Bix/GaAs Quantum Dot for Solar Cell Applications," 2018 International Conference on Communications and Electrical Engineering (ICCEE), 2018, pp. 1-5, doi: 10.1109/CCEE.2018.8634544.
2. **M. Safi**, A. Aissat, H. Guesmi, F. Benyettou and I. Barbezier, "Modeling of Si-Based Nanowires by Insertion of SiGe Quantum Wells (QWNW)," 2018 6th International Renewable and Sustainable Energy Conference (IRSEC), 2018, pp. 1-4, doi: 10.1109/IRSEC.2018.8702282.
3. H. Guesmi, A. Aissat, **M. Safi** and I. Barbezier, "Electrical Properties of Si Quantum Dot in GaAs_{1-x}P_x Matrix for Solar Cell Applications," 2019 7th International Renewable and Sustainable Energy Conference (IRSEC), 2019, pp. 1-5, doi: 10.1109/IRSEC48032.2019.9078237.
4. Guesmi, H., A. Aissat and **M. Safi** "Implementation of InP Quantum dots in P(GaAs)-I(GaAsP)-N(GaAs) structure for Solar Cell Applications" DZENERGY 2021, Hassi Messaoud, Ouargla, Algeria. ISBN: 978-1-912532-21-6.
5. **M. Safi**, A. Aissat, Guesmi. H and J.P. Velcot. "Improvement of Silicon Nanowire-Based Photovoltaic Solar Cell with the Integration of CIGS Quantum Wells", Proceedings of the 3rd International Conference on Electronic Engineering and Renewable Energy Systems. ICEERE 2022. Lecture Notes in Electrical Engineering, vol 954. Springer, Singapore.
6. **M. Safi**, A. Aissat, H. Guesmi, S. Nacer and J.P. Velcot "Incorporation des puits quantiques des les Nanofils pour des Applications Photovoltaïques", Proceedings of the 1st international congress on Environment and Sustainable Development (ICESDI1'23) held on the 05th and 06th june 2023,Oran, Algeria.