

**UNIVERSITE DE BLIDA 1**

**Faculté des Sciences**

**Département de Physique**

**Thèse de doctorat LMD**

Spécialité physique fondamentale et appliquée

SIMULATION ET OPTIMISATION DES STRUCTURES À BASE DE NOUVEAUX  
MATÉRIAUX POUR AMÉLIORER LE RENDEMENT DES CELLULES SOLAIRES

Par

**WAFABELLIL**

**Soutenu publiquement le 25 novembre 2020 devant le jury composé de :**

M. DERBAL	Professeur, U. de Blida1	Président
A. AISSAT	Professeur, U. de Blida1	Directeur de thèse
A. MELLIT	Professeur, U. de Jijel	Examineur
L. BABA AHMED	MCA, U. de Blida1	Examinatrice
B. DENNAI B	MCA, U. de Bechar	Examineur
H. MAAREF	Professeur, U. Monastir-Tunisie	Invité

## المخلص

تهدف هذه الأطروحة المبنية على النمذجة والمحاكاة لدراسة تأثير العنصرين الألمنيوم والأزوت على مختلف الخصائص الكهروضوئية للمادة  $Al_xGa_{1-x}As_{1-y}Ny$  والموضوعة على الحامل (Ge) من أجل تحسين العائد النهائي . حيث أثبتت النتائج التي حصلنا عليها أن عنصر الألمنيوم لا يؤثر كثيرا على البنية الكريستالية للمادة بما في ذلك معامل الشبكية , طاقة الفجوة, و كذا الاضطراب بين هذه المادة و الحامل لها, الا أنه ينقص حركية الالكترونات و معامل الامتصاص , عكس الأزوت الذي يؤثر على البنية الكريستالية بشكل هائل مؤديا لظهور أربعة مستويات لطاقة الفجوة مما يزيد من معامل الامتصاص و هذا ما يرفع من المردود النهائي لهذه الخلية و قد وجدنا أن التراكيز المناسبة هي 5% للألمنيوم و 2% للأزوت حيث أن هذه التراكيز تسمح بالحصول على طاقة فجوة تقارب 1,16eV مع اضطراب في الشبكية الكريستالية =0,4% و مردود كلي يقارب 26,3% للخلية .

الكلمات المفتاحية: المادة، فجوة الشريط،  $Al_xGa_{1-x}As_{1-y}Ny / Ge$ ، الخلايا الشمسية، الخصائص البصرية الإلكترونية، التركيزات المثلى.

## **RÉSUMÉ**

L'objectif de cette thèse basée sur la modélisation et la simulation est de déterminer les concentrations optimales des différents éléments constituant la structure  $Al_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$  déposée sur le germanium (Ge) afin d'améliorer le rendement final de cette structure. Pour cela on a étudié l'effet de l'incorporation de l'azote (N) et de l'aluminium (Al) sur les différentes propriétés optoélectroniques de l'alliage. L'étude montre que l'Al influe légèrement sur la structure cristalline y compris le paramètre de maille, la bande interdite et la contrainte, tandis qu'il baisse la mobilité des porteurs de charges ainsi que le coefficient d'absorption. Au contraire, le (N) affecte significativement le réseau cristallin et cela, pour des concentrations au-delà de 10%. A cette concentration, la contrainte induite dépasse les 2%, ce qui détériore la qualité cristalline du matériau. Aussi, l'ajout de (N) modifie la structure des bandes par l'éclatement de la bande de conduction conduisant à l'apparition de plusieurs transitions énergétiques, ce qui augmente l'absorption (fondamentale et inter-bandes) et systématiquement le rendement de conversion final. Les résultats finaux montrent que les concentrations optimales sont de 5% pour l'Al et de 2% pour (N), avec une énergie de bande interdite de 1.16 eV, une contrainte de 0.4% et un rendement de conversion final de 26.3%.

**Mots clés :** *matériau, bande interdite,  $Al_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$  / Ge, cellule solaire, propriétés optoélectroniques, concentrations optimales*

## **ABSTRACT**

The objective of this thesis, based on modeling and simulation is to define optimal concentrations of different elements constituting the  $Al_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$  structure deposited on germanium (Ge) in the aim to improve the final performance of this structure. For that we studied the effect of the incorporation of (N) and (Al) on the different optoelectronic properties of the alloy. The study shows that (Al) slightly affects the crystal structure including the lattice parameter, the band gap energy and the strain, while (Al) decreased the carrier mobility as well as the absorption coefficient, unlike (N) which significantly influences the crystal structure such that for concentrations above 10% of (N), the induced strain exceeds 2%, which deteriorates the crystalline quality. Also, (N) modified the band structure by the bursting of the conduction band leading to the appearance of four energy levels which increases the absorption, as well as the efficiency. The final results obtained show that the optimal concentrations are 5% for (Al) and 2% for (N), with 1.16 eV for the band gap energy, 0.4% for strain, and a conversion efficiency equals to 26.3%.

**Keywords:** material, band gap,  $Al_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$  /Ge, Solar cell, optoelectronic properties, optimal concentrations.

## DÉDICACES

Six ans de thèse ne se résument pas uniquement à un manuscrit et à des résultats scientifiques. Six ans de thèse sont aussi un temps de vie, un temps de jeunesse, durant lequel je suis devenue une épouse puis une maman. Au cours de cette période j'ai rencontré plusieurs difficultés mais aussi des gens qui m'ont aidé à les surmonter jusqu'à l'élaboration de cette thèse et que je profite à travers cette thèse en les remerciant infiniment. Sans être vraiment à la hauteur de leurs aides, j'aimerais dédier ces quelques lignes à ces personnes qui sont importantes pour moi.

En tout premier lieu, je remercie le bon DIEU, tout puissant, de m'avoir donné la force et la patience pour vivre les beaux et difficiles moments, de me permettre d'avoir de l'audace pour dépasser toutes les difficultés, de m'avoir entouré de gens formidables et de m'avoir offert une maman agréable qui m'a éduqué ainsi que mes enfants, Iline Nourcine et Adem, elle m'a donné le temps, le courage et le moral pour arriver à cette étape finale et m'a soutenu sans failles non seulement pendant ces dernières six années mais toute ma vie.

À ma seule et unique sœur Afaf et mes frères Ahmed Imed Eddine et Ilyes Abdelfattah.

À mon mari, Mohamed Imed Eddine qui a patienté la majorité du temps mais pas tout le temps.

À ma famille et ma belle-famille surtout mon beau-frère Hamid.

À ma meilleure amie BENAROUS Samiha.

À mes amies Sara, Sonia, Irched, Mimi et Hanane.

À tous ceux qui m'ont aidé à élaborer cette thèse de près ou de loin.

## REMERCIEMENTS

Je voudrais tout d'abord remercier grandement mon directeur de thèse, monsieur AISSAT Abdelkader, professeur à l'université de Blida1, de m'avoir fait l'honneur de rapporter ma thèse. Je suis ravi d'avoir travaillé en sa compagnie car outre son appui scientifique, il a toujours été là pour me soutenir et me conseiller au cours de l'élaboration de cette thèse.

Je tiens à remercier monsieur DERBAL Mourad, professeur à l'université de Blida1 pour avoir accepté d'être le président de jury de cette thèse.

Je remercie les autres membres du jury, d'avoir accepté d'examiner de cette thèse :

Madame BABA AHMED Latifa maître de conférences à l'université de Blida1

Monsieur MAAREF Hassen, professeur à l'université de Monastir-Tunisie,

Monsieur MELLIT Adel, professeur à l'université de Jijel

Monsieur DENNAI Benmoussa, maître de conférences à l'université de Bechar

Je tiens à remercier particulièrement monsieur DOUMAZ Toufik pour son aide précieuse et pour sa participation scientifique ainsi que le temps qu'il a consacré à la correction de cette thèse. Il a pris le temps de m'écouter et de discuter avec moi. Ses remarques m'ont permis d'envisager mon travail sous un large angle.

Je tiens à remercier vivement mes collègues avec qui j'ai pu partager des moments de réflexion et de discussions scientifiques très enrichissantes : monsieur BASTEM Rachid, madame CHENINI Linda.

## Table des matières

الملخص.....	
RÉSUMÉ .....	
REMERCIEMENTS.....	
LISTE DES FIGURES : .....	
LISTE DES ACRONYMES .....	
INTRODUCTION GENERALE .....	<b>19</b>
<b>CHAPITRE 1 : MATÉRIAUX ET TECHNOLOGIES PHOTOVOLTAIQUES .....</b>	<b>23</b>
Introduction :.....	23
1. Définition de l'énergie solaire PV .....	23
2. Historique de l'énergie PV.....	23
3. Les constituants de base d'une cellule PV .....	25
3.1 Couche antireflet.....	25
3.2 Couche fenêtre .....	25
3.3 Émetteur et base.....	26
3.4 Champ de surface arrière .....	26
3.5 Le substrat.....	26
3.6 Contacts face avant et arrière .....	26
4. Les principales filières PV .....	27
4.1 Technologie à base des semiconducteurs III-V .....	27
4.2 Technologie à base des multi-jonctions .....	27
5. Les différentes générations PV .....	28
5.1 Les cellules PV de la première génération.....	28
5.2 Les cellules PV de la deuxième génération.....	28
5.3 Les cellules PV de troisième génération .....	29
6. Le rendement des différentes filières PV .....	29
Conclusion .....	32
<b>CHAPITRE 2 : PHYSIQUES DES CELLULES PV .....</b>	<b>33</b>
Introduction.....	33
1. Le rayonnement solaire et nombre de masse d'air.....	33
2. Interactions rayonnement matière .....	35
2.1 L'origine des bandes d'énergies.....	36

2.4	Semiconducteurs extrinsèques : .....	39
2.5	Étude des jonction (pn) abrupte et graduelle.....	40
2.7	La jonction (pn) hors équilibre.....	46
3.	La caractéristique courant tension I (V).....	48
4.	Modélisation de la cellule PV .....	49
7	Les paramètres PV d'une cellule solaire dans le cas idéal.....	51
7.1	Courant de court-circuit $I_{cc}$ .....	51
7.2	Tension à circuit ouvert $V_{CO}$ .....	51
7.3	Rendement quantique de la cellule QE .....	51
7.4	Facteur de forme FF .....	52
7.5	Le rendement de conversion $\eta$ .....	52
8	Le principe de l'effet PV.....	53
9	L'influence des pertes sur le rendement $\eta$ de la cellule PV .....	54
9.1	Les pertes physiques (énergétiques).....	54
9.2	Les solutions pour minimiser les pertes physiques .....	54
9.3	Les pertes technologiques (optiques).....	54
9.4	Les solutions pour minimiser les pertes technologiques.....	55
	Conclusion .....	56
<b>CHAPITRE 3 : PRÉSENTATION DES MODÈLES UTILISÉ.....</b>		<b>57</b>
	Introduction.....	57
1.	Propriétés structurales:.....	57
1.1	Le choix de la méthode <b>k.p</b> :.....	57
1.2	Les niveaux d'énergie dans la méthode <b>k.p</b> .....	59
1.3	La structure des bandes dans le cas d'absence de contraintes : .....	61
1.4	L'effet de la contrainte sur les niveaux d'énergie :.....	62
1.5	L'effet de l'azote (N) sur la bande de conduction (le modèle de anticrossing BAC) : .....	66
1.6	L'effet de l'antimoine (Sb) et le bismuth (Bi) sur la bande de valence (le modèle de valence anticrossing VBAC) :.....	68
1.7	La combinaison entre le modèle BAC et le modèle VBAC :.....	68
1.8	Les diagrammes d'énergie selon les modèles BAC, VBAC, DBAC :.....	77
1.9	L'interpolation linéaire .....	78
1.10	La notion de l'épaisseur critique.....	81

1.11	L'effet de la température sur l'énergie de la bande interdite .....	83
1.12	L'effet de la pression sur l'énergie de gap .....	85
2.	La modélisation du coefficient d'absorption pour les semiconducteurs III-V .....	88
3.	Modélisation du phénomène de transport pour les semiconducteurs III-V .....	94
	Conclusion .....	99
<b>CHAPITRE 4 :SIMULATION, RÉSULTATS ET DISCUSSIONS .....</b>		<b>100</b>
	Introduction.....	100
1.	L'intérêt de la structure $Al_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$ .....	100
2.	Propriétés électroniques .....	101
2.1	L'effet de l'incorporation de (N) et le (Al) sur le paramètre de maille :.....	102
2.2	L'effet de l'incorporation de (N) et de l'(Al) sur la contrainte .....	104
2.3	L'effet de l'incorporation de (N) et de (Al) sur l'épaisseur critique .....	105
3.	Propriétés structurales.....	106
3.1	L'effet de l'incorporation de (N) et de l'(Al) sur la bande interdite .....	107
3.2	Le diagramme d'énergie pour la structure $Al_{0.06}Ga_{0.94}As_{0.98}N_{0.02}$ .....	108
3.3	L'effet de la température sur la bande interdite des alliages à base de $Al_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$ .....	110
3.4	L'effet de la pression sur la bande interdite pour les alliages à base de $Al_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$ .....	112
4.	Propriétés de transport pour les alliages à base de $Al_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$ .....	114
4.1	L'effet de la température et la concentration de dopage des impuretés sur la mobilité .....	114
4.2	L'effet de l'incorporation de (N) et de l'(Al) sur la mobilité.....	116
5.	Propriétés optiques (le coefficient d'absorption pour la structure $Al_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$ ) .....	118
5.1	L'effet de la concentration de (N) et de (Al) sur le coefficient d'absorption pour une énergie incidente donnée: .....	119
5.2	L'étude du coefficient d'absorption total en fonction des longueurs d'onde $\lambda$ pour les structures à base de l'alliage $Al_{0.01}Ga_{0.99}As_{1-y}N_y$ avec ( $y \leq 10\%$ ) : .....	124
6.	Propriétés électriques .....	129
6.1	L'efficacité quantique externe (EQE) .....	129
6.2	La caractéristique J(V).....	131
6.3	La puissance P(V) :.....	133
7.	L'étude des propriétés optoélectroniques de la structure $Al_{0.05}Ga_{0.95}As_{0.98}N_{0.02}$ .....	136
7.1	Les propriétés structurales : .....	136
7.2	Les caractéristiques optiques (les coefficients d'absorption).....	137

7.3	Les propriétés de transport : .....	138
7.4	Les propriétés électriques de la cellule formée par la structure optimale : .....	139
	Conclusion .....	140
	CONCLUSION GÉNÉRALE.....	141
	PUBLICATIONS.....	144
	REFERENCES .....	145

## LISTE DES FIGURES :

### CHAPITRE1 : Matériaux et technologies photovoltaïques

Figure1. 1 :	Structure d'une cellule PV standard .....	25
Figure1. 2 :	Évolution des rendements record obtenus pour les cellules seules pour les différentes filières PV (1975-2019) .....	31
Figure1. 3 :	Évolution des rendements record obtenus pour les modules pour les différentes filières PV (1975-2019) .....	31

### CHAPITRE2 : Physiques des cellules PV

Figure 2. 1 :	Les constantes d'illumination .....	34
Figure 2. 2 :	Irradiance en fonction de la longueur d'onde AM .....	35
Figure 2. 3 :	Structure de bande des trois catégories de matériaux .....	36
Figure 2. 4 :	Formation des bandes d'énergie pour les électrons atomiques .....	37
Figure 2. 5 :	Semiconducteurs : (a) à gap direct (b) à gap indirect .....	37
Figure 2. 6 :	Représentation simplifiée de la structure de silicium .....	38
Figure 2. 7 :	Représentation de silicium extrinsèque de type n .....	39
Figure 2. 8 :	Représentation de silicium extrinsèque de type p .....	40
Figure 2. 9 :	Évolution de la différence ( $N_d - N_a$ ). a) abrupte et b) graduelle .....	41
Figure 2. 10 :	Deux semiconducteurs de type p et n (a) avant contact (b) après contact (jonction (pn) à l'équilibre thermodynamique .....	42
Figure 2. 11 :	Les phénomènes électriques dans une jonction (pn) à l'équilibre thermodynamique .....	43
Figure 2. 12 :	Évolution de la densité de charge $\rho(x)$ .....	44
Figure 2. 13 :	Champ électrique dans les différentes régions de la jonction.....	44
Figure 2. 14 :	Diagramme énergétique des semiconducteurs (dopé type p et dopé type n) après la formation de la jonction .....	45
Figure 2. 15 :	(a) la caractéristique I-V d'une cellule à l'obscurité et sous éclairage, (b) puissance délivrée par la cellule en fonction de la tension de polarisation .....	48
Figure 2. 16 :	Schéma électrique équivalent d'une cellule .....	50
Figure 2. 17 :	Principe de fonctionnement d'une cellule PV .....	53

### CHAPITRE3 : PRÉSENTATION DES MODÈLES UTILISÉ

Figure 3. 1: : La bande de conduction et la bande de valence pour la structure binaire GaAs en fonction de vecteur k selon la direction [1 0 0].....	61
Figure 3. 2: : Structure des bandes en cas d'absence de contraintes.....	62
Figure 3. 3: : L'adaptation du paramètre de maille de la couche épitaxiale avec le substrat a) cas de tension ( $a_c < a_s$ ), b) cas de compression ( $a_c > a_s$ ).....	63
Figure 3. 4: Diagrammes d'énergie de trois structures a) en compression b) non contracté c) en tension .	64
Figure 3. 5: Éclatement de la bande de conduction pour la structure GaAsN en fonction de la concentration de N.....	67
Figure 3. 6 : Éclatement de la bande de conduction pour la structure InGaAsN en fonction de la concentration de N.....	67
Figure 3. 7: Les datas expérimentaux [89] et les résultats de simulation dans le cadre de modèles BAC et DBAC. ....	75
Figure 3. 8: Le décalage de résultats de simulation par rapport aux datas expérimentaux [89] .....	76
Figure 3. 9: Diagramme d'énergie selon différents modèles sous différents effets.....	77
Figure 3. 10: La bande interdite de la structure InGaN en fonction de la concentration de l'In.....	80
Figure 3. 11: La bande interdite de la structure GaAsN en fonction de la concentration de N .....	81
Figure 3. 12: Illustrations d'une couche A) sous contrainte B) relaxée.....	82
Figure 3. 13: Épaisseur critique en fonction de la concentration de N pour l'alliage $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ .....	83
Figure 3. 14: Energie de la bande interdite en fonction de la température pour différentes structures GaAs, $\text{Al}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{As}$ ( $x=0.1, 0.17, 0.3, 0.4$ ).....	84
Figure 3. 15: Energie de la bande interdite en fonction de la pression .....	87
Figure 3. 16: Coefficients d'absorption $\alpha$ en fonction de la longueur d'onde $\lambda$ pour des différentes structures binaires .....	88
Figure 3. 17: : Coefficients d'absorption $\alpha$ en fonction de la longueur d'onde $\lambda$ pour la structure ternaire $\text{Al}_{10}\text{Ga}_{90}\text{As}$ .....	89
Figure 3. 18: : Coefficients d'absorption $\alpha$ en fonction de la longueur d'onde $\lambda$ pour la structure quaternaire $\text{GaInP}_{76}\text{As}_{24}$ .....	90
Figure 3. 19: Coefficient d'absorption mesuré et simulé pour les alliages ternaires InGaN à deux énergies de bande interdite 2,95 eV et 2,45 eV en fonction de l'énergie incidente E.....	91
Figure 3. 20: Coefficient d'absorption mesuré et simulé pour l'alliage quaternaire $\text{In}_{0.04}\text{Ga}_{0.96}\text{As}_{0.99}\text{N}_{0.01}$ en fonction de l'énergie incidente E .....	93
Figure 3. 21: Mobilité des électrons en fonction de la concentration de dopage pour différentes structures : Si, Ge, GaAs, InP à $T=300$ K.....	95
Figure 3. 22: Mobilité des électrons en fonction de la concentration de dopage pour GaAs, à $T=300$ K pour différents modèles et mesures expérimentales.....	96
Figure 3. 23: Mobilité des électrons en fonction de la concentration d'(Al) pour le ternaire $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$	98

Figure 3. 24: Mobilité des électrons en fonction de la concentration d'As pour différentes structures quaternaires à base de l'alliage InGaAsP.....	98
---	----

## CHAPITRE4 : SIMULATION, RÉSULTATS ET DISCUSSIONS

Figure 4. 1: Le paramètre de maille de l'alliage $Al_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$ en fonction de la concentration de (N) et de l'(Al).....	103
Figure 4. 2: La contrainte totale de la structure $Al_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$ déposé sur Ge en fonction des concentrations de (N) et de (Al).....	104
Figure 4. 3: L'épaisseur critique de la structure $Al_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$ déposé sur le Ge en fonction de la concentration de (N) et de l'(Al).....	105
Figure 4. 4: L'épaisseur critique de la structure $Al_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$ déposé sur Ge en fonction de la concentration de (N) et de l'(Al).....	106
Figure 4. 5: L'énergie de la bande interdite de la structure $Al_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$ déposé sur Ge en fonction de la concentration de(N) et d'(Al).....	107
Figure 4. 6: Diagramme d'énergie pour la structure $Al_{0.06}Ga_{0.94}As_{0.98}N_{0.02}$ .....	109
Figure 4. 7: L'éclatement de la bande de conduction sous l'effet N pour différentes structures.....	110
Figure 4. 8 : L'énergie de la bande interdite en fonction de la température pour des différentes structures .....	111
Figure 4. 9: L'énergie de la bande interdite en fonction de la pression .....	113
Figure 4. 10: La mobilité des électrons en fonction de la concentration du dopage des impuretés pour différentes températures.....	115
Figure 4. 11: La mobilité des trous en fonction de la température et la concentration du dopage des impuretés.....	116
Figure 4. 12 : La mobilité des électrons en fonction des concentrations de (N) et de (Al).....	116
Figure 4. 13: La mobilité des trous en fonction des concentrations de (N) et de l'(Al).....	117
Figure 4. 14 : Le diagramme d'énergie et les coefficients d'absorption pour les quatre transitions .....	118
Figure 4. 15 : Les coefficients d'absorption en fonction de (N) et de (Al) pour une $E= 1 eV$ .....	119
Figure 4. 16 : $ac - lh$ – en fonction de la concentration de (N) et de (Al) pour une $E=1eV$ .....	120
Figure 4. 17 : le coefficient d'absorption $ac - hh$ – en fonction de la concentration de (N) et de (Al) pour une $E=1eV$ .....	120
Figure 4. 18 : Les coefficients d'absorption en fonction de la concentration de (N) et de (Al) pour $E= 2 eV$ .....	121
Figure 4. 19: $ac - lh$ – en fonction de la concentration de (N) et de (Al) pour $E=2V$ .....	122
Figure 4. 20 : $ac - hh$ – en fonction de la concentration de (N) et de (Al) pour $E=2 eV$ .....	122
Figure 4. 21: $ac - hh +$ en fonction des concentrations N et de (Al) pour $E=2 eV$ .....	123
Figure 4. 22: $ac - lh +$ en fonction de la concentration de (N) et de (Al) pour $E= 2 eV$ .....	124
Figure 4. 23 : le coefficient d'absorption total pour des structures à base de l'alliage $Al_{0.01}Ga_{0.99}As_{1-y}N_y$ en fonction des énergies incidentes avec ( $x=1\%$ et $1\% \leq y \leq 10\%$ ) .....	125
Figure 4. 24 : Les coefficients d'absorption totale des différentes structures à base de l'alliage $Al_{0.1}Ga_{0.9}As_{1-y}N_y$ en fonction des énergies incidentes.....	127

Figure 4. 25 : Les coefficients d'absorption totale des différentes structures à base de l'alliage $Al_{0.8}Ga_{0.2}As_{1-y}N_y$ en fonction des énergies incidentes.....	128
Figure 4. 26 : L'efficacité quantique externe en fonction de $\lambda$ pour différentes structures à base de l'alliage $Al_{0.01}Ga_{0.99}As_{1-y}N_y$ .....	130
Figure 4. 27: L'efficacité quantique externe (EQE) en fonction de $\lambda$ pour différentes structures à base de l'alliage $Al_{0.8}Ga_{0.2}As_{1-y}N_y$ .....	130
Figure 4. 28 : La caractéristique $J(V)$ pour différentes structures à base de l'alliage $Al_{0.01}Ga_{0.99}As_{1-y}N_y$ ( $y \leq 10\%$ ).....	132
Figure 4. 29: La caractéristique $J(V)$ pour différentes structures à base de l'alliage $Al_{0.8}Ga_{0.2}As_{1-y}N_y$ ( $y \leq 10\%$ ).....	132
Figure 4. 30: La puissance en fonction de la tension pour différentes structures à base de l'alliage $Al_{0.01}Ga_{0.99}As_{1-y}N_y$ .....	133
Figure 4. 31 : La puissance (P) en fonction de de la tension (V) pour différentes structures à base de l'alliage $Al_{0.8}Ga_{0.99}As_{1-y}N_y$ .....	134
Figure 4. 32: Les lieux géométriques des puissances maximales pour différentes des structures à base de l'alliage $Al_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$ ( $y \leq 10\%$ ).....	135
Figure 4. 33: Les lieux géométriques de la puissance maximale pour différentes structures à base de l'alliage $Al_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$ ( $1 \leq x \leq 10\%$ et $2 \leq y \leq 4\%$ ) .....	135
Figure 4. 34: Diagramme d'énergie pour la structure $Al_{0.05}Ga_{0.95}As_{0.98}N_{0.02}$ .....	137
Figure 4. 35: Coefficients d'absorption de la structure $Al_{0.05}Ga_{0.95}As_{0.98}N_{0.02}$ en fonction de l'énergie du photon incident.....	137
Figure 4. 36: Domaine d'absorption de la structure $Al_{0.01}Ga_{0.99}As_{0.97}N_{0.03}$ .....	138
Figure 4. 37: La mobilité des porteurs de charges pour la structure $Al_{0.05}Ga_{0.95}As_{0.98}N_{0.02}$ en fonction de la température .....	139
Figure 4. 38: Les caractéristiques électriques de la structure $Al_{0.05}Ga_{0.95}As_{0.98}N_{0.02}$ en fonction de la tension .....	139

## LISTE DE TABLEAUX

### CHAPITRE 3 : PRÉSENTATION DES MODÈLES UTILISÉ

Tableau 3. 1: Paramètres de la structure binaire GaAs dans le modèle k.p pour un Hamiltonien à huit bandes .....	60
Tableau 3. 2 : Les valeurs des paramètres empiriques utilisés par Aho et al. [89] et Bakir et al. [94] :.....	73
Tableau 3. 3 Les valeurs expérimentales [89] et numériques de nos simulations .....	74
Tableau 3. 4: Les constantes empiriques utilisées pour le calcul de la bande interdite en fonction de la température pour les structures à base de l'alliage AlGaAs .....	84
Tableau 3. 5 : les constantes empiriques utilisées pour le calcul de la bande interdite en fonction de la pression .....	85
Tableau 3. 6: les constantes utilisées pour le calcul de mobilité des alliages GaAs, InP, Si, Ge .....	94

### CHAPITRE 4 : SIMULATION, RÉSULTATS ET DISCUSSIONS

Tableau 4. 1 : Les paramètres des structure binaires utilisés pour le calcul des propriétés optoélectroniques .....	102
Tableau 4. 2: Les quatre transitions et les mesures de Kolhatkar et al. [140] pour différentes structures	108
Tableau 4. 3 : Les constantes empiriques utilisées pour le calcul de la bande interdite en fonction de la température .....	111
Tableau 4. 4: Les constantes empiriques utilisées pour le calcul de la bande interdite en fonction de la pression illustrées sur la figure (4.9).....	113
Tableau 4. 5 : les paramètres de la mobilité des électrons et des trous pour les différentes binaires .....	114
Tableau 4. 6: les valeurs de transitions énergétiques et le nombre des points singuliers pour des structures à base de l'alliage $Al_x Ga_{1-x}As_{1-y}N_y$ (avec $x=1\%$ et $1\% \leq y \leq 10\%$ ).....	126
Tableau 4. 7: les valeurs de transitions énergétiques pour des structures à base de l'alliage $Al_x Ga_{1-x}As_{1-y}N_y$ (avec $x=10\%$ et $1\% \leq y \leq 10\%$ ).....	127
Tableau 4. 8: les valeurs de l'efficacité quantique externe EQE pour des structures à base de l'alliage $Al_x Ga_{1-x}As_{1-y}N_y$ (avec $x=1, 80\%$ et $1\% \leq y \leq 10\%$ ) .....	131

## LISTE DES ACRONYMES

Liste des Acronymes	
<b>AlGaAsN</b>	Aluminum/ Gallium/ Arsenic/ Azote
<b>AM</b>	Masse d'air
<b>a-Si:H</b>	Silicium amorphe hydrogéné
<b>ASTM</b>	American Society for Testing and Materials
<b>BC</b>	Bande de conduction
<b>BSF</b>	Back Surface Field
<b>BV</b>	Bande de valence
<b>CdS</b>	Sulfure de Cadmium
<b>CdTe</b>	Tellurure De Cadmium
<b>CIGS</b>	Cuivre/Indium/Gallium/Sélénium
<b>CNT/TiO2</b>	Carbon nanotube/Titanium dioxide
<b>CPV</b>	Concentrateur photovoltaïque
<b>c-Si</b>	Silicium cristallin
<b>EQE</b>	Efficacité Quantique externe
<b>EQI</b>	Efficacité Quantique Interne
<b>EWT</b>	Emitter Wrap Through
<b>GaAs</b>	Arséniure de gallium
<b>HIT</b>	Heterojunction with Intrinsic Thin film
<b>HTM</b>	hole-transporting materials
<b>IBC</b>	Interdigitated Back Contact
<b>ISO</b>	Organisation Internationale de Standardisation
<b>MJ</b>	Multi-Jonctions
<b>NREL</b>	National Renewable Energy Laboratory
<b>PERC</b>	Passivated Emitter and Rear Cell
<b>PERF</b>	Passivated Emitter, Rear Floating junction cell
<b>PERL</b>	Passivated Emitter, Rear Locally diffused cell
<b>PERT</b>	Passivated Emitter, Rear Totally diffused cell
<b>PV</b>	Photovoltaïques
<b>QE</b>	Rendement quantique
<b>RS</b>	La réponse spectrale
<b>Si</b>	Silicium
<b>TCO</b>	Transparent Conductive Oxide
<b>TEP/HAB</b>	Tonne équivalent pétrole par habitant
<b>TOPC</b>	Tunnel Oxide Passivated Contact
<b>UNSW</b>	University of New South Wales
<b>ZCE</b>	Zone de charge électrique

<b>Liste des paramètres</b>		
<b>Généraux</b>		
<b>c</b>	Vitesse de la lumière	299 792 458 m.s <sup>-1</sup>
<b>ε<sub>0</sub></b>	Permittivité du vide	8,85×10 <sup>-12</sup> F.m <sup>-1</sup>
<b>h</b>	Constante de Planck	4,136×10 <sup>-15</sup> eV.s
<b>ħ</b>	Constante de Planck restreinte	6,582×10 <sup>-16</sup> eV.s
<b>k</b>	Constante de Boltzmann	8,617×10 <sup>-5</sup> eV.K <sup>-1</sup>
<b>m<sub>0</sub></b>	Masse d'un électron	0,511 MeV.c <sup>-2</sup>
<b>q</b>	Charge élémentaire	1,602×10 <sup>-19</sup> C
<b>T</b>	Température	K
<b>P</b>	Pression	GPa
<b>Paramètres structurels</b>		
<b>a</b>	Paramètre de maille d'un cristal dans le plan	Å
<b>C<sub>11</sub></b>	Constante élastique selon l'axe x	GPa
<b>C<sub>12</sub></b>	Constante élastique dans le plan (x,y)	GPa
<b>ε<sub>xx</sub></b>	Déformation dans le plan de la couche	s.d.
<b>ε<sub>zz</sub></b>	Déformation selon la direction de la croissance	s.d.
<b>ε<sub>total</sub></b>	Déformation totale	s.d.
<b>E<sub>c</sub></b>	Énergie de La bande de conduction	eV
<b>E<sub>v</sub></b>	Énergie de La bande de valence	eV
<b>E<sub>g</sub></b>	Énergie de La bande interdite	eV
<b>E<sub>so</sub></b>	Énergie de La bande spin orbite	eV
<b>ΔE<sub>c</sub></b>	Discontinuité de la bande de conduction	eV
<b>ΔE<sub>v</sub></b>	Discontinuité de la bande de valence	eV
<b>φ<sub>c</sub></b>	Rapport de décalage de la bande de conduction	s.d.
<b>φ<sub>v</sub></b>	Rapport de décalage de la bande de valence	s.d.
<b>E<sub>hh</sub></b>	Énergie de La bande de trous lourds	eV
<b>E<sub>lh</sub></b>	Énergie de La bande de trous légers	eV
<b>E<sub>v,moy</sub></b>	Contre de gravité de la bande de valence	eV
<b>a<sub>c</sub></b>	Potentiel hydrostatique de déformation pour la bande de conduction	eV
<b>a<sub>v</sub></b>	Potentiel hydrostatique de déformation pour la bande de valence	eV
<b>ε<sub>//</sub></b>	Déformation parallèle	s.d.
<b>ε<sub>⊥</sub></b>	Déformation perpendiculaire	s.d.
<b>h<sub>c</sub></b>	Épaisseur critique	nm
<b>μ<sub>g</sub><sup>min</sup></b>	Mobilité minimale	Cm <sup>2</sup> .v <sup>-1</sup> . s <sup>-1</sup>
<b>μ<sub>g</sub><sup>l</sup></b>	Mobilité dans le réseau cristallin	Cm <sup>2</sup> .v <sup>-1</sup> . s <sup>-1</sup>
<b>c<sub>g</sub><sup>ref</sup></b>	Concentration des impuretés ionisées	cm <sup>-3</sup>
<b>γ</b>	Coefficient de poisson	s.d.

<b>Paramètres électriques</b>		
<b>b</b>	Paramètre de courbure dans la loi de Vegard	eV
<b>D</b>	Coefficient de diffusion des porteurs	cm <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup>
<b>An</b>	Densité d'électrons injectés dans un matériau N	cm <sup>-3</sup>
<b>Ap</b>	Densité de trous injectés dans un matériau P	cm <sup>-3</sup>
<b>ε<sub>r</sub></b>	Permittivité relative du matériau /constante diélectrique	s.d.
<b>E</b>	Champ électrique	V.m <sup>-1</sup>
<b>FF</b>	Facteur de forme d'une caractéristique courant-tension	s.d.
<b>I</b>	Courant	A
<b>I<sub>cc</sub></b>	Courant de court-circuit	A
<b>I<sub>max</sub></b>	Courant maximum fourni par une cellule	A
<b>I<sub>ph</sub></b>	Courant photo-généré	A
<b>I<sub>s</sub></b>	Courant de saturation	A
<b>J</b>	Densité de courant	A.cm <sup>-2</sup>
<b>k</b>	Vecteur d'onde	cm <sup>-1</sup>
<b>L</b>	Longueur de diffusion des porteurs	m
<b>me</b>	Masse d'un électron dans la bande de conduction	MeV.c <sup>-2</sup>
<b>me*</b>	Masse effective d'électron dans la bande de conduction	MeV.c <sup>-2</sup>
<b>mh</b>	Masse d'un trou dans la bande de valence	MeV.c <sup>-2</sup>
<b>mh*</b>	Masse effective d'un trou dans la bande de valence	MeV.c <sup>-2</sup>
<b>Na</b>	Densité de dopants accepteurs ionisés dans un matériau P	cm <sup>-3</sup>
<b>Nc</b>	Densité d'états au bord de la bande de conduction	cm <sup>-3</sup>
<b>Nd</b>	Densité de dopants donneurs ionisés dans un matériau N	cm <sup>-3</sup>
<b>Nv</b>	Densité d'états au bord de la bande de valence	cm <sup>-3</sup>
<b>n</b>	Densité d'électrons libres	cm <sup>-3</sup>
<b>ni</b>	Densité de porteurs libres intrinsèques	cm <sup>-3</sup>
<b>P<sub>max</sub></b>	Puissance maximale fournie par une cellule	W.m <sup>-2</sup>
<b>R<sub>p</sub></b>	Résistance parallèle	Ω
<b>R<sub>s</sub></b>	Résistance de série	Ω
<b>ρ</b>	Densité totale de charges	C.m <sup>-3</sup>
<b>τ</b>	Temps de vie des porteurs	s
<b>μ</b>	Mobilité des porteurs	m.s <sup>-1</sup>
<b>V</b>	Potentiel	V
<b>V<sub>max</sub></b>	Tension maximale fournie par une cellule	V
<b>V<sub>oc</sub></b>	Tension de circuit ouvert	V
<b>v̄</b>	Vitesse moyenne des porteurs libres	cm.s <sup>-1</sup>
<b>F<sub>0</sub></b>	Flux des photons incidents non réfléchis.	W .m <sup>-2</sup>
<b>S<sub>p</sub></b>	Vitesse de recombinaison des trous minoritaires	cm <sup>3</sup> .s <sup>-1</sup>
<b>S<sub>n</sub></b>	Vitesse de recombinaison de électrons minoritaires	cm <sup>3</sup> .s <sup>-1</sup>

<b>Paramètres optiques</b>		
<b>A</b>	Spectre d'absorption (d'absorbance)	cm <sup>-1</sup> (%)
<b><math>\alpha</math></b>	Coefficient d'absorption	cm <sup>-1</sup>
<b>n</b>	Indice de réfraction	s.d.
<b>k</b>	Coefficient d'atténuation ou d'extinction	s.d.
<b><math>\lambda</math></b>	Longueur d'onde d'un photon	nm
<b>R</b>	Spectre de réflexion (réflectance)	cm <sup>-1</sup> (%)
<b>T</b>	Spectre de transmission (transmittance)	cm <sup>-1</sup> (%)
<b><math>\nu</math></b>	Fréquence d'un photon	cm <sup>-1</sup>

## INTRODUCTION GENERALE

Vu l'augmentation de la population mondiale [1] et l'utilisation accrue de l'énergie sous forme d'électricité par personne dans le monde d'une part [2], la baisse des ressources énergétiques traditionnelles et l'apparition de leur effets indésirables sur l'être humain et l'environnement d'autre part [3], il est devenu primordial de trouver des sources d'énergies alternatives, non polluantes, renouvelables et favorisant le développement durable [4]. L'exploitation de l'énergie solaire présente une solution très prometteuse à ces problèmes [4-8]. En effet, l'irradiation solaire reçue par la Terre en un an est plus élevée que toutes les réserves fossiles et fissiles combinées présentes sur la planète ainsi que la consommation mondiale annuelle [9,10].

Dans le but de convertir le rayonnement solaire en électricité, des dispositifs appelés cellules photovoltaïques (PV) ont été développés [4]. On appelle les matériaux qui absorbent les particules composant la lumière, ou photons des semiconducteurs. Une cellule PV est obtenue en mettant en contact un semiconducteur dopé-p, où les trous sont les porteurs majoritaires, avec un semiconducteur dopé-n, où les électrons sont les porteurs majoritaires, formant ainsi une jonction (pn). Suivant les matériaux composants la cellule PV, il n'y a que certains photons du spectre solaire qui sont absorbés et génèrent alors, des paires électron-trou qui vont être séparées à l'aide de la jonction (pn) [11,12].

Différents types de cellules PV ont été développés jusqu'à présent. Dont certaines sont déjà disponibles, tel que les cellules PV à base de silicium (Si), avec des rendements maximums de l'ordre de 28% et n'ont pas augmenté de façon significative depuis 20 ans, indiquant qu'il est difficile d'accroître encore leurs performances [5]. En effet ces cellules en (Si) et malgré les différentes évolutions technologiques ont atteint le maximum d'absorption du rayonnement solaire et donc elles ont atteint la limite de leur rendement [5].

Pour exploiter une grande portion du spectre solaire, il a été proposé d'empiler une série de couches. Chacune d'elles absorbant une partie du spectre lumineux. Parmi les matériaux proposés, les plus adéquats sont les semiconducteurs III-V. Ceux-ci sont formés en combinant des atomes du groupe III du tableau périodique avec des atomes du groupe V [12]. Les cellules PV ainsi

obtenues sont appelées cellules PV à multi-jonctions (MJ) III-V [13,14]. Chaque sous-cellule, consiste en une jonction (pn) fabriquée à partir de matériaux semiconducteurs III-V, absorbant les photons qui ont une énergie supérieure ou égale à l'énergie de la bande interdite du matériau utilisé [11,12]. Cette dernière, identifiée en tant que distance qui sépare la bande de valence (où sont situés les électrons initialement avant tous type d'excitation) de la bande de conduction (où passent les électrons excités). Donc les jonctions sont empilées par band interdite descendant en profondeur de manière à permettre l'absorption du spectre solaire par section. [11,12]. La cellule PVMJ III-V peut ainsi convertir plus de 40 % de l'énergie solaire en électricité [13]. Jusqu'à présent, ces cellules PVMJ III-V ont été principalement utilisées pour des applications spatiales, et même terrestre mais sophistiqué car leur coût de fabrication élevé présente un obstacle à leur déploiement en masse [14].

Les cellules PV MJ les plus communes sont composées de trois jonctions (pn) fabriquées à partir de InGaP (1.8 eV) /InGaAs (1.4 eV) /Ge (0.67 eV) [13]. La grande différence entre les bands gaps du Ge (0.67 eV) et de l'InGaAs (1.4 eV) engendre des pertes par thermalisation ce qui entraine le vieillissement de matériau. Pour minimiser ces pertes, une sous-cellule additionnelle pourrait être insérée entre les jonctions d'InGaAs et de Ge [15].

Dans le cadre d'une cellule triple jonction, notre sujet de recherche actuel traitera l'ajout d'une quatrième jonction, travail qui est d'actualité dans plusieurs laboratoires de recherche. Pour fabriquer cette quatrième jonction, il faut un matériau avec une bande interdite intermédiaire d'environ 1 eV et en accord de maille avec le (Ge) [16]. Il existe plusieurs candidats et les plus intéressants sont les nitrures dilués spécifiquement le  $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ . Il attire beaucoup d'attention à cause de sa réduction spectaculaire de la bande interdite et simultanément une baisse importante du paramètre de maille de ce matériau avec l'incorporation d'une faible quantité de (N) [16]. Le développement de cet alliage de bonne qualité est limité par la faible efficacité d'incorporation de (N). Or, des études préliminaires ont démontré que l'(Al) permet d'augmenter de façon significative l'incorporation de (N) et d'une manière plus homogène, ce qui permet d'avoir un matériau avec une bonne qualité cristalline [16]. L'ajout de l'(Al) mène à l'alliage :  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$  et c'est l'objet de notre travail de thèse. Il consiste en la modélisation et la simulation de l'effet d'incorporation de (N) et de l'(Al) sur les différentes propriétés optoélectroniques de la structure  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$  déposé sur le Ge, tels que la contrainte, la structure des bandes, l'énergie de la

bande interdite, la mobilité des porteurs de charge, le spectre d'absorption et le rendement de conversion finale de la jonction  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$  déposé sur le Ge. Cette étude nous permettra à la fin, de déterminer les concentrations optimales pour avoir un alliage en accord de maille avec le (Ge), d'une énergie de gap proche de 1 eV et qui donnera le plus haut rendement possible.

Cette thèse est composée de quatre chapitres. Le premier, offre une revue de l'état de l'art relatif aux matériaux PV utilisés ; en premier lieu on a abordé principalement la problématique de notre sujet, la définition de l'énergie solaire PV et un bref historique. Ensuite on a présenté les différents constituants de base d'une cellule PV conventionnelle, ainsi que les différentes filières et générations PV. Finalement on a terminé ce chapitre par une présentation des rendements enregistrés pour les cellules et les modules depuis l'apparitions de la conversion PV jusqu'à nos jours.

Le deuxième chapitre est consacré à l'étude des propriétés physiques des semiconducteurs. En commençant par l'étude du spectre solaire et ses interactions avec la matière. Par la suite on a focalisé notre attention sur la physique des semiconducteurs ainsi qu'à la jonction (pn) à l'équilibre, hors équilibre et les paramètres d'une cellule PV. En fin, on a terminé le chapitre par le principe de fonctionnement d'une cellule PV ainsi que les facteurs limitants le rendement de conversion photoélectrique de la cellule et quelques solutions proposées pour minimiser ces pertes.

Le troisième chapitre décrit les modèles théoriques utilisés pour notre simulation qui servent à l'étude des différentes propriétés des matériaux semiconducteurs. La première partie de ce chapitre on a présenté les modèles proposés pour l'étude des propriétés structurale principalement la méthode  $\mathbf{k.p}$  et l'interpolation linéaire. La deuxième partie on a décrit les modèles recommandés pour le calcul des coefficients d'absorption. Tandis que dans la troisième partie on a exposé les modèles suggérés pour l'étude de la mobilité des porteurs de charges. On a validé nos résultats de simulation en comparant les datas et les mesures publiées dans la littérature. Cette validation est faite soit pour ajuster les paramètres qu'on a choisi lors de la simulation, soit pour les méthodes de calculs utilisées entre autres, l'interpolation linéaire nécessaire à la construction des structures à base des binaires parents.

Dans le quatrième chapitre sont présentés les résultats de simulation concernant l'étude de l'effet de l'incorporation de (N) et de l'(Al) sur les propriétés électroniques y compris le paramètre de

maille, la contrainte et l'épaisseur critique. En ce qui concerne les propriétés structurales l'étude a porté sur la structure des bandes et les niveaux d'énergie, sur l'effet de la température et la pression sur la bande interdite. Pour les propriétés optiques notre étude s'est focalisée sur les coefficients et les domaines d'absorption. L'étude des propriétés de transport, principalement la mobilité des porteurs de charges s'est faite en fonction de la température, des concentrations de dopage des impuretés ainsi que l'impact de l'incorporation de (N) et de (Al). Finalement, l'étude des propriétés électriques s'est intéressée aux différents paramètres de la cellule PV. Sachant que l'objectif final est la détermination des concentrations optimales des différents éléments constituant l'alliage  $Al_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$ . Après la détermination de la structure optimale, un dernier calcul a été effectué pour avoir les nouvelles propriétés optoélectroniques telles que l'énergie de la bande interdite, la contrainte, et le rendement final. Nos résultats de simulation ont été validés par les données expérimentales publiées dans la littérature.

Une conclusion générale et perspectives termine cette thèse en suggérant l'insertion de cette couche pour la construction d'une cellule quadri jonction optimale.

# CHAPITRE 1 : MATÉRIAUX ET TECHNOLOGIES PHOTOVOLTAIQUES

## Introduction :

Depuis son avènement en 1954, la conversion PV a connu de nombreuses avancées technologiques où elle est passée par différentes générations, trois jusqu'à nos jours. Elle a connu une augmentation spectaculaire du rendement de conversion. Il est passé de 6% en 1954 à 47% en 2018 [17] (soit un facteur de 8). Cette technologie a utilisé plusieurs matériaux organiques et inorganiques tels que les semiconducteurs classiques, qu'il s'agisse du Si, et des semiconducteurs composés y compris ceux du type III-V. Au-delà de l'aspect matériaux cette avancée technologique est passée de l'utilisation d'une simple jonction à base de couches massives à des cellules multijonction basées sur des nanostructures. Dans ce chapitre nous allons présenter, en premier lieu, notre problématique, par la suite, nous présentons l'état de l'art de différentes technologies et matériaux PV utilisés, ainsi que l'évolution des rendements atteints par les différentes technologies.

### 1. Définition de l'énergie solaire PV

L'énergie solaire PV est une énergie renouvelable qui provient de la conversion de rayonnement solaire en électricité au sein de matériaux bien particuliers tels que les semi-conducteurs. Le terme « PV » désigne le processus physique qui consiste à transformer l'énergie lumineuse (l'énergie des photons) en énergie électrique (en électrons d'un matériau), donc le terme PV signifie littéralement l'électricité lumineuse. En effet le préfixe Photo vient du grec « phos » qui signifie lumière. « Volt » vient du patronyme d'Alessandro VOLTA (1745-1827), physicien ITALIEN qui a contribué grandement aux recherches sur l'électricité [18].

### 2. Historique de l'énergie PV

Brièvement, l'effet PV a été découvert par le physicien français Edmond BECQUEREL en 1839, par l'étude du courant produit entre deux électrodes enrobées de platine dans un récipient avec un électrolyte illuminée par le soleil. Becquerel a constaté que l'intensité du courant a changé lorsque ces électrodes sont exposées à la lumière [19]. En 1873, l'ingénieur britannique Willoughby Smith

et son assistant Joseph May ont découvert que le semiconducteur Se (Se) a changé sa résistance lorsqu'il est exposé à la lumière [20]. Peu après en 1876, ADAMS et DAY ont étudié l'effet de la lumière sur les courants traversant le sélénium (Se) avec des contacts en platine. Ils ont trouvé ultérieurement qu'une force électromotrice pourrait être induite à travers les échantillons lorsqu'ils sont illuminés [21]. L'existence de cette force électromotrice fut confirmée par premièrement FRITTS, en 1883 qui fabriqua une cellule en Se avec une contre électrode en or avec un rendement de conversion de l'ordre de 1% [22], mais le rendement de sa cellule étant très faible empêcha à l'époque son utilisation, et puis par MINCHIN dont les cellules furent des structures Al/Electrolyte/Se/Al ayant des photo-tensions supérieures à 0,5 volt à la lumière du jour. Il semble aussi que MINCHIN soit la première personne à suggérer que les cellules PV pourraient être utilisées pour produire de l'électricité avec le rayonnement solaire [23]. Le principe PV a été expliqué par Albert EINSTEIN en 1905, c'est pour cette explication qu'il a reçu le prix Nobel de Physique en 1921[24]. En 1930, on vut le jour les premières vraies cellules à base d'Oxyde Cuivreux puis au (Se). A la fin de la deuxième guerre mondiale, en 1939, l'ingénieur américain Russel OHL a découvert la jonction (pn) [25] ceci entraîna la production des cellules stables au Si avec un rendement de l'ordre de 6 % en 1954 par les trois chercheurs américains, CHAPIN, FULLER et PEARSON [26]. En 1955 PRINCE a publié la première étude analytique du rendement PV [27], et suivi de LOFERSKI a montré qu'il existe une bande interdite optimale de l'ordre de 1,5 eV pour une photopile à homo jonction (pn) [28]. Ces résultats ont stimulé des études pour d'autres matériaux tels que l'arséniure de gallium, le tellure de cadmium et le phosphore d'indium. La force mobilisatrice derrière le développement intensif des cellules solaires jusqu'en 1970 fut les programmes spatiaux [29]. Les premières cellules furent mises en orbite en mars 1958 pour fournir la puissance électrique dans les missions spatiales. L'année 1973 fut celle de la crise mondiale de l'énergie (pétrole) [30]. Elle a obligé les pays dépendants de ces énergies fossiles à mobiliser leur intelligentsia à chercher de nouvelles formes d'énergies renouvelables, propres et bon marché. Il a été admis alors que les sources d'énergies renouvelables deviendraient primordiales dans les prochaines décennies et le développement des cellules solaires pour l'utilisation terrestre serai de plus en plus répandu, ce qui explique l'augmentation spectaculaire de la réalisation des centrales PV ayant des puissances de plusieurs dizaines de GW, de telle sorte qu'entre 2010 et 2017, la puissance installée du parc PV mondial est passée de (40 GW) fin 2010 à (402 GW) fin 2017 [31].

### 3. Les constituants de base d'une cellule PV

Bien que différentes structures soient envisageables pour l'élaboration des cellules PV, des parties similaires sont présentées dans chaque structure tel que :

#### 3.1 Couche antireflet

Le rôle de la couche anti-réfléchissante est de réduire la réflectivité de la cellule au niveau de la face avant en ramenant les pertes de réflexion à moins de 5%. Sans couches anti-réfléchissantes, la cellule solaire agit comme un miroir et reflète jusqu'à 33% de la lumière incidente sur la cellule due la diminution de rendement de conversion final [33].

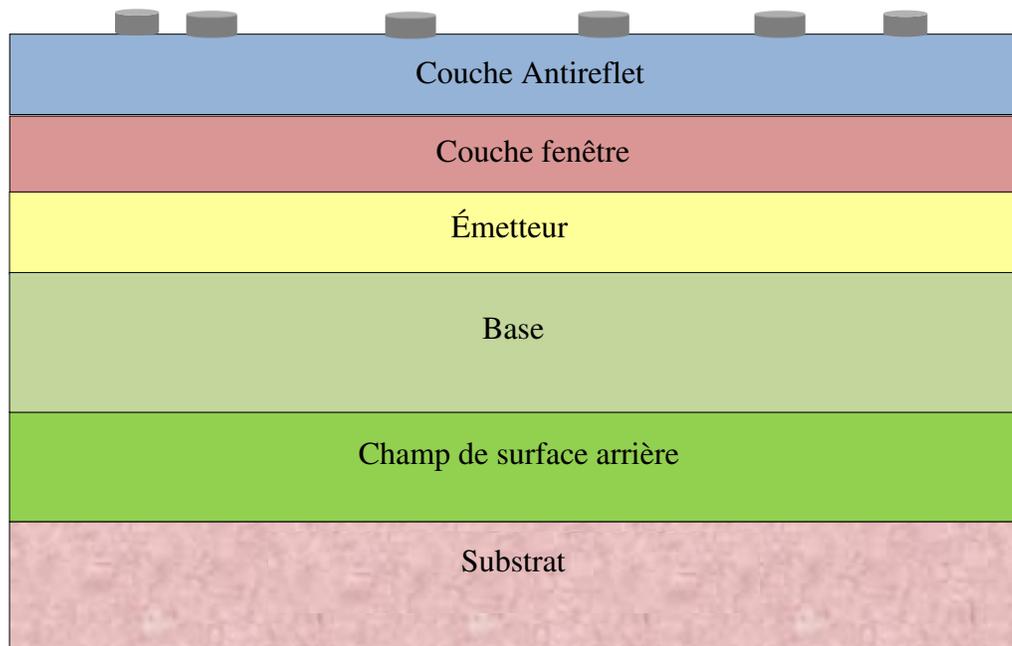


Figure1. 1 : Structure d'une cellule PV standard [32]

#### 3.2 Couche fenêtre

Une fine couche fortement dopée avec même type de dopage que celui de l'émetteur (en général dopé n) est obtenue par variation abrupte du dopage conduisant à une structure ( $n^+-n$ ), ce qui créer une barrière de potentiel dont l'objectif est de minimiser la recombinaison sur la face avant de la cellule PV [33].

### 3.3 Émetteur et base

L'émetteur est la première couche après la couche fenêtre qui reçoit la lumière. Elle doit être très mince pour minimiser l'absorption de cette dernière. Cette couche est dopée (n) où la conduction électrique est assurée par les électrons, elle possède en moyenne une quantité faible des trous libres, on les appelle porteurs minoritaires. Sous la couche « émetteur », la couche « base » dopée (p) est dite constituée de trous appelés aussi, porteurs majoritaires, assurent la conduction électrique, avec la présence d'une faible quantité d'électrons libres. Cette couche est située au-dessous du champ de surface arrière. L'ensemble forme la jonction (pn) et la majorité des photons sont absorbés au niveau de cette jonction [33].

### 3.4 Champ de surface arrière

Le champ de surface arrière en anglais (*Back Surface Field*) (BSF), est une couche fortement dopée avec le même type de dopage que celui de la base (en générale de type p), sert à minimiser la recombinaison en face arrière de la cellule, obtenue par variation abrupte du dopage conduisant à une structure (p- p+). Les matériaux sélectionnés pour la réalisation de cette couche doivent avoir un paramètre de maille proche du celui de la base [35].

### 3.5 Le substrat

Les différentes couches suscitées sont déposées sur une couche dite « substrat ». Les principaux facteurs du choix du substrat sont sa stabilité chimique et mécanique à hautes températures, son paramètre de maille, son coefficient de dilatation thermique, Son abondance dans la nature et son faible coût pour la fabrication des panneaux PV à l'échelle industrielle. Pour des fines optoélectroniques, le substrat doit avoir une large bande interdite et un indice de réfraction élevé, de sorte que les photons générés dans les couches actives du film ne soient pas absorbés par le substrat [34].

### 3.6 Contacts face avant et arrière

Les contacts métalliques servent à collecter le courant de porteurs photo-générés. La résistance des contacts est un paramètre clé où la forte résistance baisse le rendement final de la cellule. Les contacts doivent être ohmiques, c'est-à-dire, le courant passe sans aucune chute de tension [33].

#### 4. Les principales filières PV

Plusieurs filières sont utilisées dans la conception des cellules PV, beaucoup d'entre elles sont encore en phase d'expérimentation et de développement. On peut distinguer plusieurs grandes filières des cellules PV : la filière à base de Si, la filière des couches minces, la filière des matériaux organiques et la filière hybrides [17].

##### 4.1 Technologie à base des semiconducteurs III-V

À cause de leurs propriétés optoélectroniques uniques, les composés III-V, attirent l'attention des chercheurs de par le monde. Ils permettent de balayer une large plage de valeurs du gap et du coup, offrent la possibilité de couvrir un large spectre de longueurs d'ondes, constituant ainsi, une propriété optique très importante de ces cellules [36]. L'intérêt pratique des matériaux III-V est renforcé par la possibilité de fabriquer des alliages ternaires et quaternaires ou encore, plus complexes par substitution partielle de l'un des éléments par un élément de la même colonne ou plus. Ainsi Les semiconducteurs III-V sont très utilisés pour la fabrication de cellules PV multi-jonctions à haut rendement de tel sort que le meilleur rendement obtenu est de 46,0 % avec une cellule multi-jonctions à base de matériaux III-V [37]. Dans cette technologie de haut rendement et de coût très élevé, l'arséniure de gallium (GaAs) est le plus couramment utilisé pour les applications PV spatiales. Cela peut être attribué à sa grande mobilité d'électrons, à sa bande interdite directe et au bon contrôle de ses mécanismes de croissance. Les dispositifs de GaAs à jonction unique atteignent aujourd'hui un rendement approchant les 30%. Le GaAs est devenu rapidement un système de référence pour les cellules solaires à couches minces qui fait la particularité parmi tous les nouveaux matériaux.

##### 4.2 Technologie à base des multi-jonctions

Elle est composée d'un grand nombre de semiconducteurs possédant chacun un spectre limité. Si l'on choisit des matériaux qui possèdent des longueurs d'ondes très proches les unes des autres, cela permettra aux cellules d'absorber un spectre plus large et plus complet qui permettrait d'obtenir un grand rendement (actuellement 47.1%) [17]. Ce type de cellules n'est pas encore commercialisable mais développé pour les applications spatiales, leur coût de fabrication est très élevé et nécessite l'utilisation des éléments rares.

## 5. Les différentes générations PV

On peut classer ces principales technologies en trois générations. Chaque nouvelle génération tente de corriger les inconvénients de la génération précédente. La première génération basée sur des matériaux abondants sur terre mais avec un coût de fabrication élevé. La deuxième génération est basée sur des technologies avec des coûts modérés mais présentant des rendements faibles par rapport à la génération précédente tout en utilisant des matériaux toxiques. La troisième génération motivée par la recherche des matériaux abondants sans nocivité sur la santé humaine et environnementale avec de faibles coûts et un rendement plus élevé. Présentement, cette technologie est encore au stade de la recherche.

### 5.1 Les cellules PV de la première génération

Les cellules PV de la première génération se caractérisent par une seule jonction (p-n) réalisée à l'aide de la technique du tirage et découpage basée sur les wafers de Si (sous forme de plaques), une technique simple, mais trop coûteuse en plus elle exige un Si de grande pureté [38]. Le Si étant l'un des éléments les plus abondants sur terre, il représente le deuxième élément de la croûte terrestre, en plus, il est non toxique [39], Cette technologie englobe la fabrication des cellules à base de Si monocristallin, et celles à base de Si polycristallin [40]. L'avantage de cette génération est la durée de vie de ces cellules de 20 à 30 ans. Mais elle présente beaucoup d'inconvénients tels que les rendements faibles sous éclairage réduit. La production de ces cellules demandant beaucoup d'énergie les rend très coûteuses (soit un prix de \$0.90 à \$1.00/w pour la filière de Si polycristallin qui est moins chère que celui de la filière de Si monocristallin) [41]. Aussi, la présence des impuretés résiduelles influe sur le rendement de conversion de la cellule [42]. Cette filière domine le marché mondial avec une production de modules de l'ordre de 90% [43].

### 5.2 Les cellules PV de la deuxième génération

L'apparition de cette génération revient à la fin des années quatre-vingts à cause du besoin crucial de l'énergie. La réalisation de ces cellules se fait par des procédés de dépôt sous vide peu coûteux et qui offrent l'avantage d'utiliser d'autres supports que le Si tel que le verre et qui nécessitent seulement quelques micromètres de Si [44]. Ces nouvelles cellules sont composées de très peu voire pas de Si. Cela s'explique par l'augmentation du prix de ce matériau, mais elles restent moins coûteuses que celles de la première génération puisqu'elles consomment moins de matériau

semiconducteur (soit 0.7 \$/W pour le CIGS, 0.6 \$/W pour le CdTe, 0.5\$/W pour le Si-amorphe, 2,49 \$/W pour les semiconducteurs III-V à base de GaAs [45] et autour de 0.45\$/W pour les technologies avancées) [46,47]. De plus, les cellules de cette génération sont réputées pour la réduction considérable de leurs épaisseurs d'où leurs nom « cellules à couches minces ». En effet, leur zone d'absorption est de l'ordre de quelques micromètres (entre 200 et 350 micromètres). Ce qui entraîne la facilité de la construction des panneaux PV souples, légers ainsi que leurs installations. Grâce à ce changement de matériau, les cellules de deuxième génération sont plus pratiques, mais elles fonctionnent toujours avec le même principe que les cellules cristallines. Cependant, cette génération moins polluante à la fabrication utilise des matériaux toxiques pour l'être humain et l'environnement, enfin, elle présente un rendement inférieur à celui de la première génération.

### 5.3 Les cellules PV de troisième génération

Cette génération de cellules solaires est encore au stade de la recherche. Cependant, leur développement est très actif et motivé par les applications spatiales vu qu'elles visent principalement à obtenir le plus haut rendement jamais obtenu par avant tout en minimisant les inconvénients et les obstacles rencontrés dans la conception des cellules des générations précédentes tels que le coût de fabrication, la disponibilité des matériaux ainsi que leurs toxicités [41]. Ces cellules sont plus souples, ultrafines. Elles pourraient équiper tout type de surfaces et être intégrées sous forme de fines couches de plastique. Elles peuvent être transparentes ou colorées. Les chercheurs ont proposé plusieurs concepts pour la réalisation de la cellule du futur dont les plus intéressants sont les cellules multi-jonctions, les cellules à concentration et les cellules organiques [43]. Le taux d'investissement pour cette filière s'est accentué ces dernières années (environ 90\$ million en 2016) [41].

## 6. Le rendement des différentes filières PV

La figure (1.14) illustre les rendements records dans les différentes filières PV entre 1975 et 2018 [17]. Chaque couleur correspond à une filière donnée: la couleur mauve pour la filière des semiconducteurs III-V (simple et multi-jonctions), la bleue pour la filière de Si cristallin, la verte pour la filière couche mince et l'orange pour la filière des cellules émergentes. Dans chaque couleur il y a plusieurs symboles représentant les différentes technologies PV. On constate que le

plus haut rendement obtenu est de 47,1 % avec une cellule à base de matériaux III-V multi-jonctions avec concentrateur, le rendement pour cette filière augmente proportionnellement avec le nombre des jonctions utilisées (soit un rendement de 47.1% pour une cellule à six jonctions, 44.4% pour trois jonctions, 35.5% pour une double jonction). Pour les mêmes cellules sans concentrateur, les nouvelles valeurs sont respectivement: 39.2%, 37.9% et 32.8%)

Cette filière est suivie par celle du Si cristallin avec un meilleur rendement de l'ordre de 27.6% obtenu pour le Si monocristallin avec concentrateur et de l'ordre de 26.1% sans concentrateur. Le polycristallin et couche mince donnent respectivement des rendements de 22.8 et 21.2%. Le plus haut rendement obtenu est 23.4% pour le CIGS sous concentrateur et 22.6% sans concentrateur suivi par le CdTe avec un rendement de 22.1% sans concentrateur. Depuis son arrivée sur le marché, cette filière est en pleine essor. Elle présente, en effet, des performances équivalentes au Si polycristallin avec un coût moindre grâce à un dépôt rapide nécessitant peu d'énergie (par rapport au Si polycristallin) et avec la possibilité de couvrir de grandes surfaces.

Par ailleurs, les cellules en couches minces présentent un grand intérêt pour des applications PV flexibles. L'évolution des rendements pour cette filière est progressive mais lente par rapport à la filière des cellules PV émergentes qui se caractérisent par la plus haute augmentation de rendement sur ces dernières années (8% en 4 ans et 9.5% en 7 ans). Elles sont composées de cellules solaires organiques avec un rendement de 11.5%, des cellules à nanostructures de rendement de 13.4% et des cellules pérovskite. Ces dernières sont d'ailleurs les plus performantes de cette catégorie avec un rendement de 22.1 % avec une augmentation spectaculaire depuis son développement.

La figure (1.15) illustre l'évolution des rendements pour les modules PV. Chaque technologie est représentée par une couleur, et chaque filière est représentée par un symbole, ainsi que la largeur du module et le nom du fabricant. Le rendement le plus élevé est obtenu pour la technologie hybride avec quatre jonctions et sous concentrateur et est de l'ordre de 40.6%, suivi par la filière des GaAs avec un rendement de 38.9%. En troisième lieu vient la technologie de Si (la structure IBC) dont le rendement le plus élevé est de l'ordre de 24.4%, suivi par la technologie des couches minces avec le rendement le plus élevé de l'ordre de 19.2% pour la filière de CIGS et finalement, les cellules organiques où le rendement le plus élevé est obtenu pour la filière pérovskite et est de l'ordre de 16.1%. On constate que le nombre des technologies et des filières pour les modules est

beaucoup moins élevé que ceux pour les cellules seules car les autres technologies sont en stade de la recherche.

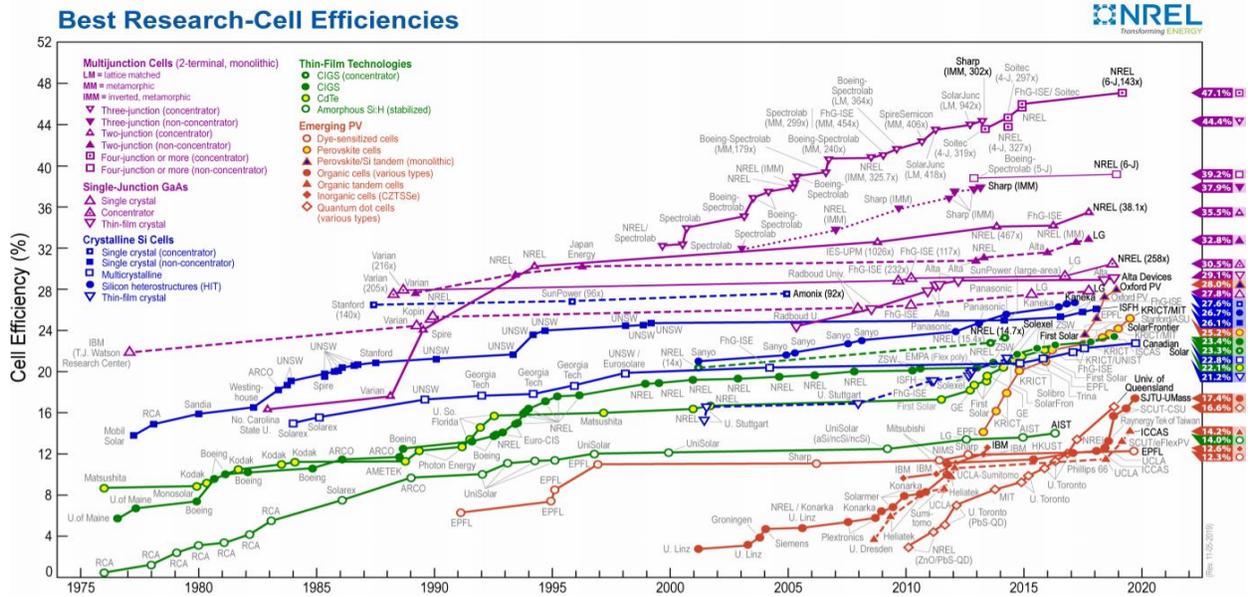


Figure 1. 2 : Évolution des rendements record obtenus pour les cellules seules pour les différentes filières PV (1975-2019) [17]

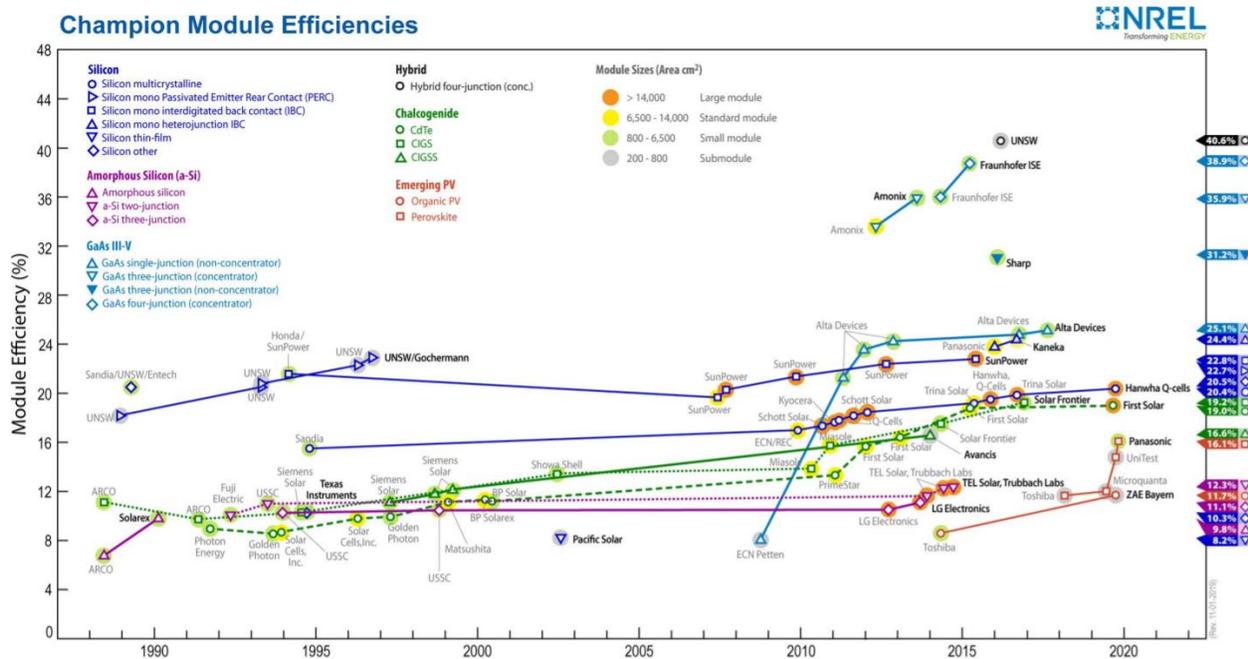


Figure 1. 3 Évolution des rendements record obtenus pour les modules pour les différentes filières PV (1975-2019) [17]

## Conclusion

Globalement, la maturation des technologies est lente, de l'ordre de plusieurs décennies, mais les rendements ne cessent de s'améliorer. Ainsi, de nouvelles technologies sont apparues avec pour objectifs l'augmentation du rendement et la baisse du coût de production. Objectifs non encore atteints complètement. Mais il est clair que les recherches sont orientées vers deux axes en parallèles, le premier consiste à améliorer le rapport rendement/coût soit par le développement de la même technologie ou par la création d'autres technologies. Tandis que le deuxième axe consiste à améliorer le rendement sans prendre en considération le coût de fabrication et cela pour des applications plus sophistiquées.

## CHAPITRE 2 : PHYSIQUES DES CELLULES PV

### Introduction

L'effet PV désigne l'émission des électrons par un matériau soumis à l'action de la lumière au sein d'une cellule PV. A partir de cette définition on doit éclairer quelques points essentiels au cours de ce chapitre pour bien comprendre ce phénomène. La première partie est consacrée à l'étude du spectre solaire et ses interactions avec la matière. La deuxième partie est dédiée aux propriétés physiques des semiconducteurs ainsi qu'à la jonction (pn). En fin, la troisième partie présente le principe de fonctionnement ainsi que les facteurs limitants le rendement de conversion photoélectrique de la cellule.

#### 1. Le rayonnement solaire et nombre de masse d'air

La compréhension du phénomène PV implique certaines connaissances de la source d'énergie utilisée. Le soleil est une sphère de matière gazeuse intensément chaude (température à sa surface avoisinant les 5500 K) avec un diamètre de 139100 Km. Approximativement, la masse du soleil est constituée de 74% d'hydrogène et de 25% d'hélium. L'énergie radiative du soleil provient d'une réaction de fusion nucléaire dans le soleil. A chaque seconde, environ  $6 \times 10^{11}$  kg d'hydrogène sont convertis en hélium avec un défaut de masse de  $4 \times 10^3$  kg. La masse perdue est convertie, selon la relation d'Einstein ( $E=mc^2$ ), en énergie d'une valeur de  $4 \times 10^{20}$  J. Cette énergie est émise, comme une radiation électromagnétique dans la région allant de l'ultraviolet ( $0,2\mu\text{m}$ ) à l'infrarouge lointain ( $2,5\mu\text{m}$ ) comme illustre la figure (2.1). La distance entre le soleil et la terre est de  $15 \times 10^7$  Km, cette dernière reçoit environ  $7,45 \times 10^{17}$  kWh d'énergie solaire par année sous forme de lumière. La consommation annuelle d'électricité dans le monde est d'environ  $1,2 \cdot 10^{14}$  kWh. Cela signifie que, si nous avons un moyen économique et facile d'utiliser la lumière du soleil pour produire de l'énergie électrique, nos besoins peuvent être satisfaits [45]. L'intensité totale du spectre solaire hors atmosphère est obtenue par l'intégration du spectre solaire par rapport à la longueur d'onde correspondante, ce qui nous donne la constante solaire AM0 tel que  $AM0=1353$  Watt/ m<sup>2</sup>.

Cette valeur est réduite sur Terre à  $1\text{KW/m}^2$ , suite aux phénomènes d'absorption par les molécules des différentes couches atmosphériques, conditions climatiques, la diffusion moléculaire de Rayleigh et les poussières. Cette perte est appelée la masse d'air ( $AM_y$ ), elle est utilisée afin de caractériser le spectre solaire en termes d'énergie [45].

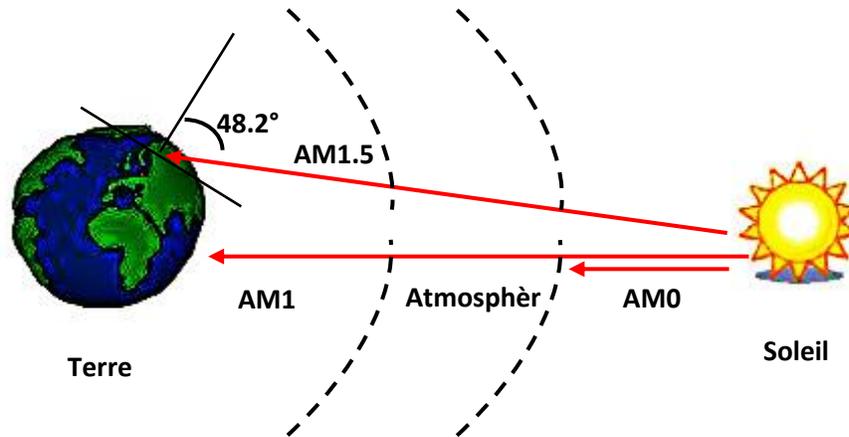


Figure 2. 1 : Les constantes d'illumination [46]

On définit ainsi les conditions : AM0 correspond à une masse d'air nulle pour la lumière arrivant au-dessus de notre atmosphère à incidence normale. AM1 correspond à une même lumière arrivant à la surface terrestre. AM1.5 désigne la masse d'air rencontrée pour la lumière arrivant à  $48,2^\circ$  sur la surface de la Terre, soit une lumière plus faible du fait que l'épaisseur de la couche atmosphérique traversée est plus grande. Les spectres de définition AM 1.5 sont référencés dans un document ASTM G-173-03[46]. La figure (2.3) représente le spectre solaire tracé à partir des données de la référence [46] pour différentes valeurs de la masse d'air. On remarque que plus l'épaisseur de l'atmosphère traversée augmente plus la perte d'énergie augmente.

Au cours de ces dernières années, ce spectre a été homologué par l'organisation Internationale de Standardisation (ISO 9845-1 : 1992) et l'American Society for Testing and Materials (ASTM E892-87 :1992). Le flux de standardisation a été corrigé à  $1000\text{ W/m}^2$ . Le spectre AM0, ou spectre extraterrestre, utilisé pour générer le spectre de référence terrestre a été développé par Gueyamard [46]. En 2000, l'American Society for testing and Materials développa un spectre de référence AM0 (ASTM E-490) pour l'usage de la communauté de l'aérospatial. Ce spectre est basé sur les données recueillies par des satellites des missions spatiales, des télescopes terrestres et des

modélisations. L'intégrale du spectre est conforme à la valeur de la constante solaire acceptée par la communauté spatiale de  $1366,1 \text{ W/m}^2$  [46].

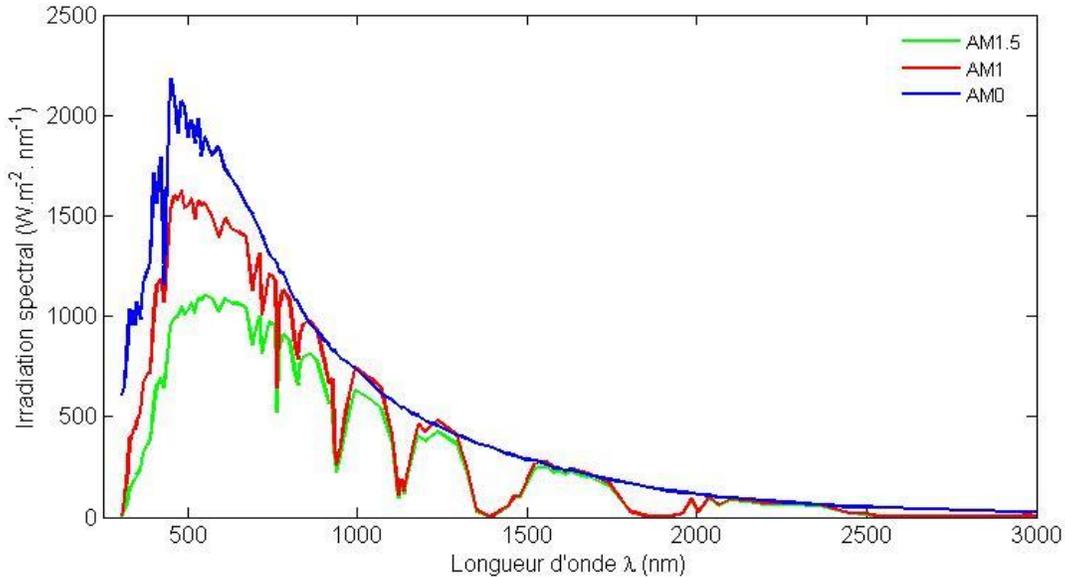


Figure 2. 2 : Irradiance en fonction de la longueur d'onde AM [46]

## 2. Interactions rayonnement matière

Plusieurs types d'interactions rayonnements matière existent dont le plus intéressant pour l'étude de l'effet PV est l'interaction photons matière. Les photons peuvent interagir de façons différentes en fonction de l'énergie du rayonnement incident. Une grande énergie permettra d'ioniser l'atome en éjectant un ou plusieurs électrons. Si le photon est absorbé, une partie de son énergie sert à éjecter l'électron de son orbite et le reste de l'énergie sert à lui donner une énergie cinétique qui lui permettra de devenir libre et peut alors être récupéré c'est le courant photonique. Une des méthodes utilisées pour récupérer ce courant est l'utilisation des cellules PV. Ces dernières sont fabriquées en utilisant des matériaux dits « semiconducteurs ». Ces matériaux possèdent une propriété importante qui est l'existence de bandes de valence et de conduction faiblement séparés (gap énergétique ou bande interdite), comme illustre la figure (2.4), ce qui facilite le parcours des électrons et donc la collecte électronique.

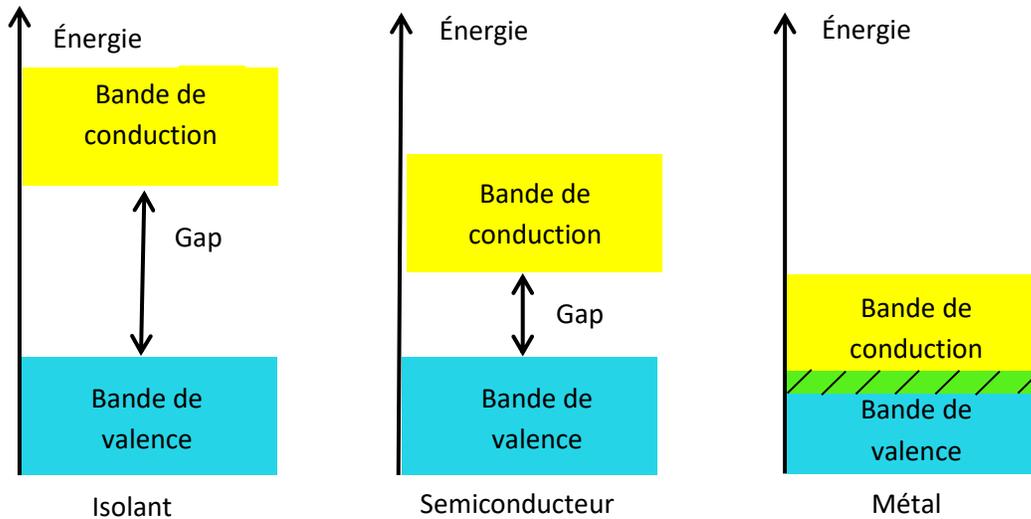


Figure 2. 3 : Structure de bande des trois catégories de matériaux [47]

On donne pour les isolants un gap au-delà de 6 eV, pour les conducteurs un gap nul et pour ce qui nous concerne, les semiconducteurs, un gap compris entre ces deux valeurs. Lorsque l'électron situe dans la bande de valence passe dans la bande de conduction, il laisse derrière lui un trou. On parle alors, de porteurs de charges (électrons/trous) qui peuvent participer au courant électrique avant d'être recombinaison. Enfin, la structure des semiconducteurs est la seule qui permet de générer des porteurs de charges participants à la formation du courant électrique à partir du rayonnement solaire [47].

### 2.1 L'origine des bandes d'énergies

Considérant un atome isolé, les niveaux énergétiques de ses électrons sont discrets. Lorsque l'on rapproche de ce dernier un atome identique, les niveaux énergétiques discrets de ses électrons se scindent en deux sous l'interaction réciproque des deux atomes. Plus généralement, lorsque l'on approche N atomes, les niveaux énergétiques se scindent en N niveaux. Les deux dernières bandes correspondent respectivement à la bande de conduction et à la bande de valence : elles sont séparées par une bande d'énergie interdite de largeur caractéristique comme illustre la figure (2.8). Cette bande interdite est l'énergie de gap de ce matériau composé de N atome, et selon la largeur de cette bande on différencie entre un conducteur, isolant ou un semiconducteur [48].

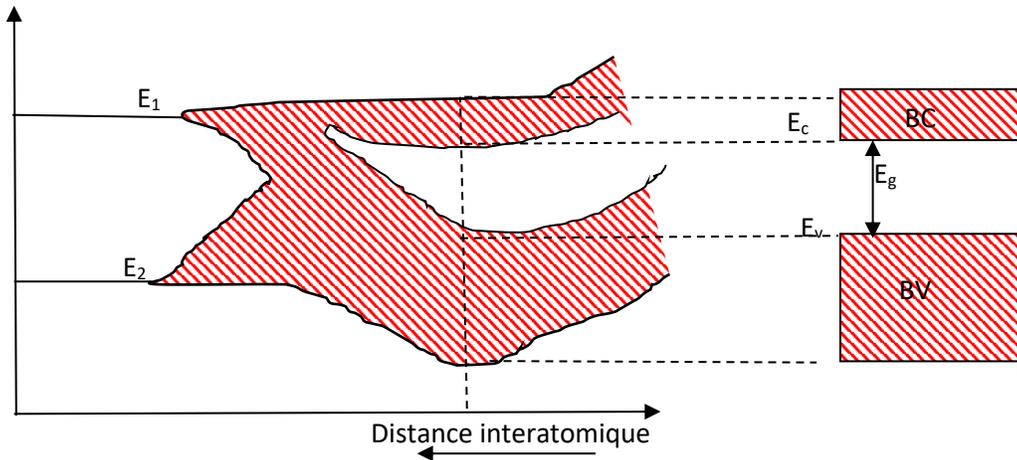


Figure 2. 4 : Formation des bandes d'énergie pour les électrons atomiques [49]

## 2.2 Les semiconducteurs à gap directe ou indirecte :

Les semiconducteurs dont le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont au même point (même vecteur d'onde  $\mathbf{k}$ ) dans la zone de Brillouin sont appelés « semiconducteurs à gap direct », comme illustre la figure (2.9 -a). Dans le cas où le minimum de la bande conduction est situé à une distance du maximum de la bande de valence dans la zone de Brillouin, ils sont appelés « semiconducteurs à gap indirect », comme illustre la figure (2.9 -b) :

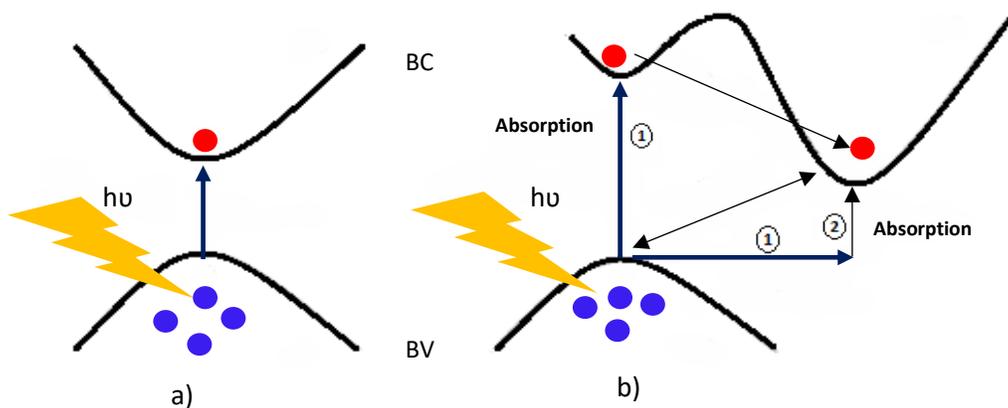


Figure 2. 5 : Semiconducteurs : (a) à gap direct (b) à gap indirect [49]

### 2.3 Semiconducteur intrinsèque

On appelle semiconducteur intrinsèque un semiconducteur parfait ne contenant aucun défaut physique ni aucune impureté chimique : ses propriétés et ses caractéristiques sont dues uniquement au semiconducteur lui-même. Les concentrations des électrons « n » et des trous « p » sont égales à la concentration intrinsèque notée «  $n_i$  » [49]. Dans un système constitué de N particules, les électrons cherchent à occuper l'état de plus basse énergie, leur distribution en fonction de la température peut être réalisée à l'aide des méthodes statistiques de Fermi-Dirac et de Maxwell-Boltzmann à condition de respecter les deux points suivants [49] :

- Le nombre total des particules dans le système est constant :

$$\sum_i n_i = N \quad (\text{II-8})$$

- L'énergie totale des n particules dans le système est constante :

$$\sum_i n_i E_i = E \quad (\text{II-9})$$

La fonction de distribution est donnée par la relation suivante :

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{\frac{(E-E_F)}{KT}}} \quad (\text{II-10})$$

Avec  $E_F$  est le niveau de Fermi. (Le niveau de Fermi est une caractéristique indispensable pour connaître la répartition des électrons en fonction de l'énergie et ce quelle que soit la température).

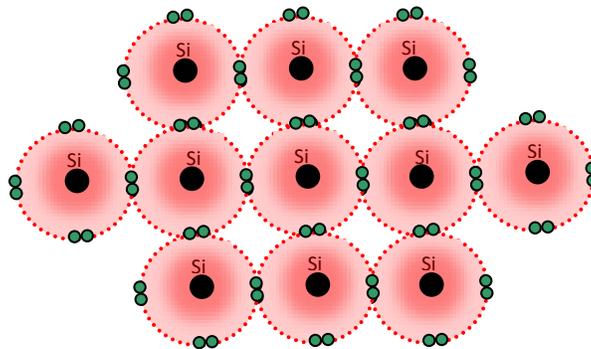


Figure 2. 6 : Représentation simplifiée de la structure de silicium [49]

La densité d'état dans la bande de conduction (BC) est donnée par :

$$N_C(E) = \frac{1}{(2\pi)^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2}\right)^{3/2} (E - E_C)^{1/2} \quad (\text{II-11})$$

Avec  $m_e$  : est la masse effective de densité d'états dans la bande de conduction.

La densité d'état dans la bande de valence (BV) est donnée par :

$$N_V(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_V}{\hbar^2}\right)^{3/2} (E_V - E)^{1/2} \quad (\text{II-12})$$

Avec  $m_V$  est la masse effective de densité d'états dans la bande de valence.

Le niveau de Fermi en fonction de la température est :

$$E_F = \frac{E_C + E_V}{2} - \frac{KT}{2} \ln \left(\frac{N_C}{N_V}\right) \quad (\text{II-13})$$

#### 2.4 Semiconducteurs extrinsèques :

Lorsqu'on prend des semiconducteurs intrinsèques dans lesquels on introduit des atomes étrangers que l'on appelle impuretés ce qui va modifier complètement leurs caractéristiques électriques. Cette opération d'injection d'impuretés s'appelle dopage d'un semiconducteur. Les semiconducteurs obtenus sont dits « extrinsèques ».

Si les atomes étrangers sont pentavalents c'est à dire qu'ils ont 5 électrons sur la couche périphérique (de valence), 4 vont être mis en commun avec les atomes voisins pour assurer les liaisons de valence, le cinquième, restera libre et participera donc à la conduction. On dit que les impuretés utilisées sont des donneurs d'électrons qui constituent les porteurs majoritaires. Comme ils sont porteurs de charge négatives, le semiconducteur extrinsèque est dit de type n [49].

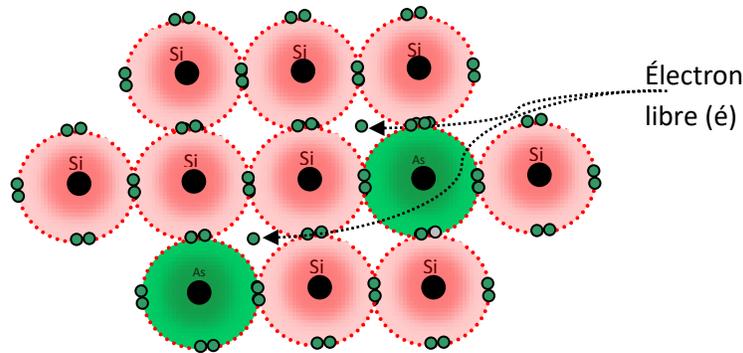


Figure 2. 7 : Représentation de silicium extrinsèque de type n [49]

Si on introduit des atomes ayant seulement trois électrons sur la couche de valence dans un cristal intrinsèque, ils mettent en commun leurs 3 électrons avec les 4 atomes de semiconducteurs qui les entourent pour former les liaisons de valence.

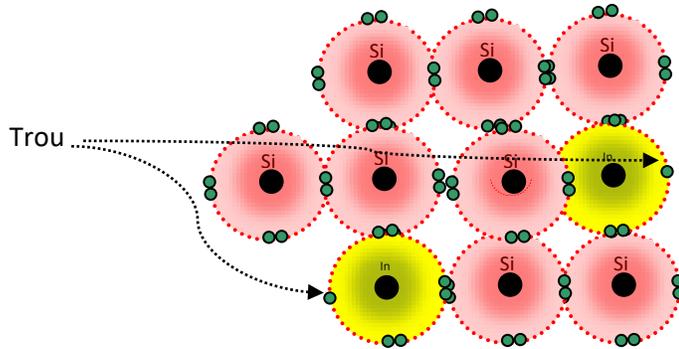


Figure 2. 8 : Représentation de silicium extrinsèque de type p [49]

Ils se trouvent à la fin avec 7 (3+4) électrons sur la couche de valence, cette configuration est instable et aura tendance à capter un électron d'un atome voisin pour compléter sa couche à 8 électrons. On dit que les impuretés utilisées sont des accepteurs des électrons. Dès que cet électron est capté, l'atome accepteur devient un ion négatif et introduit un trou dans le cristal qui va participer à la conduction par trou. Aucun électron libre n'a été créé lors de la formation du trou, les trous sont donc beaucoup plus nombreux que les électrons, ils constituent les porteurs majoritaires et le semiconducteur est de type p [49].

Si le semiconducteur est fortement dopé, au point d'avoir un comportement plus proche de celui d'un métal que d'un semiconducteur on dit que l'on a « un semiconducteur dégénéré ».

Si le semiconducteur contient un nombre de impuretés positives égales exactement au nombre des impuretés négatives. On dit alors que l'on a « un semiconducteur intrinsèque par compensation » ou simplement « un semiconducteur compensé ».

## 2.5 Étude des jonction (pn) abrupte et graduelle

Jonction (pn) abrupte : Dans une jonction abrupte, la concentration des impuretés varie brutalement de la région dopée p à la région dopée n. C'est-à-dire, la différence  $N_d - N_a$  passe d'une

manière brutale à  $x = 0$  d'une valeur négative dans la région dopée p à une valeur positive dans la région dopée n, voir figure (2.15).

Jonction (pn) graduelle : Dans une jonction graduelle, la concentration des impuretés est une fonction dépendante de  $x$  autour de la région de contact. C'est-à-dire, la différence  $N_d - N_a$  dépend de  $x$  entre  $x_p$  et  $x_n$ , voir figure (2.15).

Dans le cadre de notre travail on va concéder le cas d'une jonction (pn) abrupte (cas idéale).

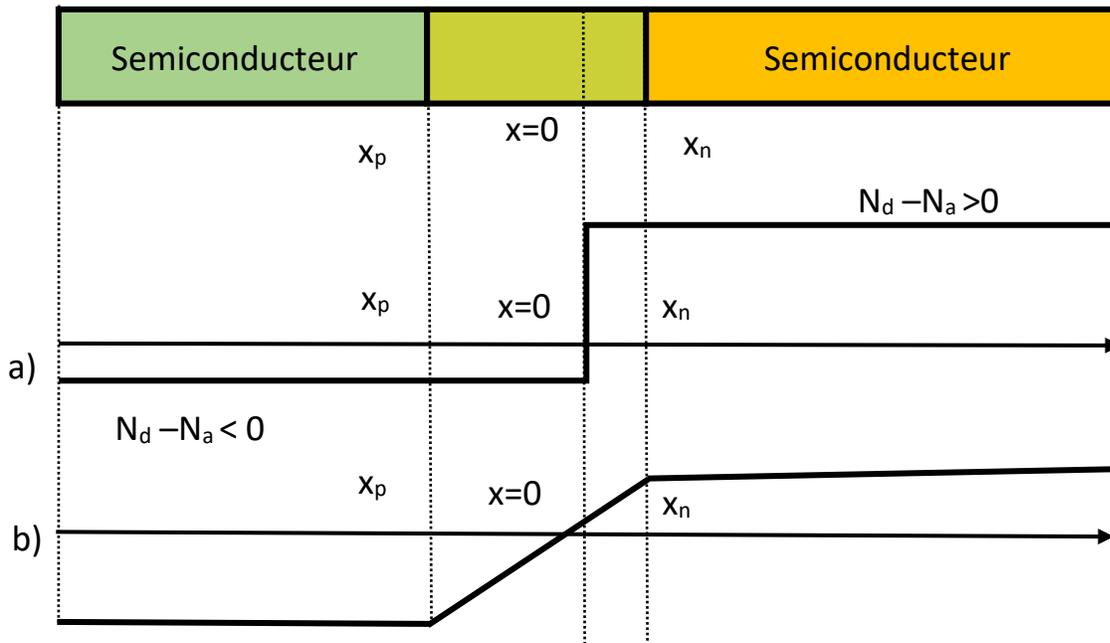


Figure 2. 9 : Évolution de la différence ( $N_d - N_a$ ). a) abrupte et b) graduelle [49]

## 2.6 Étude d'une jonction (pn) abrupte non polarisée à l'équilibre

Après la formation de la jonction un potentiel interne  $V_0$  apparaît entre les deux niveaux de Fermi intrinsèques  $E_{Fi}$ . L'origine physique de ce potentiel interne est la diffusion des porteurs de charges. En effet, la mise en contact des semiconducteurs favorise la diffusion des électrons majoritaires du côté n vers le côté p et laissent derrière eux des charges positives (trous). De même les trous majoritaires du côté p vont diffuser vers le côté n et laissent aussi derrière eux des charges négatives. Les électrons passés du côté p vont se recombiner avec les trous abondants de ce côté,

et les trous passés du côté n vont se recombinier avec les électrons abondants de ce côté. Il se crée alors une région sans porteurs où il n'y a plus que des ions positifs du côté n et des ions négatifs du côté p. Cette région est dite, zone de charge d'espace (ZCE) ou zone dépeuplée, aussi appelée zone de déplétion [50]. Les charges positives d'un côté, les négatives de l'autre, il se crée alors un champ électrique interne  $E_i$  orienté de n vers p qui va s'opposer à la diffusion des porteurs de part et d'autre de la jonction comme illustre la figure (2.16). En effet, si un électron arrive dans la zone dépeuplée, il sera rappelé par le champ vers la zone d'où il vient. De la même façon, les trous qui arrivent dans cette zone sont renvoyés par le champ dans la zone p d'où ils sont venus.

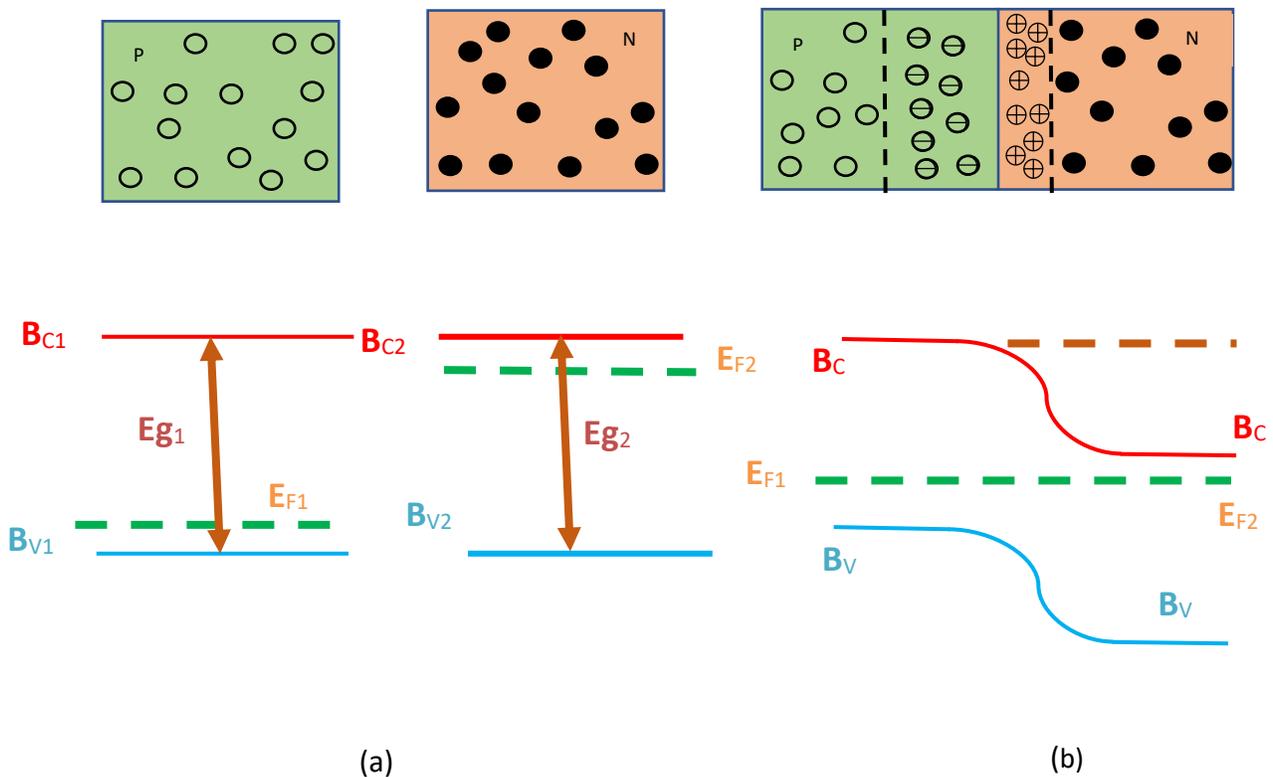


Figure 2. 10 : Deux semiconducteurs de type p et n (a) avant contact (b) après contact (jonction (pn) à l'équilibre thermodynamique [50]

Lorsque l'équilibre est atteint, le champ électrique créé par la barrière de potentiel est suffisant pour équilibrer les courants de diffusion des porteurs majoritaires et des porteurs minoritaires, d'où un courant global de diffusion nul comme illustre la figure (2.17) :

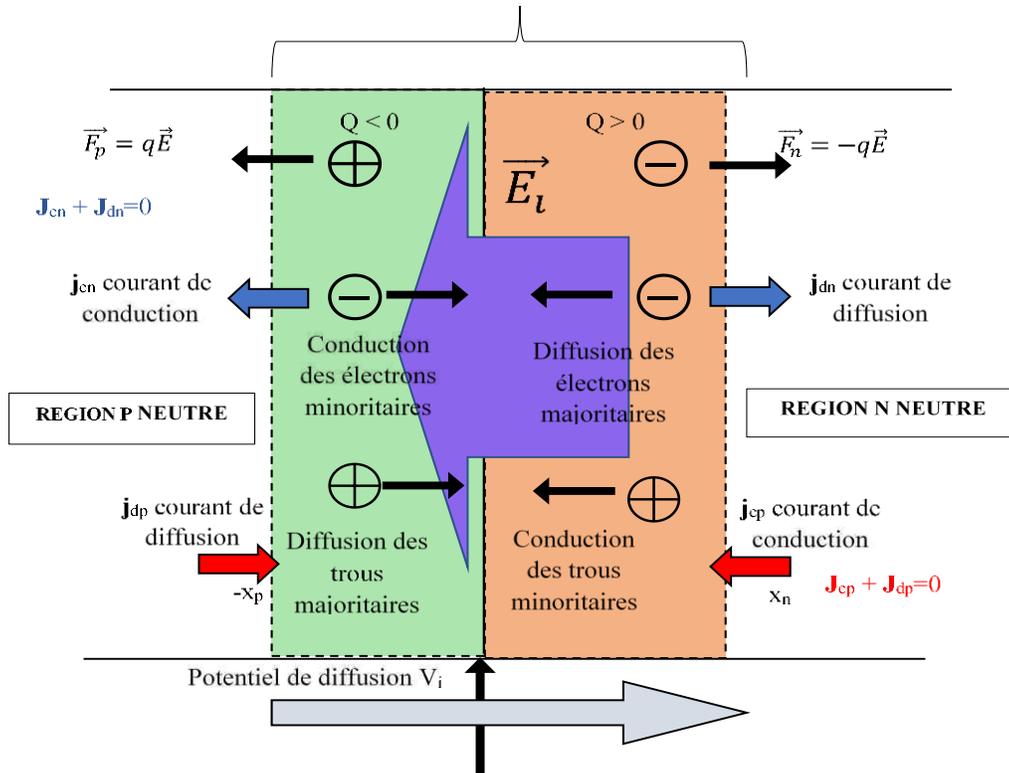


Figure 2. 11 : Les phénomènes électriques dans une jonction (pn) à l'équilibre thermodynamique

Afin d'étudier le potentiel électrostatique dans la jonction (zone de charge d'espace), la résolution de l'équation de Poisson est nécessaire. L'équation de Poisson peut être écrite sous la forme unidimensionnelle suivante :

$$\frac{d^2V}{dx^2} = -\frac{\rho(x)}{\epsilon} \quad (\text{II-23})$$

Pour résoudre cette équation, on suppose que la charge présente dans le semiconducteur est seulement due à une distribution homogène d'impuretés. La concentration en porteurs de charges libres est donc négligeable devant  $N_d$  et  $N_a$ . En plus, la densité de charge est supposée constante dans les deux régions de la zone de déplétion.

La résolution de l'équation de Poisson sous la forme unidimensionnelle donne la distribution de charges suivante :

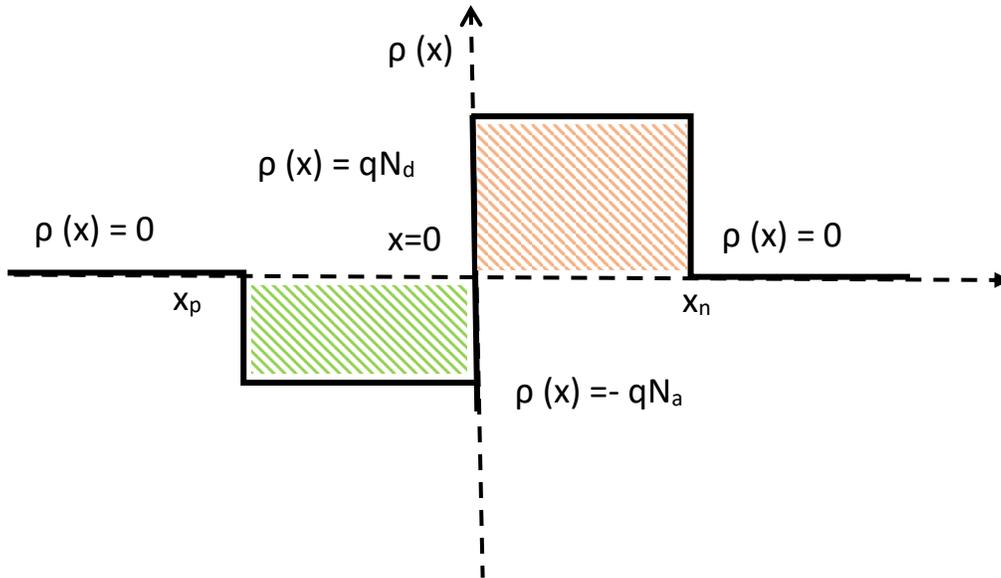


Figure 2. 12 : Évolution de la densité de charge  $\rho(x)$

De même la résolution de l'équation de poisson unidimensionnelle donne un champ électrique sous la forme suivante :

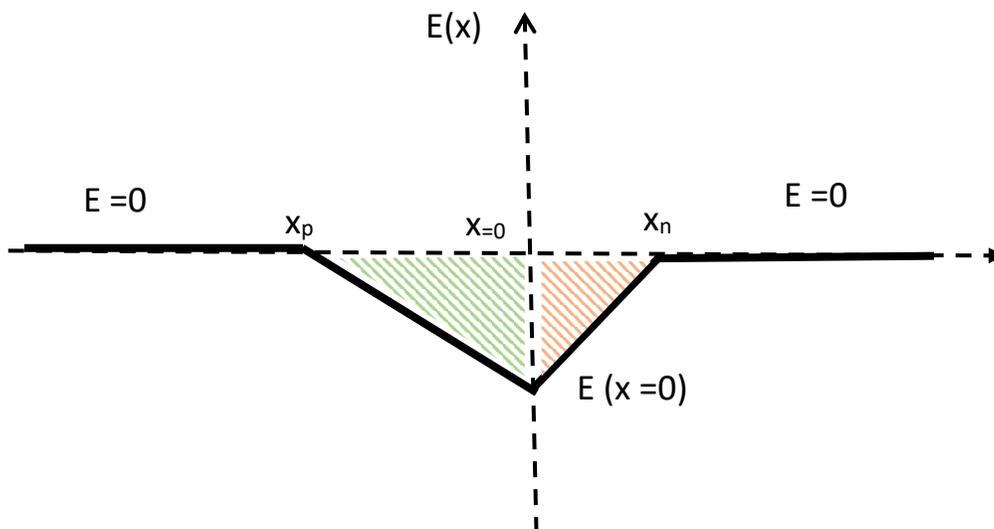


Figure 2. 13 : Champ électrique dans les différentes régions de la jonction

L'intégration du champ électrique  $E$  illustré dans la figure (2.19), donne la distribution de potentiel électrique illustré sur la figure (2.20) :

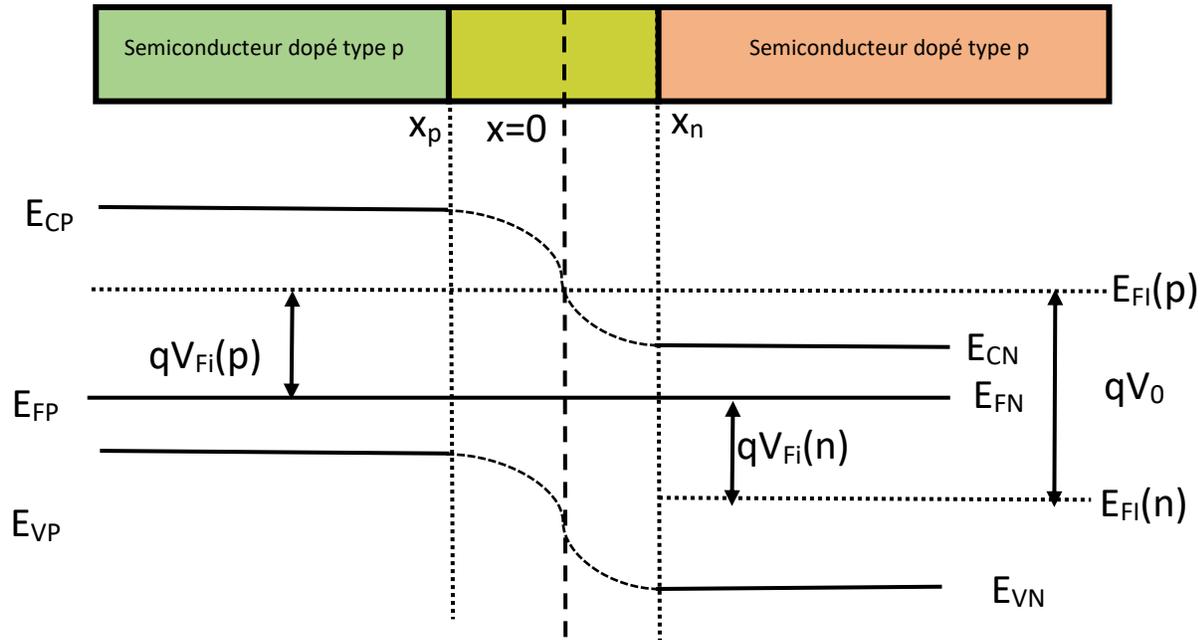


Figure 2. 14 : : Diagramme énergétique des semiconducteurs (dopé type p et dopé type n) après la formation de la jonction

Tel que le potentiel de diffusion ( $V_0$ ) interne s'écrit sous la forme :

$$V_0 = \frac{KT}{q} \ln \left[ \frac{N_a N_d}{n_i^2} \right] \quad (\text{II-24})$$

Les relations précédentes du potentiel de diffusion permettent de déduire la largeur de la zone de déplétion :

$$w = x_n + x_p \quad (\text{II-25})$$

La largeur de la région dopée P est donnée par la relation [87] :

$$x_p = \sqrt{\frac{2\varepsilon V_0}{q}} \sqrt{\frac{N_d}{N_a}} \frac{1}{\sqrt{N_a + N_d}} \quad (\text{II-26})$$

La largeur de la région dopée N est donnée par la relation suivante

$$x_n = \sqrt{\frac{2\varepsilon V_0}{q}} \sqrt{\frac{N_a}{N_d}} \frac{1}{\sqrt{N_a + N_d}} \quad (\text{II-27})$$

La largeur  $w$  est donnée par la relation

$$w = \sqrt{\frac{2\varepsilon}{q} \left( \frac{N_a + N_d}{N_a N_d} \right) V_0} \quad (\text{II-28})$$

Avec  $\varepsilon$  : permittivité de semiconducteur [48].

### 2.7 La jonction (pn) hors équilibre

Lorsque la jonction est éclairée, ou si l'on y applique une polarisation, on s'éloigne de l'équilibre thermodynamique. L'équilibre entre les courants de diffusion et le courant de conduction est modifié. On a alors injection de porteurs minoritaires dans les zones neutres : des électrons dans le matériau p et des trous dans le matériau n. Les densités des porteurs minoritaires aux extrémités de la ZCE peuvent se déduire à partir du potentiel par [48] :

$$V_{total} = V_0 - V = \frac{KT}{q} \ln \left[ \frac{N_a N_d}{n_i^2} \right] - V \quad (\text{II-29})$$

Et la largeur de la zone de charge d'espace  $W$  sous polarisation ( $V$ ) s'écrit alors :

$$w = \sqrt{\frac{2\varepsilon}{q} \left( \frac{N_a + N_d}{N_a N_d} \right) (V_0 - V)} \quad (\text{II-30})$$

### 2.8 La densité du photocourant totale

Lorsque la lumière entre par le côté émetteur un nombre d'électrons et de trous sont générés à une distance ( $x$ ), avec un taux ( $G$ ) de génération des photons porteurs, il est donné par la relation suivante :

$$G = \alpha \cdot F_0 \cdot (1 - R) \cdot e^{(-\alpha \cdot x)} \quad (\text{II-31})$$

Où :  $F_0 = F_0(\lambda)$  : le flux des photons incidents non réfléchis.

$\alpha = \alpha(\lambda)$ : coefficient d'absorption du semiconducteur en fonction de la longueur d'onde.

$R = R(\lambda)$  : coefficient de réflexion du semiconducteur en fonction de la longueur d'onde.

L'application de l'équation (II.31) pour différentes régions n, p et ZCE donne la densité du photocourant ( $J$ ) qui représente la somme des densités des courants ( $J_n, J_p, J_{ZCE}$ ) respectivement dans les régions n, p et la ZCE. En effet, la densité du photocourant totale est indépendante de la tension extérieure mais proportionnelle à l'éclairement donc elle est donnée en fonction de la longueur d'onde du rayonnement incident sous la forme [51] :

$$J(\lambda) = J_p(\lambda) + J_n(\lambda) + J_{ZCE}(\lambda) \quad (\text{II-32})$$

$$J_{ZCE} = -q \times F_0 \times (1 - R) \times e^{(-\alpha x_j)} [1 - e^{-(\alpha w)}] \quad (\text{II-33})$$

$$J_p = \left[ \frac{qF(1-R)\alpha L_p}{\alpha^2 L_p^2 - 1} \right] \times \left[ \frac{\left( \frac{S_p L_p}{D_p} + \alpha L_p \right) e^{(-\alpha x_p)} \left( \frac{S_p L_p}{D_p} \cosh \frac{x_p}{L_p} + \sinh \frac{x_p}{L_p} \right)}{\frac{S_p L_p}{D_p} \sinh \frac{x_p}{L_p} + \cosh \frac{x_p}{L_p}} - \alpha L_p e^{(-\alpha x_p)} \right] \quad (\text{II-34})$$

$$J_n = \left[ \frac{qF(1-R)\alpha L_n}{\alpha^2 L_n^2 - 1} \right] e^{-\alpha(x_p+w)} \left[ \alpha L_n - \frac{\frac{S_n L_n}{D_n} \left( \cosh \frac{x_n}{L_n} - e^{(-\alpha x_n)} \right) + \sinh \frac{x_n}{L_n} + \alpha L_n e^{(-\alpha x_n)}}{\frac{S_n L_n}{D_n} \sinh \frac{x_n}{L_n} + \cosh \frac{x_n}{L_n}} \right] \quad (\text{II-35})$$

La densité du photocourant  $J_{ph}$  est calculée en intégrant sur l'ensemble du spectre solaire [50] :

$$J_{ph} = \int_{\lambda_{min}}^{\lambda_{max}} (J_n + J_p + J_{zce}) d\lambda \quad (\text{II-36})$$

Avec

$w$  : est la largeur de la zone de charge d'espace.

$x_p$  : la largeur de la zone p.

$x_n$  : la largeur de la zone n.

$S_p$  : la vitesse de recombinaison des trous minoritaires photocréés dans l'émetteur.

$S_n$  : la vitesse de recombinaison de électrons minoritaires photocréés dans la base.

$L_p$  : la longueur de diffusion des trous minoritaires photocréés dans l'émetteur.

$L_n$  : la longueur de diffusion des électrons minoritaires photocréés dans la base.

$D_p$  : le coefficient de diffusion des trous minoritaires photocréés dans l'émetteur.

$D_n$  : le coefficient de diffusion des électrons minoritaires photocréés dans la base.

$\tau_n$  : la durée de vie moyenne des électrons minoritaires photocréés dans la base.

$\tau_p$  : la durée de vie moyenne des trous minoritaires photocréés dans l'émetteur.

### 3. La caractéristique courant tension I (V)

Les performances de la cellule solaire sont représentées à travers la caractéristique courant-tension  $J(V)$  comme montre la figure (2.21- a). Cette dernière apporte une lecture claire des paramètres caractérisant la cellule solaire, comme le rendement de la cellule ( $\eta$ ), le facteur de forme (FF), et la puissance maximale ( $P_{\max} = I_{\max} \cdot V_{\max} = I_m \cdot V_m$ ). Aussi on peut utiliser cette caractéristique pour contrôler et commander les paramètres physiques de la cellule tels que le dopage et l'épaisseur des couches. Donc sous éclairement la caractéristique  $J(V)$  de la cellule commence à se décaler vers le haut et plus l'absorption est importante plus le décalage est grand [52]. A partir de cette caractéristique  $J(V)$  on a tressé la courbe  $P(V)$  comme montre la figure (2.21-b).

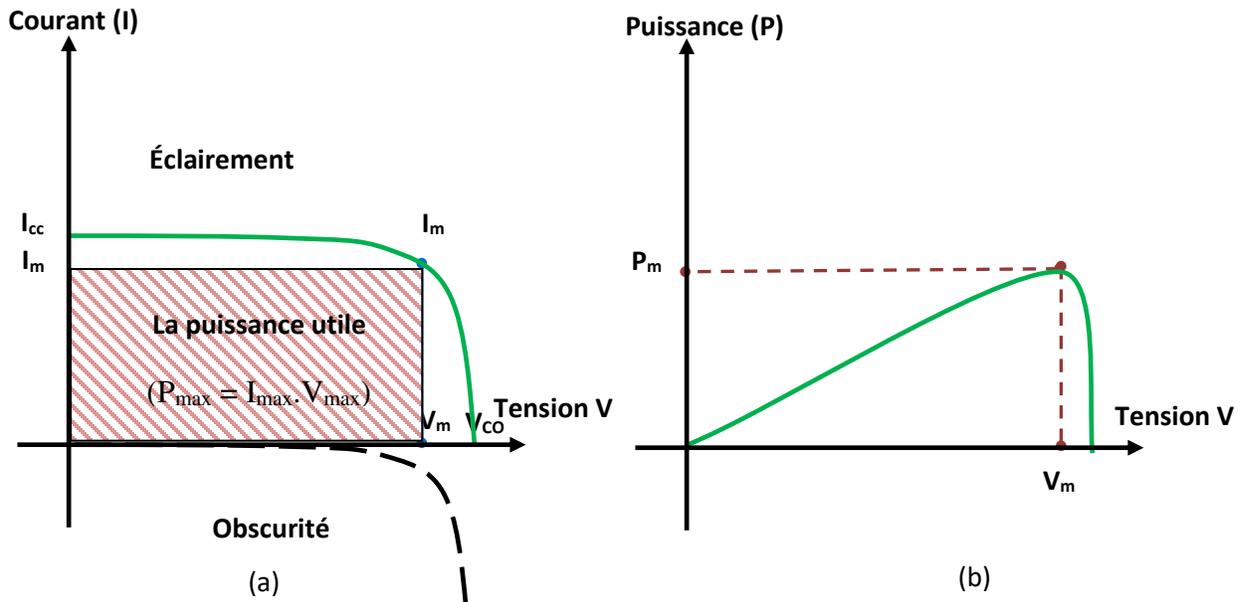


Figure 2. 15 : (a) la caractéristique I-V d'une cellule à l'obscurité et sous éclairement, (b) puissance délivrée par la cellule en fonction de la tension de polarisation [52]

Le courant  $I(V)$  est donné par la relation suivante :

$$I(V) = I_{ph} - I_{obs}(V) = I_{ph} - I_s \left( e^{\frac{qV}{kT}} - 1 \right) \quad (II-37)$$

Avec  $I_s$  : est appelé courant de saturation. Il ne dépend pas de la tension appliquée ni du champ électrique mais varie très fortement avec la température. Il est donné par la relation suivante :

$$I_s = qn_i^2 \left[ \frac{D_p}{L_p N_d} + \frac{D_n}{L_n N_a} \right] \quad (\text{II-38})$$

#### 4. Modélisation de la cellule PV

L'analogie entre le fonctionnement de la cellule PV sous éclairage et celui d'un générateur de courant, produisant un courant  $I_{ph}$  auquel se soustrait le courant de la diode (jonction (pn)) en polarisation directe (le pôle positive est raccordé au côté p). C'est une représentation simplifiée du fonctionnement de la cellule PV où on distingue deux cas : (le cas idéal pour une et deux diodes, et le cas réel pour deux diodes).

Dans une cellule solaire réelle, le phénomène de recombinaison représente des pertes importantes, lesquelles ne peuvent pas être convenablement modélisées en utilisant le modèle à une diode. La considération de ces pertes conduit à introduire une diode supplémentaire.

Tous les types des schémas électriques représentés sur la figure (2.22) ne sont que des modèles proposés pour simuler l'étude de la cellule PV, tel que le schéma a) dit modèle à une diode d1, il modélise la diffusion des porteurs dans la base et l'émetteur. Sa validité sera d'autant plus grande que le matériau aura une bonne longueur de diffusion et est pratique dans le cas des basses températures.

Le modèle b) dit modèle à deux diodes modélise la génération-recombinaison des porteurs dans la zone de charge d'espace [53].

Pour tenir compte des différentes limitations de la cellule PV figure (2.22-c), on introduit deux résistances : la résistance série  $R_s$  : elle prend en compte la résistivité propre aux contacts entre les différentes régions constitutives de la cellule, à savoir l'émetteur, la base et les contacts métalliques. Ce terme doit idéalement être le plus faible possible pour limiter son influence sur le courant de la cellule. Ceci peut être réalisé en optimisant le contact métal/semiconducteur, et en diminuant la résistivité du matériau utilisé. Cependant, un dopage trop élevé entraîne une augmentation de la recombinaison des porteurs.

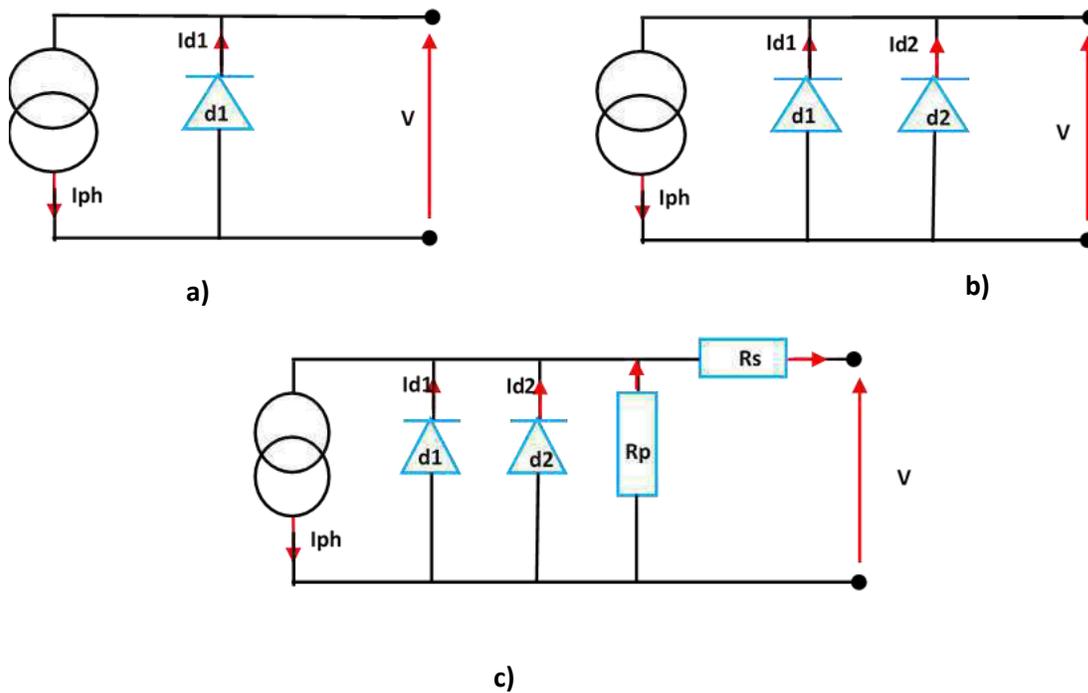


Figure 2. 16 : Schéma électrique équivalent d'une cellule [53]

La résistance parallèle  $R_p$  : également connue sous le nom de résistance de court-circuit, traduit l'existence de shunts à travers l'émetteur, causé par un défaut. Ceci est le cas lorsque la diffusion des contacts métalliques à haute température perce l'émetteur. Elle peut aussi être due à un court-circuit sur les bords de la cellule. Cette valeur devra être la plus élevée possible. La nouvelle expression du courant total au sein de la cellule PV est donc donnée par la relation [52]:

$$I = I_{ph} - I_{s1} \left( \exp \left( \frac{q(V+IR_s)}{n_1 kT} \right) - 1 \right) - I_{s2} \left( \exp \left( \frac{q(V+IR_s)}{n_2 kT} \right) - 1 \right) - \frac{V+IR_s}{R_p} \quad (\text{II-39})$$

Le terme  $I_{ph}$  représente le photocourant.  $I_{s1}$  est le courant de saturation, et  $n_1$  est le facteur d'idéalité de diode 1, qui doit être égale à 1. Le terme  $I_{s2}$  correspond au courant de diffusion dans la base et l'émetteur ;  $I_{s2}$  à proprement parler est le courant de saturation de phénomène de génération-recombinaison. Le paramètre  $n_2$  est le facteur d'idéalité de la diode 2, et doit être proche de 2 dans ce cas. Donc il est clair que le cas réel de la cellule présente un courant total plus faible que celui de la cellule idéale, en effet cette différence due aux nombreuses pertes influe sur

le rendement de la cellule PV. Ces pertes doivent être minimisées, il y va sans dire que tout dépend du type de cellule, de la technologie utilisée, du domaine d'application et du coût de fabrication [53].

## 7 Les paramètres PV d'une cellule solaire dans le cas idéal

Une cellule PV est caractérisée par un rendement de conversion ( $\eta$ ), une tension en circuit ouvert ( $V_{co}$ ), un courant de court-circuit ( $I_{cc}$ ) et un facteur de forme (FF). Les caractéristiques courant-tension  $J(V)$  sont utilisées pour déterminer ces paramètres.

### 7.1 Courant de court-circuit $I_{cc}$

Le courant de court-circuit exprimé en mA, est le courant qui circule dans la cellule sous éclairage et sans application de tension (en prenant  $V=0$  dans la figure (2.21-a)). Il croît linéairement avec l'intensité d'illumination de la cellule et il dépend de la surface éclairée, de la longueur d'onde du rayonnement, de la mobilité des porteurs de charges et de la température [54].

### 7.2 Tension à circuit ouvert $V_{CO}$

La tension de circuit ouvert exprimée en millivolts, est mesurée lorsqu'aucun courant ne circule dans la cellule. Elle dépend de la différence des travaux de sortie des électrodes et de la résistance Shunt. Elle décroît avec la température [55].

### 7.3 Rendement quantique de la cellule QE

Le rendement quantique donne la probabilité qu'un photon incident d'énergie  $E$  fournira un électron à un circuit externe. Il est considéré comme un paramètre quantitatif et qualitatif dans la description de la cellule PV. Il permet de mesurer le nombre d'électrons en sortie de la cellule PV par rapport au nombre de photons incidents. Il permet aussi la quantification des pertes dans la cellule PV (la réflexion à la surface introduit des pertes de photons de faible et forte énergie). QE est donnée par la relation suivante [54] :

$$QE = \frac{\text{paires electrons trous collectées}}{\text{photons incident}} \quad (\text{II-40})$$

EQE représente l'efficacité quantique externe de la cellule, c'est à dire le rapport du nombre de porteurs générés sur le nombre de photons incidents. Pour une longueur d'onde donnée,

l'efficacité quantique externe est égale à 1 si chaque photon génère un électron. L'efficacité quantique externe est donnée par la relation suivante [56] :

$$EQE(\lambda) = [1 - R]. [1 - \exp(-\alpha w)] \quad (\text{II-41})$$

Si l'on prend en compte la réflectivité de la surface de la cellule PV, on détermine son rendement quantique interne EQI qui est donné par cette relation [55]:

$$IQE(\lambda) = \frac{EQE(\lambda)}{1 - R(\lambda).A(\lambda).T(\lambda)} \quad (\text{II-42})$$

$IQE(\lambda)$  : est l'efficacité Quantique Interne (%)

$EQE(\lambda)$  : l'efficacité Quantique Externe (%)

$A(\lambda)$  : l'absorption dans les couches non actives

$T(\lambda)$  : le rayonnement transmis à travers la cellule

#### 7.4 Facteur de forme FF

Il est égal au rapport de la surface du rectangle  $P_{\max}$  ( $P_{\max} = V_m \cdot I_m$ ) sur celle du rectangle dont les côtés mesurent  $V_{oc}$  et  $I_{cc}$ . Il est défini par la relation suivante [56] :

$$FF = \frac{P_{\max}}{V_{oc} \cdot I_{cc}} = \frac{V_m \cdot I_m}{V_{oc} \cdot I_{cc}} \quad (\text{II-43})$$

$$V_{oc} = \frac{KT}{q} \ln\left(\frac{I_{cc}}{I_s} + 1\right) \sim \frac{KT}{q} \ln\left(\frac{I_{cc}}{I_s}\right) \quad (\text{II-44})$$

Plus ce paramètre est élevé, plus l'efficacité de conversion est meilleure [56].

#### 7.5 Le rendement de conversion $\eta$

Le rendement de conversion (*efficiency*) exprimé en pourcentage, désigne le rendement de conversion en puissance. Il est défini comme étant le rapport entre la puissance maximale délivrée par la cellule et la puissance lumineuse incidente  $P_{inc}$ .

$$\eta = \frac{P_{\max}}{P_{inc}} = FF \cdot \frac{V_{oc} \cdot I_{cc}}{P_{inc}} \quad (\text{II-45})$$

Ce rendement peut être amélioré en augmentant le facteur de forme, le courant de court-circuit et la tension à circuit ouvert [56].

## 8 Le principe de l'effet PV

Lorsque le rayonnement solaire frappe une cellule PV sur laquelle on a disposé deux bornes, les photons de la lumière transmettent leurs énergies aux électrons qui sont excités et qui quittent alors leurs niveaux d'énergie situés dans la bande de valence dans laquelle ils laissent des trous pour passer aux autres niveaux plus énergétiques situés dans la bande de conduction. Les électrons et les trous ainsi formés vont avoir tendance à se recombiner mais lorsque le phénomène a lieu au voisinage de la jonction (pn) le champ électrique va au contraire contribuer à séparer les charges positives et négatives. Les électrons sont repoussés vers la couche n et les trous vers la couche p. Les électrons cherchant à se recombiner aux trous sont alors obligés de passer par un circuit extérieur pour rejoindre les trous, ils se crée ainsi un courant électrique continu que l'on appelle photocourant. Et on dit que la cellule PV converti directement une partie de l'énergie lumineuse en énergie électrique c'est l'effet PV [58].

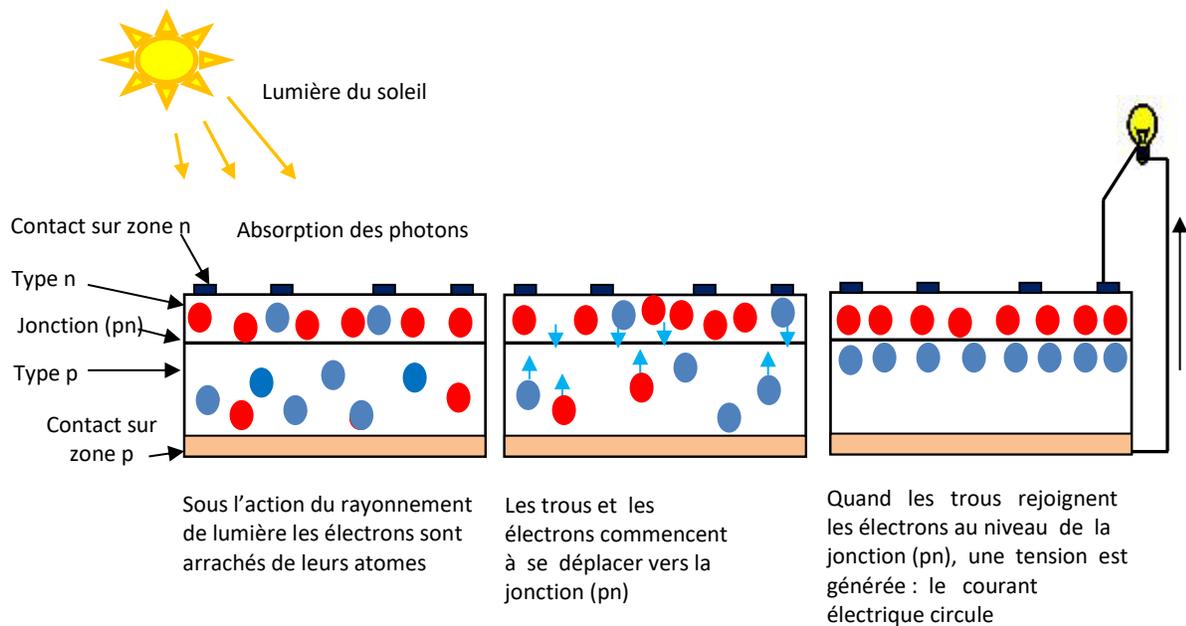


Figure 2. 17 : Principe de fonctionnement d'une cellule PV [59]

## 9 L'influence des pertes sur le rendement $\eta$ de la cellule PV

Le rendement d'une cellule PV est le rapport entre l'énergie électrique qu'elle fournit et l'énergie solaire reçue sur l'ensemble de sa surface, ce rendement ne peut jamais atteindre la valeur maximale (100%) car différentes pertes viennent influencer ce rendement. Ces pertes sont de deux types : les pertes physiques concernant principalement l'énergie du photon incident, et les pertes technologiques dans la plupart des cas dues à la nature du matériau et à la technologie utilisée [57].

### 9.1 Les pertes physiques (énergétiques)

- Si l'énergie des photons incidents est inférieure au gap du matériau, donc ces photons ne peuvent pas générer des paires électrons trous, et ne sont donc pas absorbés par la cellule PV.
- Si l'énergie des photons est supérieure au gap du matériau, donc les photons sont absorbés par le matériau, mais l'excès d'énergie ( $h\nu - E_g$ ) est dissipé sous forme de chaleur par les phonons du réseau : ce phénomène s'appelle la thermalisation.
- Et enfin les photons les plus énergétiques sont absorbés dans les premiers micromètres sous la surface éclairée de la cellule qui constitue l'émetteur, à l'intérieure de laquelle les porteurs photo-générés sont perdus par recombinaison avec les dopants.

### 9.2 Les solutions pour minimiser les pertes physiques

De nombreuses solutions sont envisagées pour minimiser les pertes physiques pour absorber le maximum du spectre solaire. Parmi ces solutions les plus rentables, l'insertion des nanostructures tels que les puits et les boîtes quantiques et l'utilisation des multijonction.

### 9.3 Les pertes technologiques (optiques)

- La réflectivité : le rendement d'une cellule dépend aussi du nombre de photons  $\gamma$  pénétrant. Cette quantité dépend de la réflectivité de la surface de la cellule PV.
- La transmission : il y a une partie des photons bien qu'ayant l'énergie nécessaire, traversent l'épaisseur de la cellule sans être absorbés. Ce terme devient important d'autant plus que la cellule est très fine ( $>100\text{nm}$ ) conduisant à des pertes dites par transmission.
- Recombinaison des porteurs photo-générés : On distingue deux types de

recombinaisons, qui ne dépendent que de la qualité du matériau : les recombinaisons de surface et les recombinaisons en volume.

- Taux d'ombrage : Les contacts métalliques présents sur la face avant a pour collecter les porteurs entraînent des pertes de puissance puisqu'ils couvrent une partie de la surface de la cellule. Le taux d'ombrage est un compromis entre les pertes dues à la couverture partielle de l'émetteur par les contacts et les pertes de facteur de forme provoquées par la résistance série, liée à la largeur de la métallisation.
- Les pertes liées à la cellule et au procédé de fabrication : Ce paramètre dépend de la conception de la cellule, de la qualité du matériau et de la résistivité des contacts métalliques (c'est ces pertes qui sont modélisées par  $R_s$  et  $R_p$ ).

#### 9.4 Les solutions pour minimiser les pertes technologiques

- Pour minimiser la réflexion, la surface de la cellule est recouverte d'une couche anti réfléchissante, si non la pile solaire agit comme un miroir et reflète jusqu'à 33% de la lumière incidente [60]. Cette couche réduit les pertes de réflexion à moins de 5%. Pour les cellules PV à haut rendement, une double couche antireflet est utilisée (avec deux diélectriques différents). Benmohamed et al. [60] ont obtenu un rendement de 14.4 % pour une seule couche antireflet, et de 15.3 % dans le cas de la double couche antireflet  $MgF_2/ZnS$ .
- Pour minimiser les pertes en transmission on utilise une couche réfléchissante sur la face arrière de la cellule.
- Pour minimiser la recombinaison sur la face avant de la cellule PV, une fine couche fortement dopée (même type de dopage que l'émetteur) est réalisée c'est la couche fenêtre, même principe pour le BSF et la face arrière.
- Pour éliminer le compromis entre le taux d'ombrage (nécessité de métallisations fines) et les pertes résistives des contacts (nécessité de métallisations larges), des structures à haut rendement sont proposées telles que les structures à contacts interdigités en face arrière.

## Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté les bases indispensables à la compréhension de la physique des cellules PV. Nous avons rappelé au début du chapitre quelques notions sur le rayonnement solaire et leurs interactions avec la matière, ensuite nous avons étudié la physique des semiconducteurs ainsi que le principe de fonctionnement des cellules et finalement, nous avons abordé leurs modélisations et les facteurs limitants le rendement de conversion des cellules avec des solutions proposées pour les minimiser.

## CHAPITRE 3 : PRÉSENTATION DES MODÈLES UTILISÉ

### Introduction

La modélisation et la simulation représentent un vaste champ pour les recherches relatives à l'enseignement scientifique et technologique, la modélisation consiste à créer des différents modèles pour estimer les propriétés des matériaux semiconducteurs, tandis que la simulation consiste en l'implémentation d'un programme informatique représentant le modèle choisi. On fait alors varier les différents paramètres et on compare les résultats obtenus à ceux prévus par la théorie. Dans ce chapitre on va décrire tous les modèles et les lois théoriques utilisés dans cette thèse, pour l'étude des différentes propriétés structurales, optiques, et les propriétés de transport des matériaux semiconducteurs, puis on valide les résultats obtenus aux datas expérimentaux publiées dans la littérature. Une fois la validation effectuée, on applique le modèle à notre structure  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$ .

#### 1. Propriétés structurales:

##### 1.1 Le choix de la méthode **k.p** :

Afin d'étudier un phénomène physique impliquant des particules évoluant dans un cristal, il est nécessaire de connaître la relation de dispersion de ces particules dans le milieu. (La relation entre l'énergie  $E$  et le vecteur d'onde  $\vec{k}$ ). Pour un semiconducteurs, l'ensemble de ces relations de dispersion des électrons constitue la structure de bande. Pour un électron dans le vide, cette relation de dispersion s'écrit selon l'équation III-1 :

$$E = \frac{k^2 \hbar^2}{2m_0} \quad (\text{III-1})$$

Avec  $E$  l'énergie,  $m_0$  la masse de l'électron libre,  $\mathbf{k}$  son vecteur d'onde et  $\hbar$  la constante de Planck divisée par  $2\pi$ . Pour les électrons dans le Cristal cette relation de dispersion est obtenue en résolvant l'équation de Schrödinger (III-2) dans un potentiel périodique. En effet il existe diverses méthodes de résolution de l'équation de Schrödinger que l'on classe en deux catégories. La première regroupe les théories ayant peu de paramètres ajustables (un seul dans le cas minimum), telle que la méthode du pseudo-potentiel [61]. Cette méthode de calcul est toujours très difficile à mettre en œuvre mais fiable et la taille de la structure à modéliser est très faibles à cause de l'échelle

nanométrique du problème car si l'on veut aller au-delà de cette taille, il faut de très grands moyens de calculs [62,63]. La deuxième catégorie regroupe des théories avec une série de paramètres ajustables telle la méthode des liaisons fortes (en anglais tight binding) [64,65]. La méthode de liaisons fortes est une méthode atomistique comme le modèle du pseudo-potentiel, car elle traite des atomes individuels. Le modèle de liaison forte a été développé à partir d'un autre point de vue physique, où on suppose que les électrons dans le solide sont fortement liés à leurs noyaux comme dans les atomes. En effet, lorsque les atomes sont réunis dans un solide, leurs fonctions d'onde se chevauchent. Dans ce cas, les fonctions d'onde des électrons peuvent être approchées par des combinaisons linéaires des fonctions d'onde atomiques. Par conséquent, cette méthode est également connue en tant que combinaison linéaire d'orbitales atomiques (LCAO) [66]. Théoriquement, le modèle de liaisons fortes est limité pour les matériaux isolants et pour les bandes de valence à cause de la forte liaison supposée des électrons. Cependant, il a été montré que ce modèle peut être aussi privilégié pour décrire les propriétés électroniques des bandes de conduction dans les semiconducteurs si on élimine les interactions entre les électrons de valence. Cela se fait d'une façon empirique par l'ajustement des éléments de la matrice d'interaction. Globalement le modèle de liaisons fortes est numériquement moins difficile à mettre en œuvre que le modèle de pseudo-potentiel en raison de faible taille du système qui est de l'ordre de  $10 \times 10 \times 10$  nm [67,68]. Néanmoins, cette méthode est limitée seulement pour des hétéro-structures de petite taille [69]. La méthode **k.p** que l'on a choisi est basée sur la théorie des perturbations [70]. Elle possède aussi une limitation en raison de son manque de fonctionnalités atomistiques. En effet, Il y a quelques inconvénients lorsqu'on applique la méthode **k.p** à des structures quantiques de très faible taille. En outre, l'utilisation de cette méthode est généralement limitée au centre de la zone de Brillouin ( $k=0$ ). Malgré ces limites, la méthode **k.p** a été appliquée avec succès pour modéliser une grande variété d'hétérostructures, La mise en œuvre la plus couramment utilisée de la méthode **k.p** est l'Hamiltonien à 8-bandes, qui décrit aussi bien la partie supérieure de la bande de valence que la partie basse de la bande de conduction ainsi que l'effet de l'interaction spin-orbite. Le modèle de la masse effective peut être considéré aussi comme une théorie **k.p** à une bande, l'influence des autres bandes étant traitée comme perturbation. De plus, avec la méthode **k.p** on peut incorporer plusieurs effets tel que la contrainte, la piézoélectricité ainsi que l'influence d'un champ électrique externe. Le plus important encore, c'est que la méthode **k.p** nécessite beaucoup moins de calcul. La méthode **k.p** été donc la méthode de choix pour les calculs rapportés dans ce travail de thèse.

En effet le nombre de paramètres ajustables dépend du nombre de bandes que l'on veut décrire et de la précision recherchée. Typiquement, 5-6 paramètres sont nécessaires au voisinage de la bande interdite, une vingtaine si plusieurs bandes sont utilisées. A la fin, plus on considère de bandes plus le domaine de validité de la méthode s'accroît [71, 72].

## 1.2 Les niveaux d'énergie dans la méthode $\mathbf{k.p}$

Les états électroniques dans les semiconducteurs se déterminent en résolvant l'équation de Schrödinger indépendante du temps :

$$H\Psi(r) = \left(\frac{1}{2m_0}p^2 + V(r)\right)\Psi(r) = E\Psi(r) \quad (\text{III-2})$$

H étant le Hamiltonien et E, un état propre du système associé à la fonction d'onde, p est le moment cinétique de l'électron,  $m_0$  : la masse de l'électron et V le potentiel. Puisque le potentiel vu par un électron dans le cristal est périodique, le théorème de Bloch [73] permet d'écrire la fonction d'onde de l'électron sous la forme suivante :

$$\Psi_k(r) = \mu_k(r)e^{ik.r} \quad (\text{III-3})$$

$\mathbf{k}$  est le vecteur d'onde, les fonctions  $\mu_k$  contenant la périodicité.

Par l'application de la théorie de perturbation, le Hamiltonien de l'électron s'écrit comme une sommation d'une partie non perturbée (indépendante de  $\mathbf{k}$ ),  $H_0$  et d'une partie perturbation (dépendante de  $\mathbf{k}$ ),  $\hat{H}(k)$ . Aussi l'interaction spin orbite ajoute un terme  $H_{so}$  tel que :

$$H_0 = \frac{1}{2m_0}p^2 + V(r) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2}(\sigma \times \nabla V(r)).p \quad (\text{III-4})$$

$$\hat{H}(k) = \frac{\hbar^2}{2m_0}k^2 + \frac{\hbar}{m_0}k(p + \frac{\hbar}{4m_0c^2}\sigma \times \nabla V(r)) \quad (\text{III-5})$$

$$H_{so} = \frac{\hbar}{4m_0c^2}\sigma \times \nabla V \quad (\text{III-6})$$

Avec  $\sigma$  représente les matrices de Pauli tel que ces derniers sont :

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

La résolution de cet Hamiltonien donne les valeurs propres des quatre niveaux d'énergie schématisés sur la figure (3.1) pour la structure GaAs dont les paramètres sont définis dans le tableau (3.1) [74] :

$$E_c(k) = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{k^2 P^2 (E_g + 2\Delta/3)}{E_g (E_g + \Delta)} \quad (\text{III-7})$$

$$E_{hh}(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \quad (\text{III-8})$$

$$E_{lh}(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - \frac{2k^2 P^2}{3E_g} \quad (\text{III-9})$$

$$E_{so}(k) = -\Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - \frac{k^2 P^2}{3(E_g + \Delta)} \quad (\text{III-10})$$

Tel que

$$P = \sqrt{\frac{E_p \hbar^2}{2m_0}} \quad (\text{III-11})$$

Tableau 3. 1: Paramètres de la structure binaire GaAs dans le modèle k.p pour un Hamiltonien à huit bandes

Energie de gap (eV)	$E_g = 1.424;$
Energie d'interaction (eV)	$E_p = 28.8;$
Paramètres de luttinger (Pour le calcul des masses effectives)	$\gamma_1 = 6.79;$
	$\gamma_2 = 1.924;$
	$\gamma_3 = 2.782;$
L'énergie de couplage spin-orbite (eV)	$\Delta = 0.341$
La masse effective pour la bande de conduction	$m_c = 0.065m_0$
Energie de la bande de valence (eV)	$E_v = 0$
Energie de la bande de conduction (eV)	$E_c = E_v + E_g$

La figure (3.1) montre des formes paraboliques pour toutes les sous-bandes issues de nos calculs.

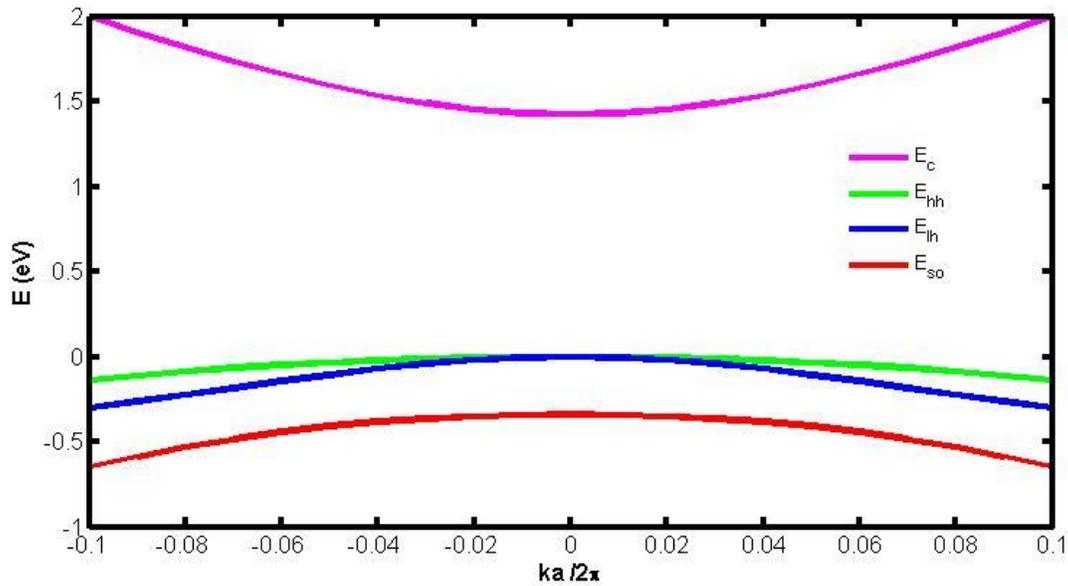


Figure 3. 1: : La bande de conduction et la bande de valence pour la structure binaire GaAs en fonction de vecteur k selon la direction [1 0 0].

### 1.3 La structure des bandes dans le cas d'absence de contraintes :

Dans le cas d'absence de contrainte pour l'empilement des semiconducteurs ayant les mêmes paramètres de maille, la théorie proposée en 1986 pour la première fois pour les alliages (Si) et (Ge) par Van de Walle et al. [75] et étendue à plusieurs autres matériaux semiconducteurs en 1989 par Van de Walle et al. [76], prévoit que les bandes de conduction  $E_c$  et la bande de valence  $E_v$  sont séparées par une bande interdite  $E_g$  ainsi les deux bandes des trous lourds et trous légers sont isotropes et dégénérées au centre de la zone de Brillouin, la bande de trous spin- splittée est située à une énergie  $\Delta_0$  au-dessous de ces deux bandes. Le centre de gravité de la bande de valence  $E_{V,moy} = (E_{HH} + E_{LH} + \Delta_0)/3$  se trouve par conséquent à  $\frac{\Delta_0}{3}$  au-dessous du haut de la bande de valence en  $k=0$ , figure (3.2) [77].

Les niveaux d'énergie de la bande de valence  $E_v$ , la bande de spin- orbite  $E_{so}$ , et la bande de conduction  $E_c$  sont donnés par les équations suivantes :

$$E_v = E_{v,moy} + \frac{\Delta_0}{3} \quad (\text{III-12})$$

$$E_{so} = E_v - \Delta_0 = E_{v,moy} - \frac{2\Delta_0}{3} \quad (\text{III-13})$$

$$E_c = E_v + E_g \quad (\text{III-14})$$

Les niveaux d'énergie, en cas d'absence de contraintes, de la bande de valence  $E_v$ , de la bande de spin-orbite  $E_{so}$ , et de la bande de conduction  $E_c$  sont illustrés sur la figure (3.2) [77] :

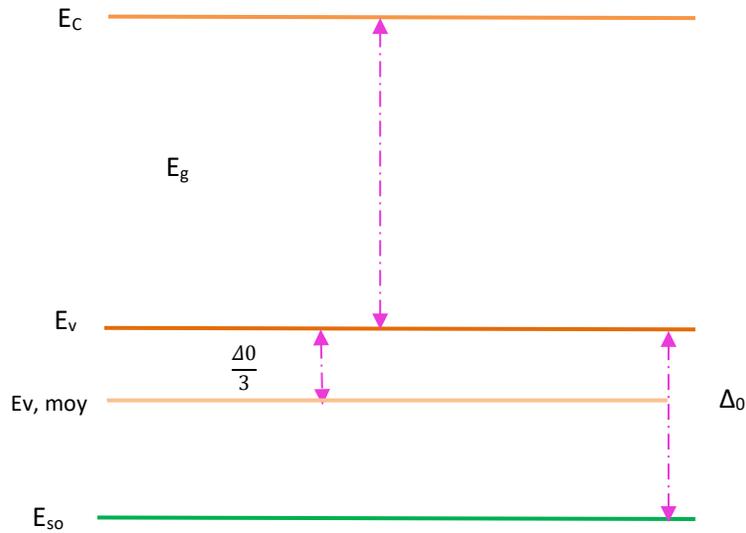


Figure 3. 2: : Structure des bandes en cas d'absence de contraintes

[77]

#### 1.4 L'effet de la contrainte sur les niveaux d'énergie :

Lors de l'épitaxie d'un semiconducteurs sur un autre (substrat) avec des paramètres de mailles ( $a_c$ ) et ( $a_s$ ) légèrement différents, le substrat impose son paramètre de maille dans le plan de la couche épitaxiale. Par conséquent, cette dernière devient le siège de contrainte en compression si ( $a_c > a_s$ ) ou en tension si ( $a_c < a_s$ ) comme il est illustré sur la figure (3.3) :

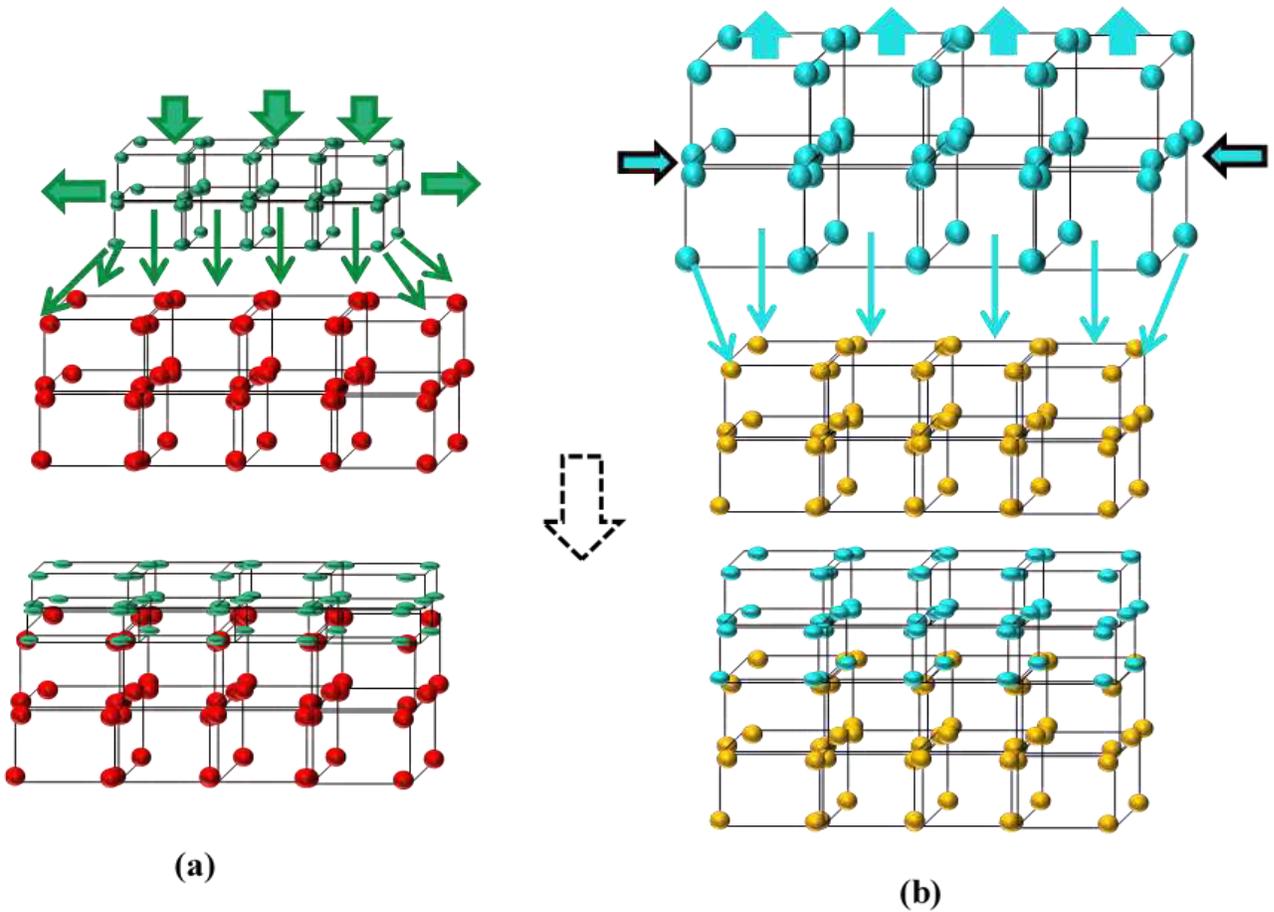


Figure 3. 3: : L'adaptation du paramètre de maille de la couche épitaxiale avec le substrat a) cas de tension ( $a_c < a_s$ ), b) cas de compression ( $a_c > a_s$ )

[77]

Cette contrainte (compressives ou en tension), influe directement sur les propriétés électroniques du matériau. L'adaptation du paramètre de maille des deux couches superposées donne lieu aux déformations suivantes selon le modèle de Bir et Pikus [78]:

La déformation dans le plan de la couche donné par :

$$\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \frac{a_s - a_c}{a_c} \quad \text{(III-15)}$$

La déformation dans la direction de croissance donné par :

$$\epsilon_{zz} = -2 \times \frac{c_{12}}{c_{11}} \times \epsilon_{xx} \quad \text{(III-16)}$$

Et donc la déformation (contrainte) totale :

$$\epsilon_{total} = \epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz} \quad \text{(III-17)}$$

Où  $C_{11}$  et  $C_{12}$  sont les constantes élastiques des binaires composant les structures.

La relaxation de la contrainte totale induit un changement de volume du réseau cristallin qui modifie légèrement la symétrie du système, comme il est illustré sur la figure (3.4) :

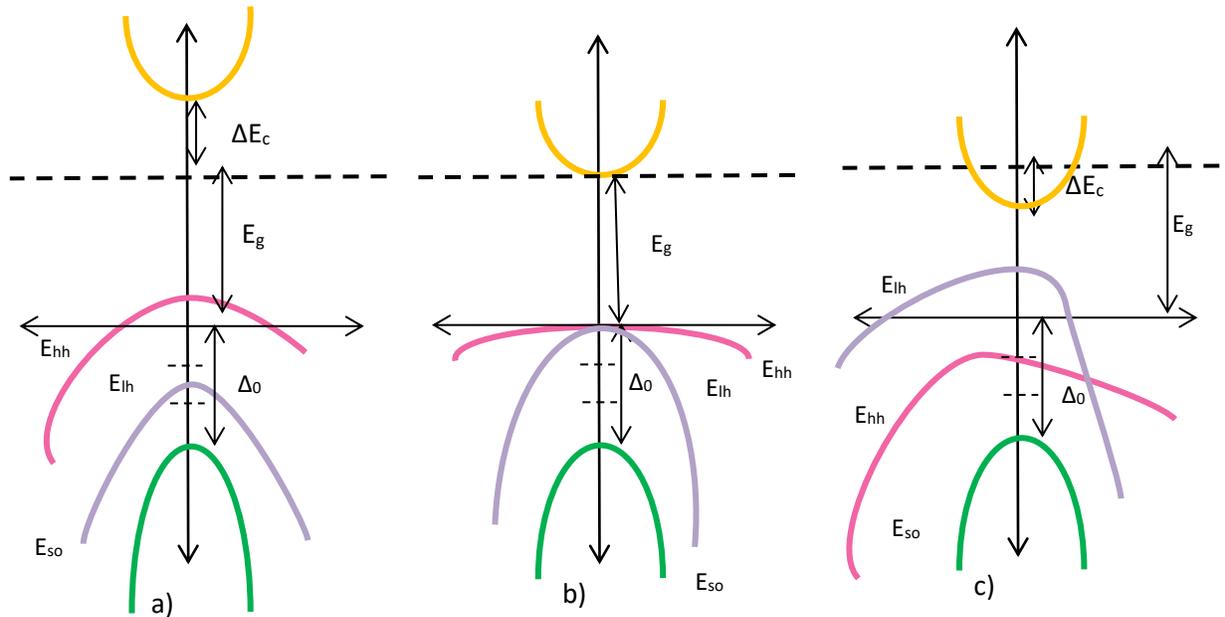


Figure 3. 4: Diagrammes d'énergie de trois structures a) en compression b) non contracté c) en tension

[79]

L'énergie de la bande interdite subit un changement avec une levée la dégénérescence de la bande de valence ( séparation des bandes de trous légers et de trous lourds). En effet la déformation selon l'axe de croissance provoque un décalage du centre de gravité de la bande de valence ainsi que du centre de gravité de la bande de conduction ; c'est la composante hydrostatique de la contrainte. La deuxième composante c'est la contrainte de cisaillement, qui lève la dégénérescence des états énergétiques des trous lourds et des trous légers en  $k=0$  ceci donne deux sous bandes dites «  $E_{hh}$  » et «  $E_{lh}$  » [77]. Pour une couche soumise à une contrainte en compression, la composante hydrostatique augmente le gap moyen entre la bande de conduction et la bande de valence alors que la composante de cisaillement rend les bandes de valence fortement anisotropes (levée de dégénérescence) : la bande de plus haute énergie  $E_{hh}$  située au-dessus de la sous-bande  $E_{lh}$  selon

$k_{\perp}$ . Si la couche est soumise à une contrainte en tension, le gap moyen diminue et les sous bandes de valences ( $E_{lh}$ ) et ( $E_{hh}$ ) sont inversées par rapport à celles d'une couche en compression [79]. Les décalages en énergie des centres de gravité de la bande de valence et de la bande de conduction en  $k=0$  varient proportionnellement à la contrainte, ils sont donnés respectivement par les équations suivantes :

$$\Delta E_{v,moy}^{hy} = a_v(2\varepsilon_{//} + \varepsilon_{\perp}) \quad (\text{III-18})$$

$$\Delta E_c^{hy} = a_c(2\varepsilon_{//} + \varepsilon_{\perp}) \quad (\text{III-19})$$

Où  $a_c$  et  $a_v$  sont les potentiels hydrostatiques de déformation pour respectivement les bandes de conduction et de valence des structures binaires.

Les décalages énergétiques induits par la contrainte de cisaillement pour chacune des bandes constituant la bande de valence pour les trous lourds, les trous légers et le spin-orbite sont respectivement donnés par [77]:

$$\Delta E_{hh}^{Ci} = -\frac{1}{2}\delta E^{Ci} \quad (\text{III-20})$$

$$\Delta E_{lh}^{Ci} = -\frac{1}{2}\Delta_0 + \frac{1}{4}\delta E^{Ci} + \frac{1}{2}\left[\Delta_0^2 + \Delta_0\delta E^{Ci} + \frac{9}{4}(\delta E^{Ci})^2\right]^{1/2} \quad (\text{III-21})$$

$$\Delta E_{so}^{Ci} = -\frac{1}{2}\Delta_0 + \frac{1}{4}\delta E^{Ci} - \frac{1}{2}\left[\Delta_0^2 + \Delta_0\delta E^{Ci} + \frac{9}{4}(\delta E^{Ci})^2\right]^{1/2} \quad (\text{III-22})$$

$$\delta E^{Ci} = 2 \times b \times (\varepsilon_{\perp} - \varepsilon_{//}) \quad (\text{III-23})$$

Où,  $b$  est le potentiel de déformation.

En prenant comme référence énergétique  $E_{v, moy}$  et compte tenu des équations précédentes, on peut définir [77]:

$$E_v = E_{v,moy} + \frac{\Delta_0}{3} + \Delta E_{v,moy}^{hy} + \max(\Delta E_{hh}^{Ci}, \Delta E_{lh}^{Ci}) \quad (\text{III-24})$$

$$E_c = E_g + E_{v,moy} + \Delta E_c^{hy} + \frac{\Delta_0}{3} \quad (\text{III-25})$$

$$E_g^{cont} = E_c - E_v = E_g + \Delta E_c^{hy} - \Delta E_{v,moy}^{hy} - \max(\Delta E_{hh}^{Ci}, \Delta E_{lh}^{Ci}) \quad (\text{III-26})$$

### 1.5 L'effet de l'azote (N) sur la bande de conduction (le modèle de anticrossing BAC) :

En plus des effets de la contrainte pour les semiconducteurs III-V les recherches ont prouvé qu'il n'y a que certains éléments chimiques qui engendrent des perturbations dans les structures des bandes de conduction des alliages tel que (N). En effet les semiconducteurs III-V-N sont caractérisés par leurs énergies de la bande interdite qui diminue d'une façon remarquable avec l'incorporation de (N) [80]. Wu et al. [81] ont montré que ces phénomènes inhabituels peuvent être expliqués par un modèle d'anti-croisement de bande (BAC). Dans ce modèle, l'incorporation de (N) dans la matrice hôte (GaAs pour l'alliage GaAsN par exemple) conduit à une forte interaction, entre les états étendus de la bande de conduction de GaAs et le niveau localisé de (N), traité comme une perturbation. La résolution de l'équation (III-2) donne deux valeurs correspondantes aux deux sous bandes de conduction  $E_c^+$  et  $E_c^-$  données par les équations suivantes :

$$E_{C\pm} = \frac{1}{2}(E_M + E_N \pm \sqrt{E_M^2 - 2E_M E_N + E_N^2 + 4V_{mN}^2}) \quad (\text{III-27})$$

$E_M$  : est l'énergie de l'alliage en cas d'absence de N, (GaAs pour l'alliage GaAsN par exemple).  
 $E_N$  : est l'énergie localisée de l'état de N (par rapport au sommet de la bande de valence) et  $V_{MN}$  l'élément matriciel décrivant l'interaction entre ces deux états.

$$V_{MN} = C_{MN}\sqrt{x} \quad (\text{III-28})$$

L'énergie de  $E_c^-$  est plus faible que celle de  $E_c^+$  quel que soit la concentration de N. On dit qu'on a un éclatement de la bande de conduction et que cet éclatement augmente avec la concentration de (N). Dans les figures (3.5), (3.6) on constate que l'éclatement de la bande de conduction (la distance entre les deux sous bandes de conduction) augmente avec l'incorporation de N. La comparaison entre notre simulation et les mesures expérimentales publiées par Beaudoin et al. [82] pour la structure InGaN d'une part et de Skierbiszewski et al. [83] pour la structure InGaAsN d'une autre part montrent qu'on a un très bon accord.

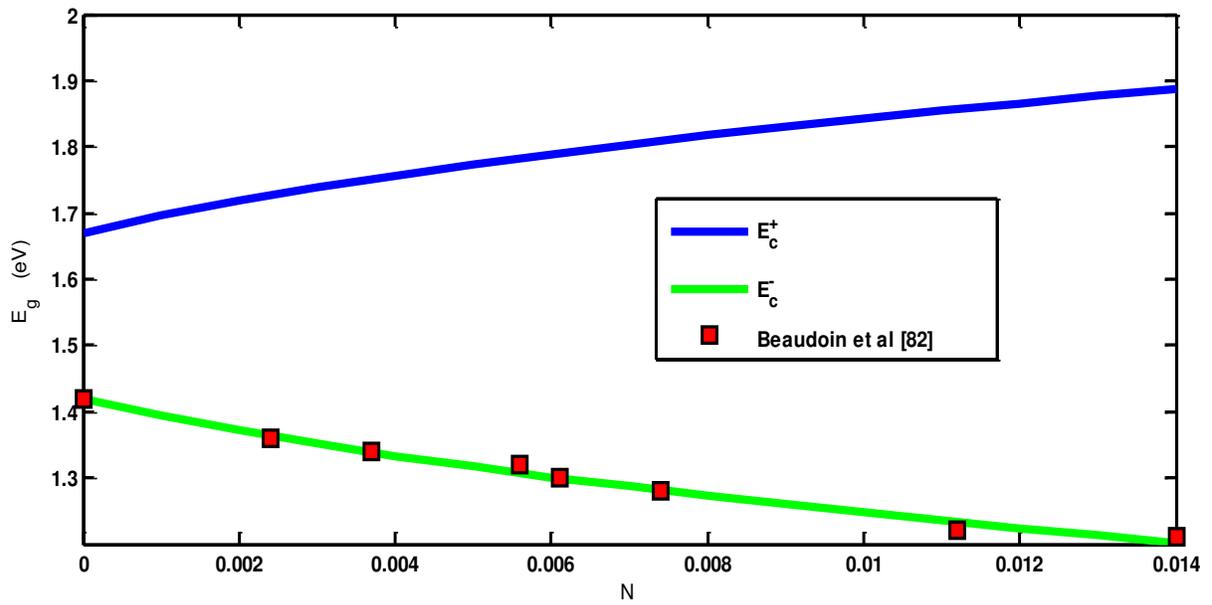


Figure 3. 5: Éclatement de la bande de conduction pour la structure GaAsN en fonction de la concentration de N

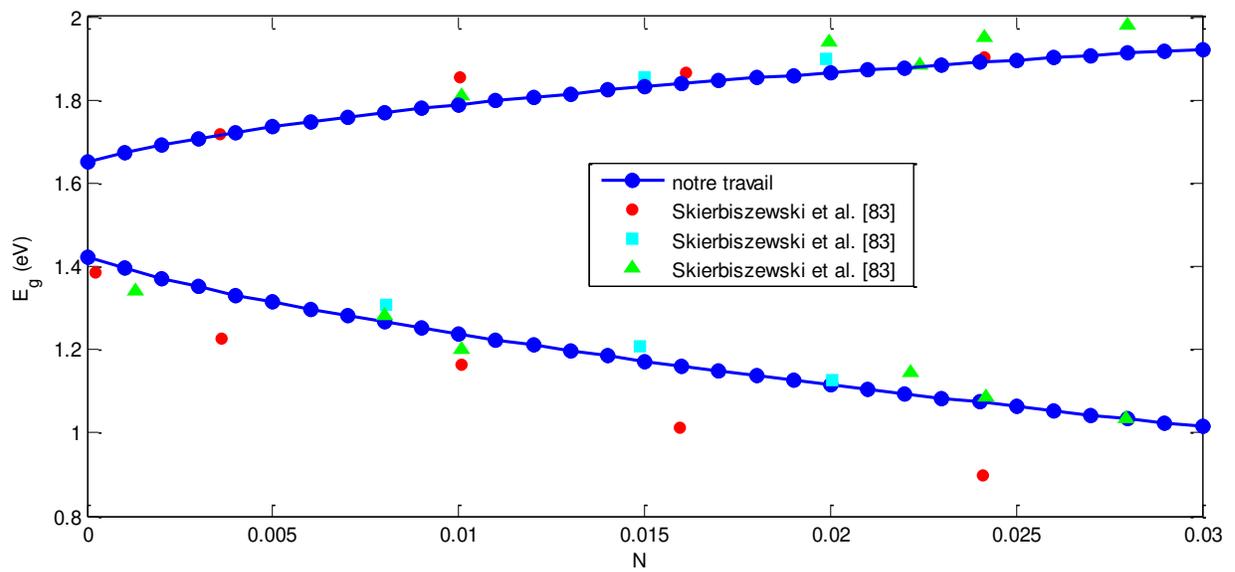


Figure 3. 6 : Éclatement de la bande de conduction pour la structure InGaAsN en fonction de la concentration de N

1.6 L'effet de l'antimoine (Sb) et le bismuth (Bi) sur la bande de valence (le modèle de valence anticrossing VBAC) :

De la même façon, que pour la bande de conduction des structures III-V-N, les structures III-V-Sb et III-V-Bi subissent le même phénomène d'éclatement de leurs bandes de valence. Et si on considère l'effet de la contrainte et la levée de la dégénérescence, on obtient  $E_{hh}^+$ ,  $E_{hh}^-$ ,  $E_{lh}^+$ , et  $E_{lh}^-$ , selon le modèle (VBAC) pour III-V-Sb ou III-V-Bi [83] tel que :

$$E_{hh/lh\pm} = \frac{1}{2}(E_Q + E_{Sb/Bi} \pm \sqrt{E_Q^2 - 2E_Q E_{Sb/Bi} + E_{Sb/Bi}^2 + 4V_{Sb/Bi}^2}) \quad (\text{III-29})$$

Avec  $E_Q$  : l'énergie de la sous-bande hh/lh de l'alliage en cas d'absence de Sb (ou Bi).

$E_{Sb/Bi}$  est l'énergie localisée de l'état de Sb (ou Bi) par rapport au sommet de la bande de valence.

$V_{MN}$  est l'élément matriciel décrivant l'interaction entre ces deux états.

1.7 La combinaison entre le modèle BAC et le modèle VBAC :

Le modèle de double bande anticrossing (DBAC) développé par LIN et al. [84] combine le modèle (BAC) et le modèle (VBAC) [85]. Pour l'étude de la structure de bande des alliages III-V-N-Sb ou III-V-N-Bi on utilise l'Hamiltonien à 16 bandes, qui est un étendu de l'Hamiltonien à 8 bandes pour le GaAs en tenant compte des effets de (Sb /Bi) sur la bande de valence et de (N) sur la bande de conduction tout en rajoutant les termes de décalage  $\Delta E_{CBM}$ ,  $\Delta E_{VBM}$  et  $\Delta E_{SO}$  aux éléments diagonaux correspondant aux  $\Gamma_6$ ,  $\Gamma_7$  et  $\Gamma_8$  respectivement [86]. L'ajout des atomes N et Sb (Bi) au GaAs entraîne la formation des niveaux de défauts  $E_N$ ,  $E_{Sb(Bi)}$  et  $E_{Sb(Bi)-so}$ . Le niveau de défaut lié à N est situé au-dessus du minimum de la bande de conduction (CBM) de GaAs alors que le niveau d'impureté lié à Sb (Bi),  $E_{Sb(Bi)}$  et le niveau de séparation spin-orbite  $E_{Sb(Bi)-so}$  correspondant sont inférieurs au minimum de la bande de valence (VBM). L'interaction entre le niveau de résonance de N avec les niveaux d'énergie de la bande de conduction GaAs provoque la génération de deux sous-bandes de conduction dans GaAsN,  $E_c^+$  et  $E_c^-$  (en raison de la grande différence d'électronégativité entre As et N). De la même manière, les interactions entre les niveaux VBM et Sb (Bi) provoquent le fractionnement des deux sous-bandes de valence en celles des trous légers ( $lh_{\pm}$ ), et celles des trous lourds ( $hh_{\pm}$ ). Le couplage des états d'impuretés de Sb (Bi), les états de la bande de valence étendus et les états localisés de N avec les états de bande de conduction de GaAs

sont pris en charge par l'inclusion des termes de couplage  $V_{Sb}(y) = C_{Sb} \times y$  et  $V_N(x) = C_N \times x$ . [87].

L'Hamiltonien résultant  $16 \times 16$  s'écrit sous la forme [87]:

$$H_{16 \times 16} = \begin{pmatrix} H_{8 \times 8}^{mod} & V_{8 \times 8}^{N,Sb}(x, y) \\ V_{8 \times 8}^{N,Sb}(x, y) & E_{8 \times 8}^{N,Sb} \end{pmatrix} \quad (III-30)$$

Tel que

$$E_{8 \times 8}^{N,Sb} = \begin{pmatrix} E_N & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_N & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_{Sb} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_{Sb} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & E_{Sb} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & E_{Sb} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & E_{Sb-so} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & E_{Sb-so} \end{pmatrix} \quad (III-31)$$

$$V_{8 \times 8}^{N,Sb}(x, y) = \begin{pmatrix} V_N(y) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & V_N(y) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & V_{Sb}(x) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & V_{Sb}(x) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & V_{Sb}(x) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & V_{Sb}(x) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & V_{Sb}(x) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & V_{Sb}(x) \end{pmatrix} \quad (III-32)$$

$$H_{8 \times 8}^{mod} = \begin{pmatrix} c & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}}P_+ & \sqrt{\frac{2}{3}}P_z & \frac{1}{\sqrt{6}}P_- & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}}P_z & \frac{1}{\sqrt{3}}P_- \\ 0 & c & 0 & \frac{1}{\sqrt{6}}P_+ & \sqrt{\frac{2}{3}}P_z & \frac{1}{\sqrt{2}}P_- & \frac{1}{\sqrt{3}}P_+ & -\frac{1}{\sqrt{3}}P_z \\ -\frac{1}{\sqrt{2}}P_+^* & 0 & H & \alpha & \beta & 0 & \frac{i\alpha}{\sqrt{2}} & -i\sqrt{2}\beta \\ \sqrt{\frac{2}{3}}P_z & \frac{1}{\sqrt{6}}P_+^* & \alpha^* & L & 0 & \beta & i(\sqrt{2}\varepsilon - \frac{D}{\sqrt{2}}) & i\alpha\sqrt{\frac{3}{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{6}}P_-^* & \sqrt{\frac{2}{3}}P_z & \beta^* & 0 & L & -\alpha & i\alpha^*\sqrt{\frac{3}{2}} & i(\sqrt{2}\varepsilon - \frac{D}{\sqrt{2}}) \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}P_-^* & 0 & \beta^* & -\alpha^* & H & -i\sqrt{2}\beta^* & \frac{i\alpha^*}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}}P_z & \frac{1}{\sqrt{3}}P_+^* & \frac{i\alpha^*}{\sqrt{2}} & i(\frac{D}{\sqrt{2}} - \sqrt{2}\varepsilon) & i\alpha\sqrt{\frac{3}{2}} & i\sqrt{2}\beta & S & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{3}}P_-^* & -\frac{1}{\sqrt{3}}P_z & i\sqrt{2}\beta^* & -i\alpha^*\sqrt{\frac{3}{2}} & i(\frac{D}{\sqrt{2}} - \sqrt{2}\varepsilon) & \frac{i\alpha}{\sqrt{2}} & 0 & S \end{pmatrix} \quad (III-33)$$

Avec

$$c = E_g + \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[ \frac{1}{m_e^*} - \frac{E_p}{3} \left( \frac{2}{E_g} - \frac{1}{E_g + \Delta_{so}} \right) \right] (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) + \Delta E_{CBM}(x, y) + \varepsilon(z) \quad (III-34)$$

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m_0} [(k_x^2 + k_y^2)(\gamma_1 + \gamma_2) + k_z^2(\gamma_1 - 2\gamma_2)] + \Delta E_{VBM}(x, y) + \varepsilon(z) \quad (\text{III-35})$$

$$L = \frac{-\hbar^2}{2m_0} [(k_x^2 + k_y^2)(\gamma_1 - \gamma_2) + k_z^2(\gamma_1 + 2\gamma_2)] + \Delta E_{VBM}(x, y) - \varepsilon(z) \quad (\text{III-36})$$

$$S = \frac{1}{2}(L + H) - \Delta_{so} - \Delta E_{so}(x, y) - \varepsilon_2(z) \quad (\text{III-37})$$

$$P_{\pm} = P(k_x \pm ik_y) - P(e_{xx}k_x \pm ie_{yy}k_y) \quad (\text{III-38})$$

$$P_z = Pk_z - P(e_{zz}k_z) \quad (\text{III-39})$$

$$\alpha = \frac{\hbar^2}{2m_0} 2\sqrt{3}[k_z(k_x - ik_y)\gamma_3] \quad (\text{III-40})$$

$$\beta = \frac{\hbar^2}{2m_0} \sqrt{3}[(k_x^2 - k_y^2)\gamma_2 - 2ik_xk_y\gamma_3] \quad (\text{III-41})$$

$$D = L - H \quad (\text{III-42})$$

$$\varepsilon(z) = \begin{cases} 2(a_c + a_v)(1 - c_{12}/c_{11})e_{xx} & (\text{pour le puit}) \\ 0 & (\text{pour la barrière}) \end{cases} \quad (\text{III-43})$$

$$E_p = \frac{2m_0}{\hbar^2} p^2 \quad (\text{III-44})$$

Avec  $\lambda_1$ ,  $\lambda_2$  et  $\lambda_3$  sont les paramètres de Luttinger pour GaAs.

Au point  $\Gamma$  ( $k_x=k_y=k_z=0$ ), tous les éléments hors diagonale de la matrice de  $8 \times 8$  modifiée deviennent nuls et la solution du Hamiltonien  $16 \times 16$  nous donne 6 équations correspondant aux  $E_{CB}^{\pm}$ ,  $E_v^{\pm}$  et  $E_{SO}^{\pm}$  tel que [88]:

$$E_{CB\pm} = \frac{1}{2}(C + E_N \pm \sqrt{C^2 + 2CE_N + E_N^2 + 4V_N(x)^2}) \quad (\text{III-45})$$

$$E_{hh/lh\pm} = \frac{1}{2}(T + E_{Sb} \pm \sqrt{T^2 + 2TE_{Sb} + E_{Sb}^2 + 4V_{Sb}(y)^2}) \quad (\text{III-46})$$

$$E_{so\pm} = \frac{1}{2}(S + E_{Sb-so} \pm \sqrt{S^2 + 2SE_{Sb-so} + E_{Sb-so}^2 + 4V_{Sb}(y)^2}) \quad (\text{III-47})$$

$$\text{Tel que } C = E_g^{GaAs} + \Delta E_{CBM}(x, y) \quad (\text{III-48})$$

$$\Delta E_{CBM}(x, y) = x\Delta E_{CBM}^{GaAsN} + y\Delta E_{CBM}^{GaAsSb} \quad (\text{III-49})$$

$$T = L = \Delta E_{VBM}(x, y) \quad (\text{III-50})$$

$$\Delta E_{VBM}(x, y) = x\Delta E_{VBM}^{GaAsN} + y\Delta E_{VBM}^{GaAsSb} \quad (\text{III-51})$$

$$S = \frac{1}{2}(L + T) - \Delta_0^{GaAs} - \Delta E_{so}(x, y) \quad (\text{III-52})$$

$$\Delta E_{so}(x, y) = x\Delta E_{so}^{GaAsN} + y\Delta E_{so}^{GaAsSb} \quad (\text{III-53})$$

Où :

$\Delta E_{CBM}^{GaAsN} = 0.07$ : est le décalage de la bande de conduction pour la structure GaAsN.

$\Delta E_{CBM}^{GaAsSb} = -0.06$ : le décalage de la bande de conduction pour la structure GaAsSb.

$\Delta E_{VBM}^{GaAsN} = 1.84$ : le décalage de la bande de valence pour la structure GaAsN.

$\Delta E_{VBM}^{GaAsSb} = -0.77$ : le décalage de la bande de valence pour la structure GaAsSb.

$\Delta E_{so}^{GaAsN} = 1.52$ : le décalage de la bande spine orbite pour la structure GaAsN.

$\Delta E_{so}^{GaAsSb} = -0.35$  : le décalage de la bande spine orbite pour la structure GaAsSb.

De même les valeurs numériques de  $E_N, E_{Sb}, E_{Sb-so}, E_N, C_N, E_{Sb}, C_{Sb}$  sont respectivement (0.23, 1.0, 1.6, 0.23, 2.7, 1.0, 1.05) [88]. Ceci nous donne huit valeurs de la bande interdite ( $E_{c+} - E_{hh+}$ ), ( $E_{c+} - E_{hh-}$ ), ( $E_{c+} - E_{lh+}$ ), ( $E_{c+} - E_{h-}$ ), ( $E_{c-} - E_{hh+}$ ), ( $E_{c-} - E_{hh-}$ ), ( $E_{c-} - E_{lh+}$ ), ( $E_{c-} - E_{h-}$ ), c'est le modèle DBAC.

Le calcul proposé par Lin et al. [84] basé sur les termes de décalages n'est pas toujours facile. Par exemple dans le cas de l'alliage quinaire InGaAsNSb contenant à la fois le (N) et le (Sb), les termes de décalages pour les ternaires comme pour les quaternaires n'existent pas dans la littérature. Aissat et al. [90] ont proposé une autre méthode plus facile basée sur le principe que les paramètres C (III-47) et T (III-49) représentent respectivement l'énergie de la bande de conduction pour l'alliage en cas d'absence de N et Sb (il ne lui reste que le ternaire InGaAs :  $E_{c \text{ InGaAs}}$ ) et l'énergie

de la sous-bande des trous lourds/légers toujours dans le cas d'absence de N et Sb ( $E_{hh}/lh$  InGaAs) tel que :

$$E_{CB\pm} = \frac{1}{2}(E_C (InGaAs) + E_N \pm \sqrt{(E_C (InGaAs) - E_N)^2 + 4V_N^2}) \quad (III-54)$$

$$E_{hh\pm} = \frac{1}{2}(E_{hh} (InGaAs) + E_{Sb} \pm \sqrt{(E_{hh} (InGaAs) - E_{Sb})^2 + 4V_{Sb}^2}) \quad (III-55)$$

$$E_{lh\pm} = \frac{1}{2}(E_{lh} (InGaAs) + E_{Sb} \pm \sqrt{(E_{lh} (InGaAs) - E_{Sb})^2 + 4V_{Sb}^2}) \quad (III-56)$$

Avec :  $E_N = 1.65(1-x) + 1.44x - 0.38x(1-x)$ ,  $V_N = (2.4(1-x) + 1.75x)\sqrt{y}$ ,  $E_{Sb} = -1$  eV,  $V_{Sb} = 1.5\sqrt{z}$

Dans notre travail, on a introduit une simple modification par rapport au calcul de Aissat et al. [90]. Sachant que C représente l'énergie de la bande de conduction pour l'alliage en cas d'absence de (N) seulement ( $E_C$  InGaAsSb) en d'autres termes la présence de (N) n'agit que sur la bande de conduction. De même pour T qui représente l'énergie de la sous-bande des trous lourds /légers en cas d'absence de (Sb) ( $E_{hh}/lh$  InGaAsN), en d'autres termes la présence de (Sb) n'agit que sur la bande de valence. Les équations précédentes s'écrivent :

$$E_{CB\pm} = \frac{1}{2}(E_C (InGaAsSb) + E_N \pm \sqrt{(E_C (InGaAsSb) - E_N)^2 + 4V_N^2}) \quad (III-57)$$

$$E_{hh\pm} = \frac{1}{2}(E_{hh} (InGaAsN) + E_{Sb} \pm \sqrt{(E_{hh} (InGaAsN) - E_{Sb})^2 + 4V_{Sb}^2}) \quad (III-58)$$

$$E_{lh\pm} = \frac{1}{2}(E_{lh} (InGaAsN) + E_{Sb} \pm \sqrt{(E_{lh} (InGaAsN) - E_{Sb})^2 + 4V_{Sb}^2}) \quad (III-59)$$

Et les termes  $E_N$ ,  $E_{Sb}$ ,  $V_{Sb}$  et  $V_N$  sont les mêmes que dans les travaux de Aissat et al. [90].

Afin de montrer l'effet de ce changement par rapport aux calculs de Aissat et al. [90] nous allons comparais nos résultats dans le cadre de BAC modèle, avec les résultats de Aissat et al. [90] d'une part et les résultats de Aho et al. [89] et ceux de Bakir dans le cadre de BAC modèle avec les datas expérimentaux effectués par Aho et al. [89] d'autre part. mais avant on présente les calculs de Aho et al. [89] et Bakir [94] dans le cadre du BAC modèle. Sachant qu'on a supposé que notre référence énergétique étant ( $E_v=0$  eV) donc  $E_c$  correspond exactement à  $E_g$ .

Tableau 3. 2 : Les valeurs des paramètres empiriques utilisés par Aho et al. [89] et Bakir et al. [94] :

Aho ( $\text{In}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{As}_{(1-y-z)}\text{N}_z\text{Sb}_y$ )	Bakir ( $\text{In}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{As}_{(1-y-z)}\text{N}_y\text{Sb}_z$ )
$E_{g_{\pm}} = \frac{1}{2} \left( (E_M + E_N) \pm \sqrt{(E_M - E_N)^2 + 4V_N^2} \right)$	$E_{g_{\pm}} = \frac{1}{2} \left( (E_M + E_N) \pm \sqrt{(E_M - E_N)^2 + 4V_N^2} \right)$
$E_M = M_1 + M_2$ $M_1 = \frac{x(1-x)(yE_g(\text{GaInSb}) + (1-y)E_g(\text{GaInAs}))}{x(1-x) + y(1-y)}$ $M_2 = \frac{y(1-y)(xE_g(\text{InAsSb}) + (1-x)E_g(\text{GaAsSb}))}{x(1-x) + y(1-y)}$	$E_M = \frac{P_1}{P_2}$ $P_1 = (1-x) \cdot [x \cdot y \cdot P_{\text{GaInN}} + x \cdot (1-y-z) \cdot P_{\text{GaInAs}} + y \cdot (1-y-z) \cdot P_{\text{GaAsN}}] + (1-x) \cdot [y \cdot z \cdot P_{\text{GaNSb}} + z \cdot (1-y-z) \cdot P_{\text{GaAsSb}}] + x \cdot (1-y-z) \cdot P_{\text{InAsN}} + x \cdot y \cdot z \cdot P_{\text{InNSb}} + x \cdot z \cdot (1-y-z) \cdot P_{\text{InAsSb}}$ $P_2 = (1-x) \cdot [x \cdot y + x \cdot (1-y-z) + x \cdot z + y \cdot (1-y-z) + y \cdot z + z \cdot (1-y-z)] + (1-y-z) \cdot x \cdot y + x \cdot y \cdot z + (1-y-z) \cdot x \cdot z$
$E_N = a_{E_n}(1-x) + b_{E_n}x - c_{E_n}x(1-x)$ $V_N = a_v(1-x) + b_vx - c_vx(1-x)$	$E_N = 1.65 - 0.2z$ $V_N = (2.7 - 0.7x + z) \sqrt{y}$
<p><math>a_{EN}</math>, <math>b_{EN}</math>, <math>c_{EN}</math>, <math>a_v</math>, <math>b_v</math>, <math>c_v</math> sont des paramètres empiriques extraits (Fités) à partir des résultats expérimentaux. Et ont pour valeurs respectives : 1.65, 1.44, 0.38, 2.55, 2, 3.5 eV. Comme ces dernières ne sont pas disponibles pour tous les alliages on est donc amené à proposer un modèle avec un nombre limité de paramètres et qui donne des résultats acceptables.</p>	<p>Les expressions d'<math>E_N</math> et <math>V_N</math> présentées par Bakir donnent des valeurs loin de la théorie. Et comme on a la même structure quinaire, donc on a remplacé ces deux paramètres par ceux de Aissat [90]. Ceci donne des résultats plus fiables et en corrélation avec les datas expérimentaux.</p>

Les résultats expérimentaux et de simulation de Aho et al. [89] et Bakir et al. [94] obtenus dans le cadre du BAC modèle, les résultats de simulation de Aissat et al. [90], ainsi que nos travaux obtenus dans le cadre du DBAC modèle sont présentés dans le tableau (3.3) :

Tableau 3. 3 Les valeurs expérimentales [89] et numériques de nos simulations

In	N	Sb	PL	Aho	Aho*	Bakir	Bakir*	Aissat	Notre
0.0690	0.0385	0.0080	1.013	0.992	0.9903	0.8853	0.9291	0.9926	1.0058
0.1070	0.0358	0.0070	1.013	0.988	0.9853	0.8733	0.9085	0.9608	0.9777
0.0340	0.0310	0.0520	1.008	1.010	1.0111	0.9042	0.9575	1.0118	1.0608
0.0360	0.0302	0.0480	1.008	1.020	1.0203	0.9268	0.9667	1.0127	1.0684
0.1000	0.0283	0.0000	1.007	1.036	1.0332	0.9494	0.9785	1.0214	1.0294
0.1100	0.0387	0.0050	1.007	0.972	0.9692	0.8527	0.889	1.0066	0.9605
0.0600	0.0431	0.0130	0.995	0.969	0.9669	0.8518	0.9019	0.9678	0.9844
0.1080	0.0405	0.0000	0.989	0.965	0.9623	0.8498	0.8863	0.9625	0.9911
0.1050	0.0415	0.0140	0.988	0.958	0.9546	0.8227	0.8638	0.9826	0.9840
0.0673	0.0392	0.0147	0.987	0.986	0.9841	0.8709	0.9171	0.9825	0.9963
0.1040	0.0410	0.0120	0.987	0.962	0.9584	0.8303	0.8708	0.9879	0.9874
0.0693	0.0432	0.0113	0.984	0.965	0.9634	0.8459	0.8939	0.9625	0.9754
0.1110	0.0422	0.0140	0.983	0.952	0.9482	0.8126	0.8532	0.9768	0.9791
0.0713	0.0445	0.0087	0.976	0.959	0.9546	0.8393	0.8871	0.9569	0.9653
0.1130	0.0426	0.0160	0.965	0.948	0.9444	0.8048	0.8460	0.9718	0.9763
0.1120	0.0356	0.0190	0.960	0.982	0.9786	0.8510	0.8879	1.0086	0.9692
0.1100	0.0385	0.0160	0.955	0.970	0.9662	0.8364	0.8751	0.9957	0.9572
0.0700	0.0465	0.0053	0.953	0.951	0.9485	0.8321	0.8807	0.9509	0.9524
0.1110	0.0430	0.0180	0.950	0.946	0.9425	0.8006	0.8428	0.9681	0.9330
0.1040	0.0435	0.0160	0.943	0.948	0.9443	0.8064	0.8496	0.9314	0.9382
0.1120	0.0407	0.0160	0.936	0.958	0.9541	0.8190	0.8589	0.9189	0.9441
0.0840	0.0428	0.0700	0.917	0.915	0.9155	0.7430	0.8016	0.9247	0.9390
0.0540	0.0504	0.0440	0.909	0.907	0.9074	0.7571	0.8213	0.9009	0.9270
0.1280	0.0471	0.0140	0.904	0.921	0.917	0.7647	0.8060	0.8727	0.8990
0.1000	0.0437	0.0553	0.898	0.920	0.9188	0.7460	0.7993	0.8740	0.9252
0.1410	0.0490	0.0000	0.880	0.913	0.906	0.7639	0.8006	0.8663	0.8837
0.1168	0.0559	0.0188	0.864	0.885	0.8813	0.7100	0.7599	0.8575	0.8690
0.1260	0.0536	0.0480	0.844	0.873	0.8703	0.6704	0.7250	0.8774	0.8439
0.1690	0.0570	0.0000	0.820	0.868	0.8606	0.6906	0.7278	0.8041	0.8238
0.1020	0.0515	0.0760	0.813	0.865	0.8646	0.6600	0.7240	0.8121	0.8541

Les résultats expérimentaux, les calculs faites dans le cadre de BAC modèle ainsi que dans le DBAC sont illustrés dans la figure (3.7) :

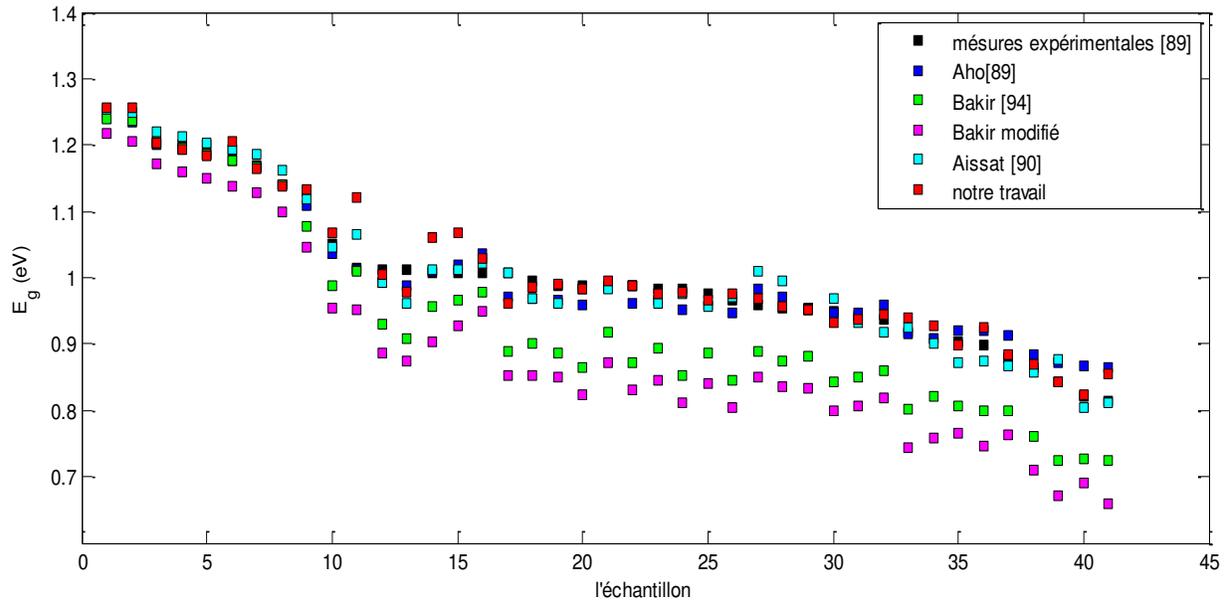


Figure 3. 7: Les datas expérimentaux [89] et les résultats de simulation dans le cadre de modèles BAC et DBAC.

La figure (3.7) présente l'énergie de la bande interdite pour 41 échantillons tous sont à la base de même alliage  $In_xGa_{1-x}As_{1-y-z}Sb_yN_z$  avec une différence des concentrations des éléments In, Sb et N. La forme de la courbe dépend de ces dernières. On constate que tous les modèles suivent bien les valeurs expérimentales. Ces résultats sont plus ou moins fiables, tel que les résultats de Bakir montrent un grand décalage (les carrés roses). Ce décalage devient moins important si on utilise les paramètres  $E_N$  et  $V_N$  de Aissat [90] (les carrés verts), mais ces valeurs restent toujours loin. Dans la même figure, les carrés bleus illustrent les résultats de simulation de Aho, même dans le cadre de BAC modèle, présentent un bon accord avec les datas expérimentales cela est due aux faites que les paramètres empiriques sont extraits directement à partir de ces mesures

expérimentales. Les résultats obtenus dans le cadre de DBAC modèle (carrées bleu ciel pour Aissat et rouges pour notre travail) présentent les meilleurs résultats.

Même si nos calculs et les calculs de Aissat et al. [90] sont très proches des résultats expérimentaux comme illustre la figure (3.8) nos résultats amènent une amélioration due au fait que :

Pour Aissat, le calcul de l'énergie de la bande interdite est fait dans le cas de l'absence simultanée de (N) et (Sb). Alors que (N) n'agit que sur la bande de conduction et (Sb) sur la bande de valence uniquement.

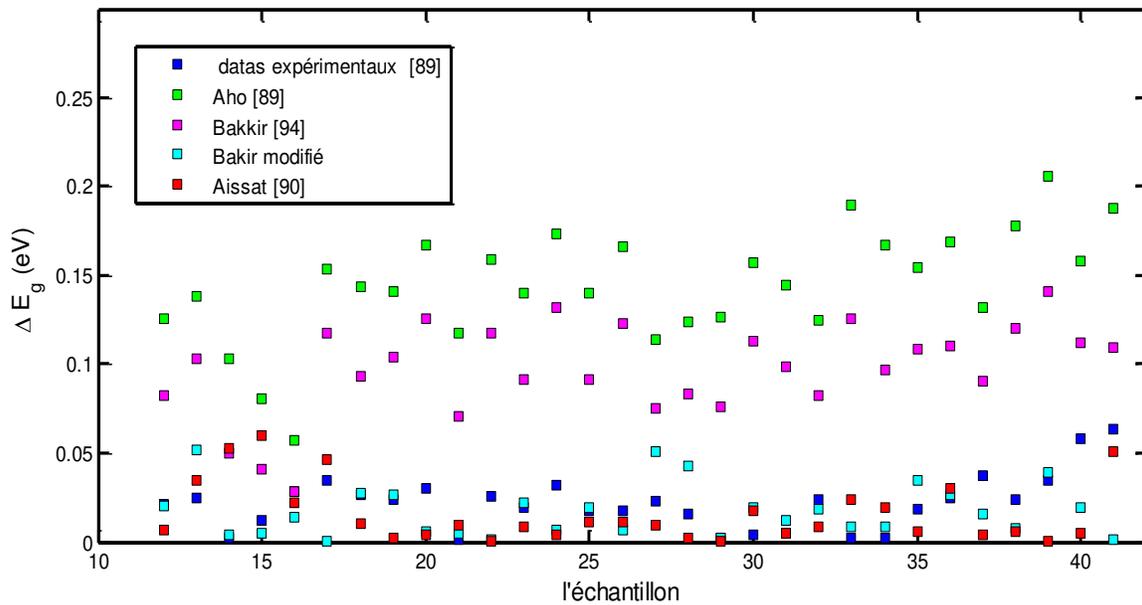


Figure 3. 8: Le décalage de résultats de simulation par rapport aux datas expérimentaux [89]

1.8 Les diagrammes d'énergie selon les modèles BAC, VBAC, DBAC :

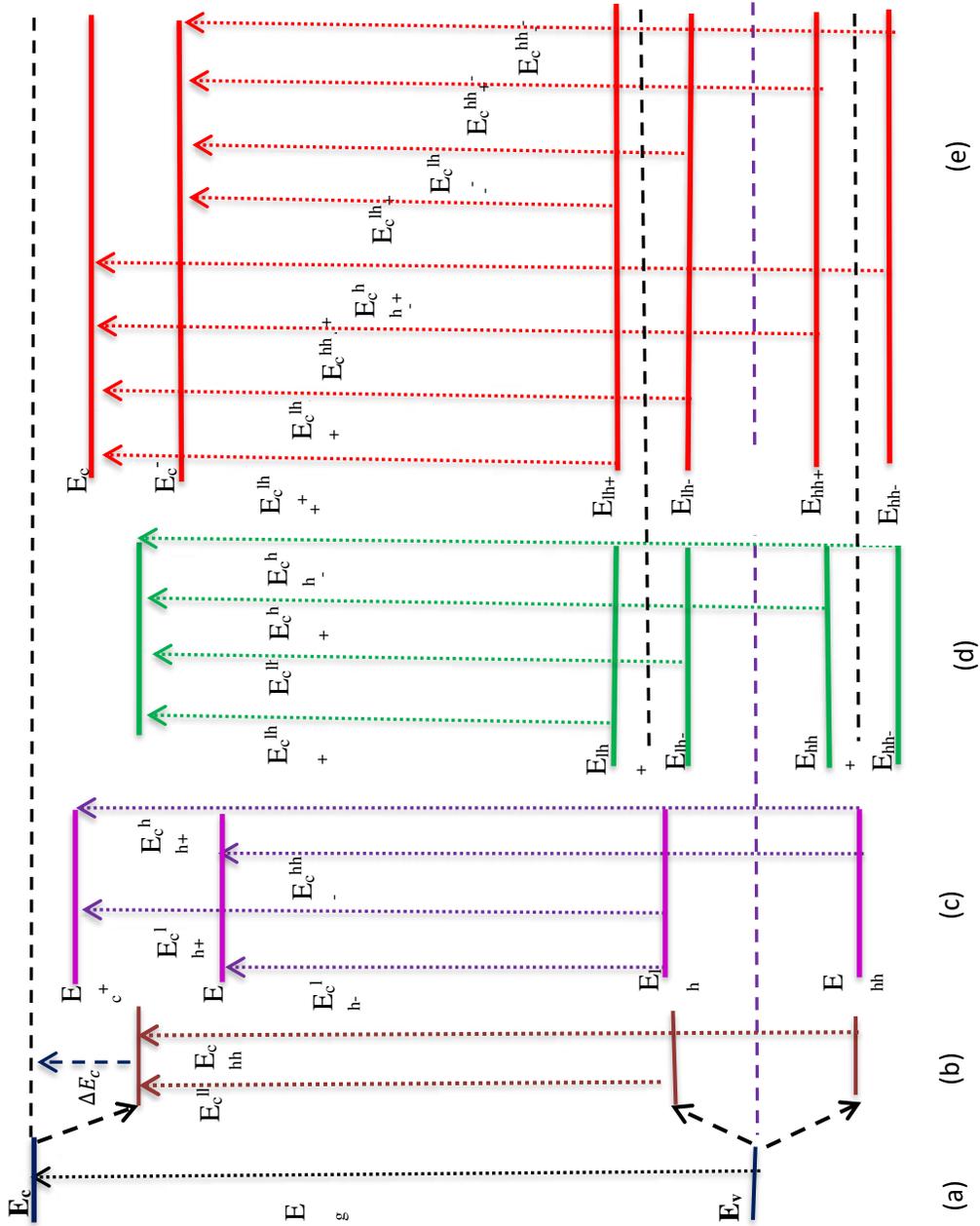


Figure 3. 9: Diagramme d'énergie selon différents modèles sous différents effets

La figure (3.9) illustre les diagrammes d'énergie pour différents modèles et sous différents effets. Le diagramme (a) présente une structure sous aucun effet avec une bande de valence et une bande de conduction.

Le diagramme (b) représente une structure sous l'effet de la contrainte (tension dans ce cas) où la bande de conduction baisse avec un décalage énergétique de  $\Delta E_c$ , et une lèvé de la dégénérescence de la bande de valence qui donne une bande de trous légers au dessus de la bande des trous lourds (contrainte en tension). Il en découle deux transitions énergétiques pour la bande interdite  $E_c^{hh}$  et  $E_c^{lh}$ .

Le diagramme (c) représente une structure sous l'effet de la contrainte et l'effet de N tel que ce dernier induit un éclatement de la bande de conduction en deux sous bandes  $E_c^-$  et  $E_c^+$  (le modèle BAC). L'effet de la contrainte implique la lèvé de la dégénérescence de la bande de valence, et on obtient quatre transitions énergétiques pour la bande interdite :  $E_c^{hh+}$ ,  $E_c^{lh+}$ ,  $E_c^{hh-}$ ,  $E_c^{lh-}$ .

Le diagramme (d) présente une structure sous l'effet toujours de la contrainte en plus de l'effet de Sb (Bi), ceci entraîne un éclatement de la bande de valence (le modèle VBAC) et comme on a déjà une lèvé de la dégénérescence donc on obtient quatre sous bandes pour la bande de valence :  $E^{hh+}$ ,  $E^{hh-}$ ,  $E^{lh+}$ ,  $E^{lh-}$  et par conséquent on obtient aussi quatre transitions énergétiques pour la bande interdite :  $E_c^{hh+}$ ,  $E_c^{hh-}$ ,  $E_c^{lh+}$ ,  $E_c^{lh-}$ .

Le diagramme d'énergie (e) présente une structure sous l'effet de la contrainte, de l'effet de N et de l'effet de Sb (Bi), la contrainte induit le décalage énergétique de la bande de conduction  $\Delta E_c$  et la lèvé de la dégénérescence. N provoque l'éclatement de la bande de conduction et Sb (Bi) entraîne l'éclatement de la bande de valence. Les trois effets combinés donnent huit transitions énergétiques  $E_c^{hh+}$ ,  $E_c^{hh-}$ ,  $E_c^{lh+}$ ,  $E_c^{lh-}$ ,  $E_c^{hh+}$ ,  $E_c^{hh-}$ ,  $E_c^{lh+}$ ,  $E_c^{lh-}$ , c'est le modèle DBAC.

En effet pour l'application de modèle BAC, VBAC ou DBAC on doit utiliser la loi de Vegard détaillée dans la section suivante :

### 1.9 L'interpolation linéaire

Parmi les lois de l'interpolation linéaires, on trouve la loi de Vegard [91] qui combine entre les différents paramètres des semiconducteurs binaires parents qui constituent les différents alliages plus complexes et leurs substitutions. Elle décrit avec une grande précision plusieurs paramètres

tels que le paramètre de maille de l'alliage. Considérant P le paramètre à déterminer pour le ternaire  $A_xB_{1-x}C$  où A. B. C sont des éléments chimiques appartenant au tableau de Mendeleïev et forment les binaires (AC) et (BC) tel que A et B appartiennent à la même colonne avec la substitution (x) pour A donc (1-x) pour B car la sommation des deux substitutions doit être égale à 1 contre un autre 1 pour C et la relation de Végard est donnée sous la forme:

$$P_{A_xB_{(1-x)}C}(x) = xP_{AC} + (1 - x)P_{BC} \quad (\text{III-60})$$

Pour certains paramètres, cette relation (supposée linéaire) présente des écarts par rapport aux résultats expérimentaux tel que le calcul de l'énergie de gap, d'où la nécessité d'introduire un terme correctif. Considérant Q le paramètre à déterminer pour le même ternaire ABC et qui présente un écart par rapport à l'interpolation linéaire. Q sera donné par la relation suivante :

$$Q_{A_xB_{(1-x)}C}(x) = xQ_{AC} + (1 - x)Q_{BC} - Cx(1 - x) \quad (\text{III-61})$$

Où (C) est défini comme étant le paramètre de Bowing. Ce paramètre est généralement positif, pour les semiconducteurs III – V. c'est-à-dire que le paramètre à déterminer pour l'alliage est plus petite que le résultat d'interpolation linéaire [92]. Il est évidant que pour les hétéro-structures les plus complexes tels que les quaternaires, les méthodes de l'élaboration ainsi que la modélisation sont devenues difficiles, mais la procédure d'interpolation introduite par Glisson et al. [93] basée sur l'équation (III-60) donne une approximation en accord avec les valeurs expérimentales. Cette procédure est applicable aux quaternaires les plus couramment rencontrés de la forme  $A_xB_{(1-x)}C_yD_{(1-y)}$  c'est-à-dire que si A et B appartiennent à la première colonne, les substitutions sont respectivement (x), (1-x) et pour les éléments de la deuxième colonne C et D les substitutions sont respectivement (y), (1-y). L'équation (III-60) devient [94] :

$$G_{ABCD}(x, y) = \frac{x(1-x)[(1-y)P_{ABD}(x)+yP_{ABC}(x)]+y(1-y)[xP_{ACD}(y)+(1-x)P_{BCD}(y)]}{x(1-x)+y(1-y)} \quad (\text{III-62})$$

Cette approche peut être étendue aux quaternaires de la forme  $AB_{(1-x-y)}C_xD_y$  tel que

$$F_{ABCD}(x, y) = \frac{xyP_{ABD}(u)+y(1-x-y)P_{BCD}(v)+(1-x-y)xP_{ACD}(w)}{xy+y(1-x-y)+(1-x-y)x} \quad (\text{III-63})$$

Pour les hétérostructures quinaires  $A_xB_{(1-x)}C_yE_zD_{(1-y-z)}$  on peut généraliser l'équation (III-60) tel que [94]:

$$T_{ABCDE} = \frac{\sum C_{ijk} P_{ijk}}{\sum C_{ijk}} \quad (\text{III-64})$$

$C_{ijk}$  sont les substitutions pour les ternaires.

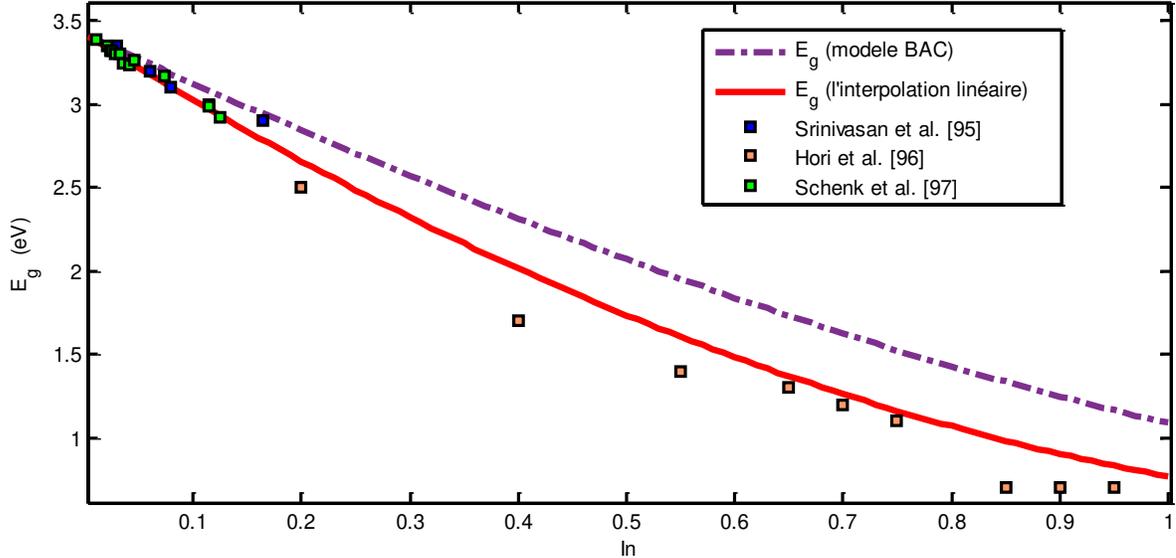


Figure 3. 10: La bande interdite de la structure InGaN en fonction de la concentration de l'In

Dans la mise en œuvre de la méthode de l'interpolation linéaire la figure (3.10) montre la variation de l'énergie de la bande interdite de InGaN en fonction de l'In. On remarque que l'énergie de la bande interdite diminue avec l'In dans le cas de l'application du modèle BAC, ou de la méthode de l'interpolation linéaire. Aussi, l'interpolation linéaire est en meilleur accord avec les résultats expérimentaux publiés dans la littérature [95, 96, 97]. Cela peut être justifié car on a une concentration fixe de N ce qui ne favorise pas l'utilisation du modèle BAC qui est basé sur la variation de la concentration de N.

En revanche, la figure (3.11) illustre la variation de la bande interdite de l'alliage GaAsN en fonction de la variation de la concentration de N. Ici, l'énergie de gap de la structure GaAsN diminue avec N et les résultats expérimentaux de Beaudoin et al. [82] sont plus en corrélation avec

les résultats obtenus par l'application du modèle BAC que ceux obtenus par l'application de l'interpolation linéaire (car la concentration de N varie).

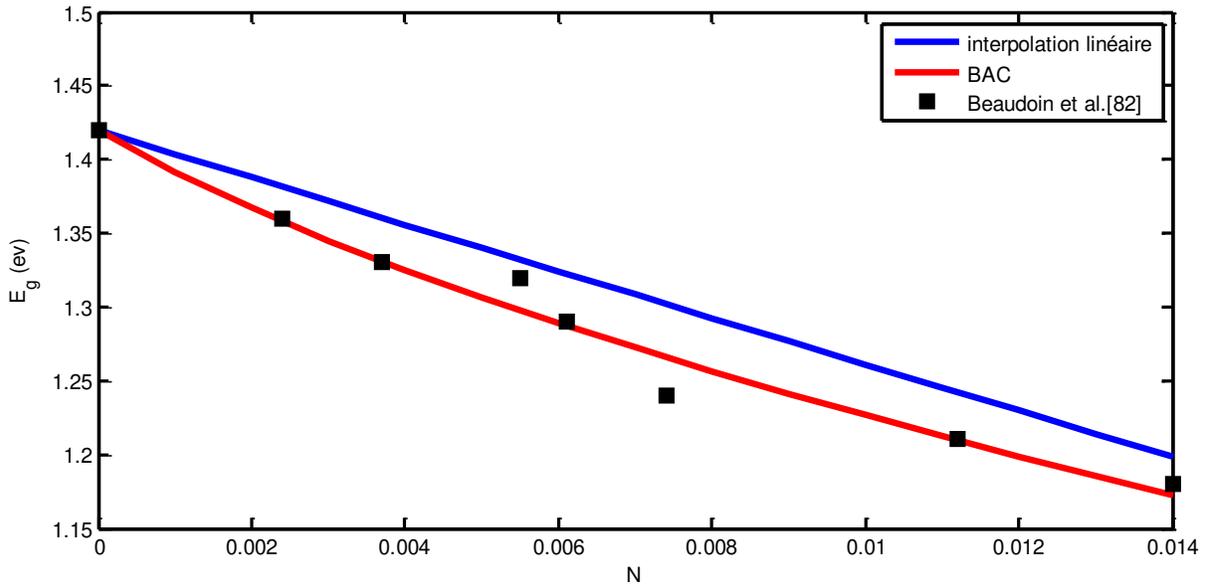


Figure 3. 11: La bande interdite de la structure GaAsN en fonction de la concentration de N

### 1.10 La notion de l'épaisseur critique

Lors de l'épitaxie des couches sous contraintes, ces dernières commencent à se relaxer. Et génèrent alors des dislocations qui se propagent de l'interface de contact vers la couche épitaxiale, ceci s'accompagne d'une accumulation d'énergie élastique jusqu'à une certaine épaisseur limite où l'énergie élastique emmagasinée devient suffisante pour générer des défauts structuraux qui relaxent partiellement les contraintes dans le cristal. Le matériau tend alors à reprendre son paramètre de maille, et des dislocations apparaissent à l'interface (relaxation plastique) comme illustre la figure (3.12). Cette épaisseur limite est appelée épaisseur critique. Plusieurs auteurs ont proposé des modèles permettant le calcul de cette épaisseur critique, en particulier, Matthews et Blakeslee [98] ont élaboré un modèle basé sur l'équilibre des forces à l'interface de croissance et donne la relation suivante pour l'épaisseur critique :

$$h_c = \frac{a_e}{\beta\sqrt{2}\pi\varepsilon} * \frac{1-0.25\gamma}{1+\gamma} * \ln\left(\frac{h_c\sqrt{2}}{a_c} + 1\right) \quad (\text{III-65})$$

$\varepsilon$  : est le désaccord paramétrique représentant la contrainte totale.

$\gamma$  : est le coefficient de poisson donné par la relation suivante :  $\frac{c_{12}}{c_{11}+c_{12}}$  (III-66)

Où  $C_{11}$  et  $C_{12}$  sont les constantes élastiques des binaires composant les structures.

$\beta$  : est un coefficient empirique prend des valeurs suivantes selon le type de la structure : 1 pour un super réseau, 2 pour un puits quantique et 4 pour une couche unique.

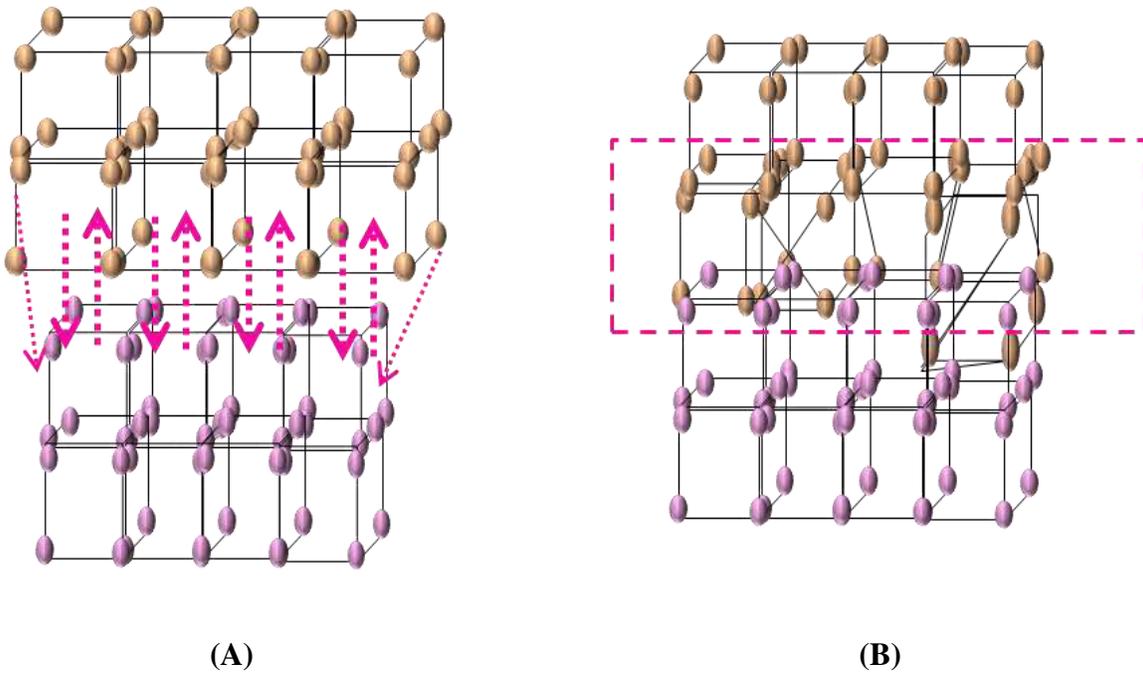


Figure 3. 12: Illustrations d'une couche A) sous contrainte B) relaxée

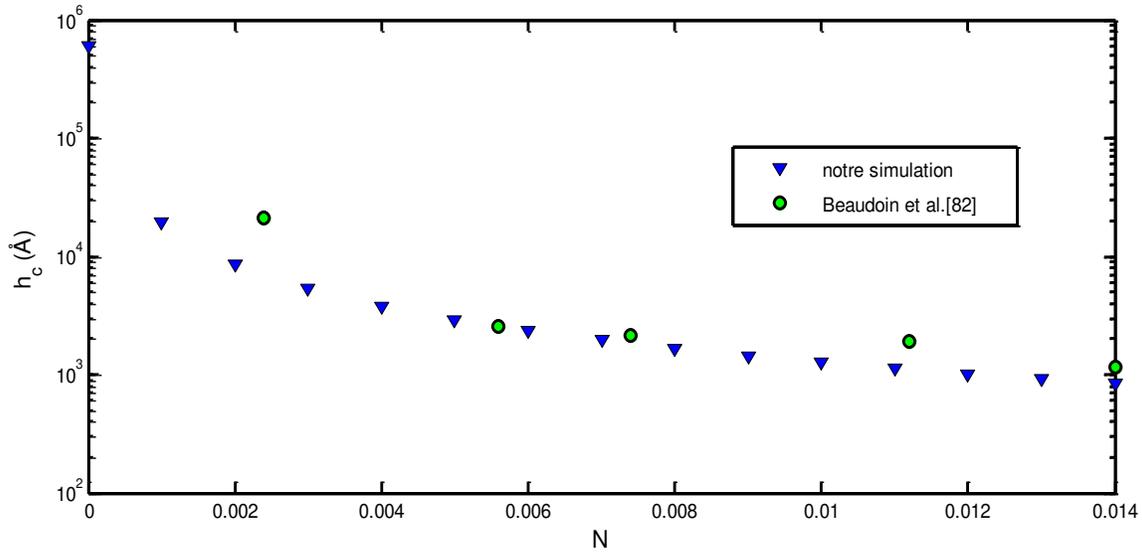


Figure 3. 13: Épaisseur critique en fonction de la concentration de N pour l’alliage GaAs<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub>

La figure (3.13) illustre la variation de l’épaisseur critique en fonction de la concentration de (N) pour l’alliage GaAs<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub> selon le modèle de Matthews et Blakeslee [98]. Elle montre que l’épaisseur critique diminuée d’une façon « dramatique » avec (N) et les résultats sont en accord avec les datas expérimentaux publiés par Beaudoin et al. [82]. Ceci valide cette simulation et permet d’utiliser cette méthode de calcul avec les paramètres qu’on a choisi pour d’autres simulations tels que l’épaisseur critique pour la structure Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As<sub>1-y</sub>N<sub>y</sub>.

### 1.11 L’effet de la température sur l’énergie de la bande interdite

Puisque on a plusieurs domaines d’application des cellules photovoltaïques tels que les applications terrestres à une température ambiante (autour de 300 K) ou des applications spatiales à une température plus élevée ou plus basse, il est indispensable d’étudier l’effet de la température sur les propriétés structurales particulièrement sur la bande interdite pour les alliages utilisés. En effet les énergies de la bande interdite des matériaux semiconducteurs sont directement dépendantes de la température selon la formule de Varshni [99] :

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{T + \beta} \quad (\text{III-67})$$

Avec :  $E_g(0)$  l'énergie de gap pour  $T=0$  K.

$\alpha$  une constante empirique [ $\text{eV}\cdot\text{K}^{-1}$ ].

$\beta$  une constante associée à la température de Debye [K].

Tableau 3. 4: Les constantes empiriques utilisées pour le calcul de la bande interdite en fonction de la température pour les structures à base de l'alliage AlGaAs [92]

	$E_g(0)$ (eV)	$\alpha$ [ $\text{eV}\cdot\text{K}^{-1}$ ]	$\beta$ [K]
GaAs	1.519	$5.405\text{e-}4$	204
AlAs	3.099	$0.885\text{e-}3$	530

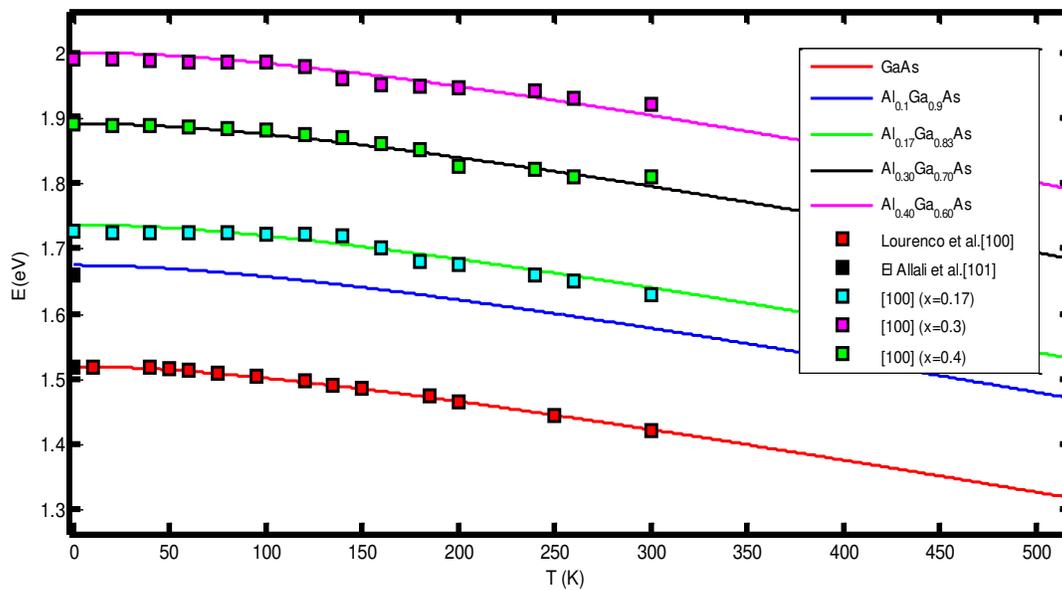


Figure 3. 14: Energie de la bande interdite en fonction de la température pour différentes structures GaAs,  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  ( $x=0.1, 0.17, 0.3, 0.4$ )

La figure (3.14) qui illustre la variation de l'énergie de la bande interdite en fonction de la température pour les structures GaAs, Al<sub>x</sub>Ga<sub>(1-x)</sub>As (x=0.1, 0.17, 0.3, 0.4), montre que l'énergie de la bande interdite pour chaque structure décroît avec la température d'une façon modérée où on remarque une baisse respectivement de 0.449 eV, 0.2891 eV et 0.3862 eV pour une gamme de température variant de 0 K à 700 K. Cette baisse est justifiée par l'agitation thermique des électrons qui augmente avec la température ce qui favorise leur déplacement vers la bande de conduction avec moins d'énergie. Les résultats obtenus sont validés par les travaux de Lourenco et al. [100], ainsi que les travaux de El Allali et al. [101].

### 1.12 L'effet de la pression sur l'énergie de gap

Tout comme la température, la diversité des domaines d'application des cellules photovoltaïques implique l'étude de la variation de la pression sur la bande interdite. Cette variation est donnée par l'équation suivante [102] :

$$E_i(P) = E_i(0) + aP + bP^2 \quad (\text{III-68})$$

$E_i(P)$  et  $E_i(0)$  représentent respectivement les bandes interdites à une pression  $P$  et à une pression nulle.  $a$  et  $b$  sont respectivement les coefficients linéaire et quadratique de la pression illustrés dans le tableau (3.5).

Tableau 3. 5 : les constantes empiriques utilisées pour le calcul de la bande interdite en fonction de la pression [103]

	$E_i(0)$ (eV)	$a$ (eV/GPa)	$b$ (eV/GPa <sup>2</sup> )
Al <sub>0.2</sub> Ga <sub>0.8</sub> N	3.88	40.5 e <sup>-3</sup>	Négligeable
Al <sub>0.4</sub> Ga <sub>0.6</sub> N	4.22	41.2 e <sup>-3</sup>	Négligeable
Al <sub>0.6</sub> Ga <sub>0.4</sub> N	4.72	41.5 e <sup>-3</sup>	Négligeable

Afin de retrouver ces résultats nous avons adopté la méthode de l'interpolation linéaire pour la structure ternaire  $Al_xGa_{1-x}N$  en combinant les résultats de la résolution de l'équation (III-68) appliqué aux structures binaires parents (AlN et GaN). Les résultats obtenus pour les coefficients linéaires et quadratiques sont en très bonne corrélation avec ceux du shan [103]. Et sont présentés dans le tableau ci-dessous :

	$E_i(0)$ (eV)	a (eV/GPa)	b (eV/GPa <sup>2</sup> )
AlN	5.95	$42 e^{-3}$	$-0.34 e^{-3}$
GaN	3.6	$41.7 e^{-3}$	$-0.38 e^{-5}$

En appliquant la méthode de l'interpolation linéaire entre les deux binaires parents on obtient les paramètres linéaire et quadratique des structures à base de l'alliage ternaire  $Al_xGa_{(1-x)}N$ . Le tableau suivant résume ces résultats :

Structure	Les valeurs des paramètres de shan et al. [103]		Nos calculs	
	a (eV/GPa)	b (eV/GPa <sup>2</sup> )	a (eV/GPa)	b (eV/GPa <sup>2</sup> )
$Al_{0.2}Ga_{0.8}N$	$40.5 e^{-3}$	Négligeable	$41.76 e^{-3}$	$0.071 e^{-3}$
$Al_{0.4}Ga_{0.6}N$	$41.2 e^{-3}$	Négligeable	$41,82 e^{-3}$	$0.138 e^{-3}$
$Al_{0.6}Ga_{0.4}N$	$41.5 e^{-3}$	Négligeable	$41,88 e^{-3}$	$0.205 e^{-3}$

La figure (3.15) montre que l'énergie de la bande interdite calculée pour les trois structures par soit les données de ternaires (les courbes noires), soit l'interpolation linéaire (courbes bleues)

augmente d'une façon linéaire avec la pression ce qui est en bon accord avec les données expérimentales de Shan et al. [103] (les carrés rouges).

Le très bon accord de notre méthode de calcul (courbes bleues) avec les données expérimentales de Shan et al. [103] (les recarrées rouges) permet d'appliquer l'interpolation linéaire entre les structures binaires parents pour n'importe quels autres alliages y compris notre composé d'intérêt «  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_1\text{yN}_y$  » sans passer par la détermination à chaque fois des coefficients linéaires et quadratiques des structures plus complexes (ternaires, quaternaires...).

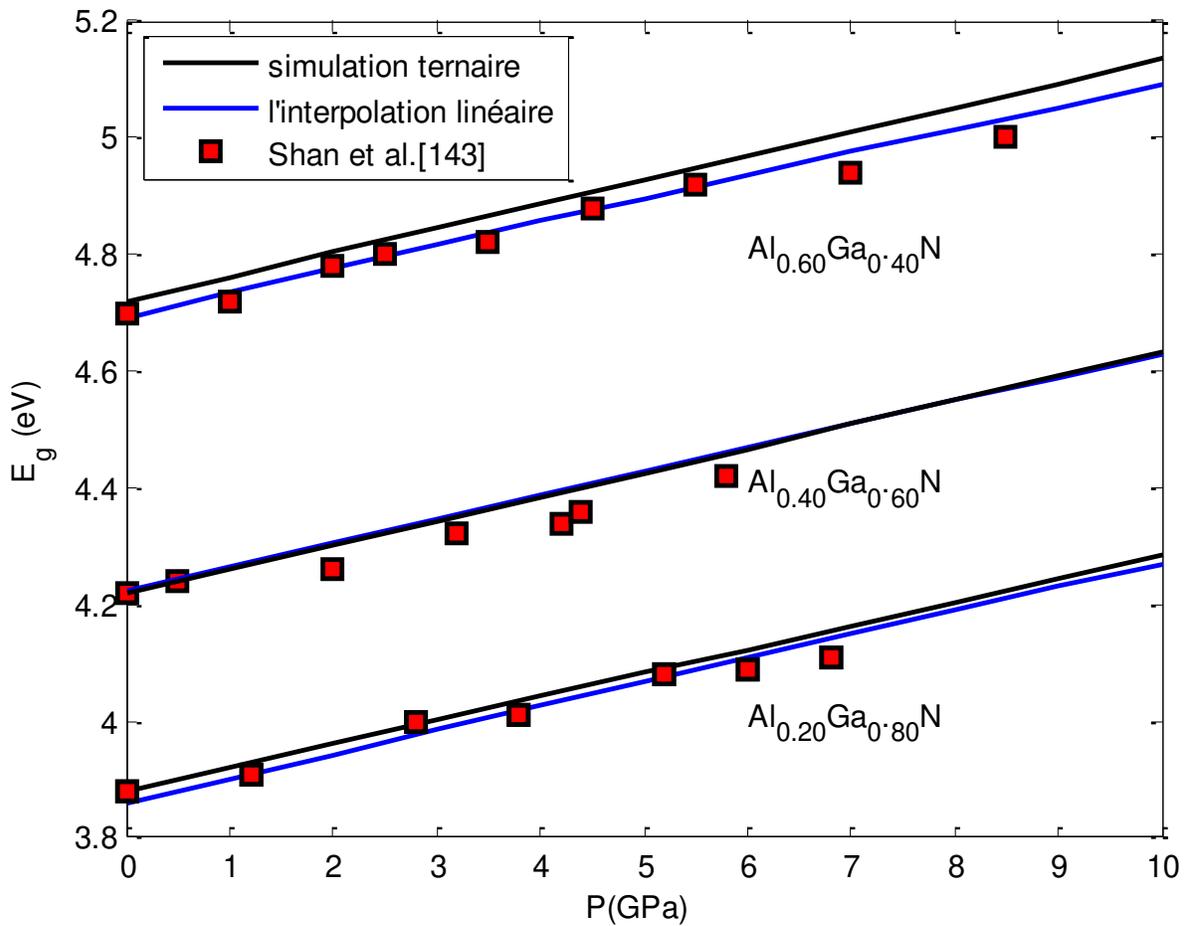


Figure 3. 15: Energie de la bande interdite en fonction de la pression

## 2. La modélisation du coefficient d'absorption pour les semiconducteurs III-V

Le coefficient d'absorption détermine la distance parcourue par la lumière dans une matière avant d'être absorbée, c'est la propriété la plus importante pour déterminer les matériaux actifs pour les cellules PV. Plusieurs modèles théoriques sont proposés pour calculer ce coefficient d'absorption tels que le modèle de Rakhshani [104], le modèle du point critique standard, le modèle de l'approximation de l'oscillateur harmonique (HOA) et le modèle de la fonction diélectrique [105]. Parmi ces différents modèles on a étudié, dans un premier temps, l'indice de réfraction  $n(\lambda)$  et le coefficient d'extinction  $k(\lambda)$  en utilisant le modèle de Tauc-Lorentz [106] qui calcule les fonctions diélectriques des matériaux puis à l'aide de l'interpolation linéaire on a calculé le coefficient d'absorption  $\alpha(\lambda)$  tel que

$$\alpha(\lambda) = \frac{4\pi k(\lambda)}{\lambda} \quad (\text{III-69})$$

En variant  $\lambda$  [107], le coefficient d'absorption est représenté pour différentes structures binaires dans la figure (3.16) :

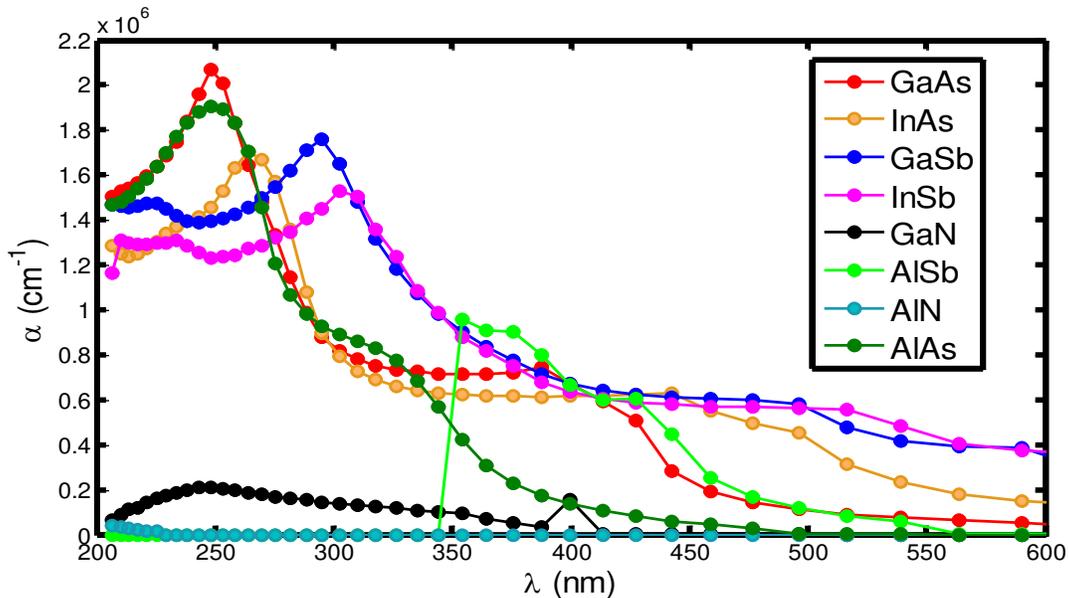


Figure 3. 16: Coefficients d'absorption  $\alpha$  en fonction de la longueur d'onde  $\lambda$  pour des différentes structures binaires

Dans la figure (3.16) on constate que les coefficients d'absorption  $\alpha(\lambda)$  pour les alliages GaAs, AlAs et InAs présentent une absorption maximale pour respectivement des faibles longueurs d'onde ( $\lambda$ ) 248, 248 et 263.8 nm. Ces trois binaires ont un point en commun, la présence de (As). Leur domaine d'absorption est l'ultraviolet lointain tant disque les binaires qui contiennent du (Sb): le GaSb, l'InSb et l'AlSb présentent une absorption maximale pour respectivement les longueurs d'onde : 295.2, 309.9 et 354.2 nm. Leur domaine d'absorption est l'ultraviolet moyen. Et pour les binaires qui contiennent de (N) présentent des faibles absorptions dans le domaine visible. En effet, la référence [107] donne les valeurs de l'indice de réfraction  $n(\lambda)$  et le coefficient d'extinction  $k(\lambda)$  pour les structures binaires, ternaires et même quaternaires. À fin de valider la méthode de l'interpolation linéaire, nous avons calculé le coefficient d'absorption pour notre structure ternaire ( $\text{Al}_{10}\text{Ga}_{90}\text{As}$ ) à partir des structures binaires parents (AlAs et GaAs). Les résultats de cette simulation sont illustrés sur la figure (3.17) :

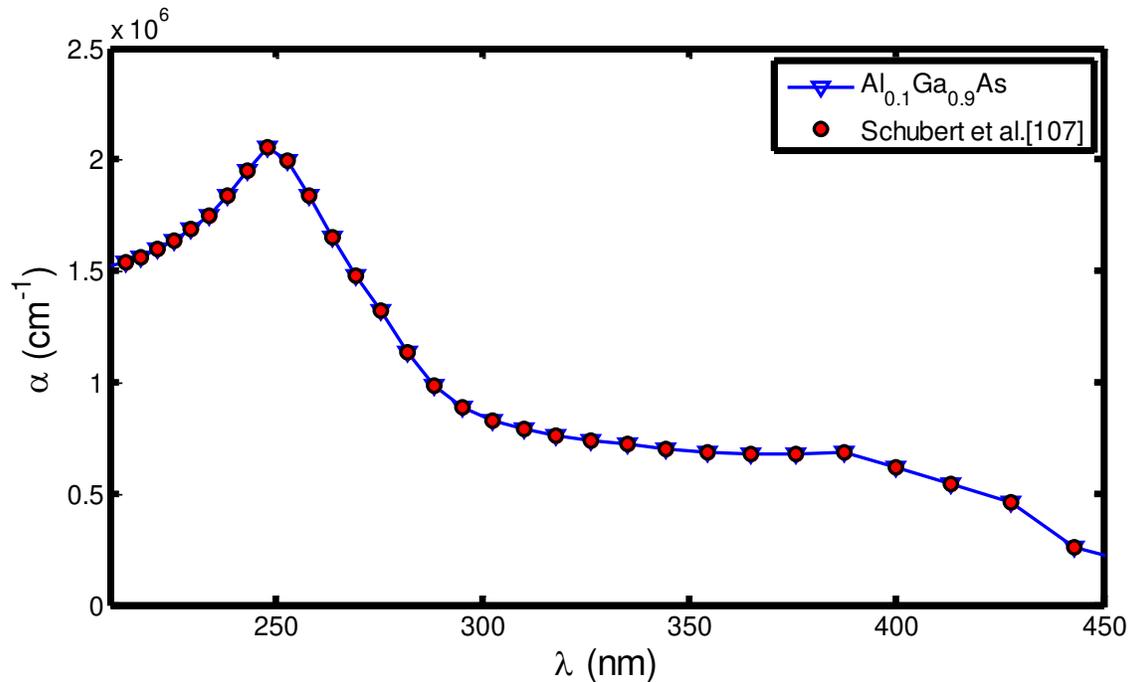


Figure 3. 17: : Coefficients d'absorption  $\alpha$  en fonction de la longueur d'onde  $\lambda$  pour la structure ternaire  $\text{Al}_{10}\text{Ga}_{90}\text{As}$

Dans la figure (3.17), le coefficient d'absorption de la structure  $\text{Al}_{10}\text{Ga}_{90}\text{As}$  varie en fonction de  $(\lambda)$ . On constate que l'on a une absorption maximale pour une longueur d'onde autour de 250 nm. Les deux courbes sont en très bon accord ce qui valide l'application de l'interpolation linéaire pour les  $\alpha(\lambda)$  des structures binaires et à la fin, pour obtenir ceux des composés ternaires. On a refait la même simulation pour la structure quaternaire  $\text{GaInP}_{76}\text{As}_{24}$ . Les résultats de cette simulation obtenus à partir de l'application de l'interpolation linéaire aux structures binaires parents (GaAs, GaP, InP, InAs) montrent que  $\alpha(\lambda)$  présente une absorption maximale autour de  $\lambda$  égale à 248 nm (Figure 3.18).

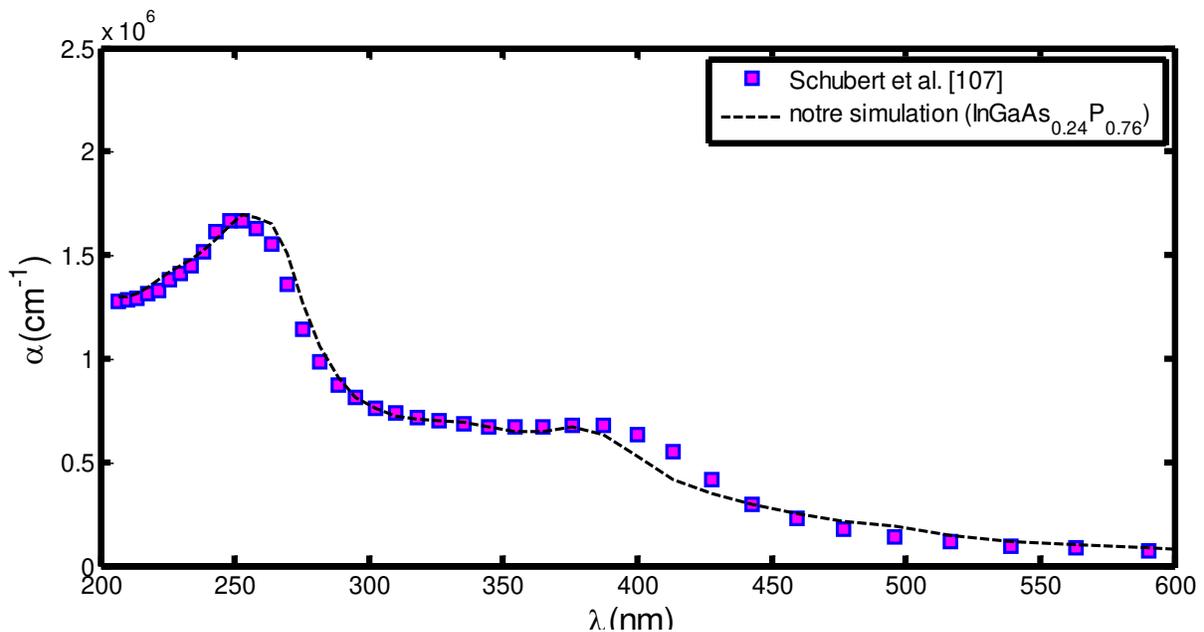


Figure 3. 18: : Coefficients d'absorption  $\alpha$  en fonction de la longueur d'onde  $\lambda$  pour la structure quaternaire  $\text{GaInP}_{76}\text{As}_{24}$

Malgré la validation de ce modèle pour les différentes structures, il présente quelques limites à cause de la non tenue en compte de l'effet de substrat (la contrainte). Pour ce faire, on a choisi un deuxième modèle qui se base sur le principe que l'absorption ne se fait que lorsque l'énergie de la lumière est supérieure ou égale à celle de la bande interdite. La relation directe entre l'absorption et l'énergie de gap est donnée par la formule suivante [108]:

$$\alpha(E) = \alpha_0 \frac{\sqrt{E-E_g}}{E} \quad (\text{III-70})$$

$\alpha(E)$  coefficient d'absorption de l'alliage en fonction de l'énergie des photons  $E$  [eV]

$E_g$  : l'énergie de la bande interdite [eV]

$\alpha_0$  paramètre d'ajustement [ $\text{eV}^{1/2}/\text{cm}^{-1}$ ] tel que ( $\alpha_0$  pour GaAs =  $5 \times 10^5 \text{ eV}^{1/2}/\text{cm}^{-1}$ ) selon [108].

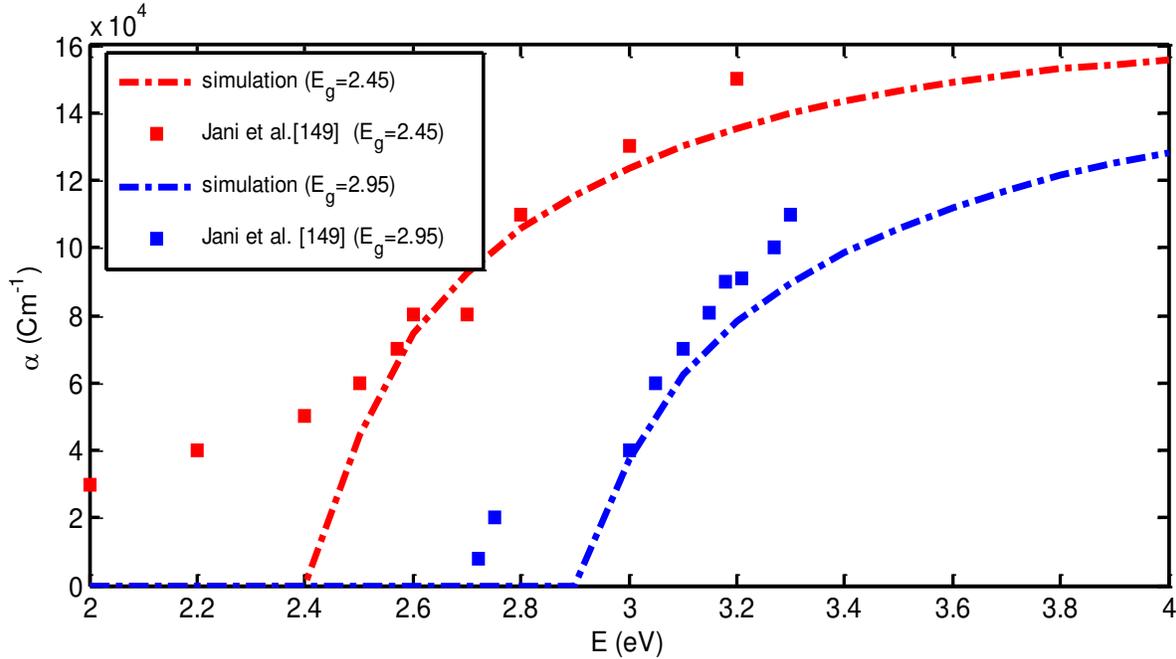


Figure 3. 19: Coefficient d'absorption mesuré et simulé pour les alliages ternaires InGaN à deux énergies de bande interdite 2,95 eV et 2,45 eV en fonction de l'énergie incidente  $E$

La figure (3.19) présente le coefficient d'absorption mesuré par Jani et al. [109] et notre simulé pour les alliages ternaires InGaN à deux énergies de bande interdite 2,95 eV et 2,45 eV en fonction de l'énergie incidente. La courbe de l'absorption obtenue par simulation, pour les deux alliages, ne commence qu'à partir d'une énergie incidente supérieure ou égale à l'énergie de la bande interdite de l'alliage (limite imposée par le modèle) alors que les mesures expérimentales, faites par Jani et al. [109], pour les deux alliages ternaires commence bien avant. Néanmoins, on constate un bon accord dans la région d'intérêt. Ceci valide cette méthode de calcul pour d'autres structures tel que la structure  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$  présentant plusieurs sous-bandes et permet donc des transitions énergétiques entre ces dernières des trous lourds vers la (ou les) sous bandes de

conduction et entre les sous bandes des trous légers vers la (ou les) sous bandes de conduction. Dans ce cas, le coefficient d'absorption total est la somme des coefficients d'absorption dus à ces transitions tel que [110]:

$$\alpha(h\nu) \sim \sum P_{12} g_v(E_1) g_c(E_2) \quad (\text{III-71})$$

Avec :

$E_1$  est le niveau énergétique initial.

$E_2$  est le niveau énergétique final.

$P_{12}$  est la probabilité pour qu'un photon d'énergie  $h\nu$  soit absorbé.

$g_1$  est la densité des électrons dans le niveau énergétique initial.

$g_2$  est la densité des électrons dans le niveau énergétique final.

Vu la complexité d'application de ces calculs pour les coefficients de probabilité pour les différentes sous bande (en cas d'éclatement de la bande de conduction et/ ou la bande de valence), on a appliqué la relation basée sur le principe que le coefficient d'absorption total est la sommation entre les différents coefficients d'absorption entre les sous bandes d'énergie. Chaque un entre ces derniers doit être multiplié par un coefficient défini la probabilité qu'un photon d'énergie  $E$  peut être absorbé et provoque un déplacement de l'électron vers la bande de conduction (ou l'une des sous bandes de cette dernière). En effet l'absorption sera dominée par les transitions directes qui sont beaucoup plus probables que les transitions indirectes ce qui nous permette d'écrire la relation suivante :

$$\alpha(h\nu) \sim \sum_{i=1}^n P_i \alpha_i \quad (\text{III-72})$$

Cependant même ces coefficients de probabilité ne sont pas faciles à calculer. Pour contourner ce problème on suppose qu'on a un cas idéal tel que la probabilité d'absorption, pour n'importe quel rayonnement incident avec une énergie au-delà de l'énergie de la bande interdite (ou l'énergie qui sépare les deux sous bandes), est égale à 1. La relation (III-68) devienne :

$$\alpha(h\nu) \sim \sum_{i=1}^n \alpha_i \quad (\text{III-73})$$

Pour valider notre méthode de calcul on a simulé le coefficient d'absorption total pour le quaternaire  $\text{In}_{0.04}\text{Ga}_{0.96}\text{As}_{0.99}\text{N}_{0.01}$ . La présence de (N) même avec une faible concentration provoque un éclatement de la bande de conduction. Ceci engendre deux sous bande de conduction ( $E_c^-$  et  $E_c^+$ ). La contrainte entre ce matériau et son substrat (GaAs) donne une levée de la dégénérescence entre la bande des trous lourds et les trous légers ( $E_{hh}$  et  $E_{lh}$ ) donc on a quatre transitions énergétiques directes comme énergie de la bande interdite. Le coefficient d'absorption total est donné donc par la relation suivante :

$$\alpha(h\nu) \sim \sum_{i=1}^4 (\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 + \alpha_4) \quad (\text{III-74})$$

Tel que  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4$  représente respectivement les transitions énergétiques  $E_{clh}^+, E_{chh}^+, E_{clh}^-, E_{chh}^-$ .

Les résultats de cette simulation illustrés dans la figure (3.20) montrent qu'on a un accord plus important pour les faibles énergies incidentes avec la même forme que celle publié par Skierbiszewski et al. [83]

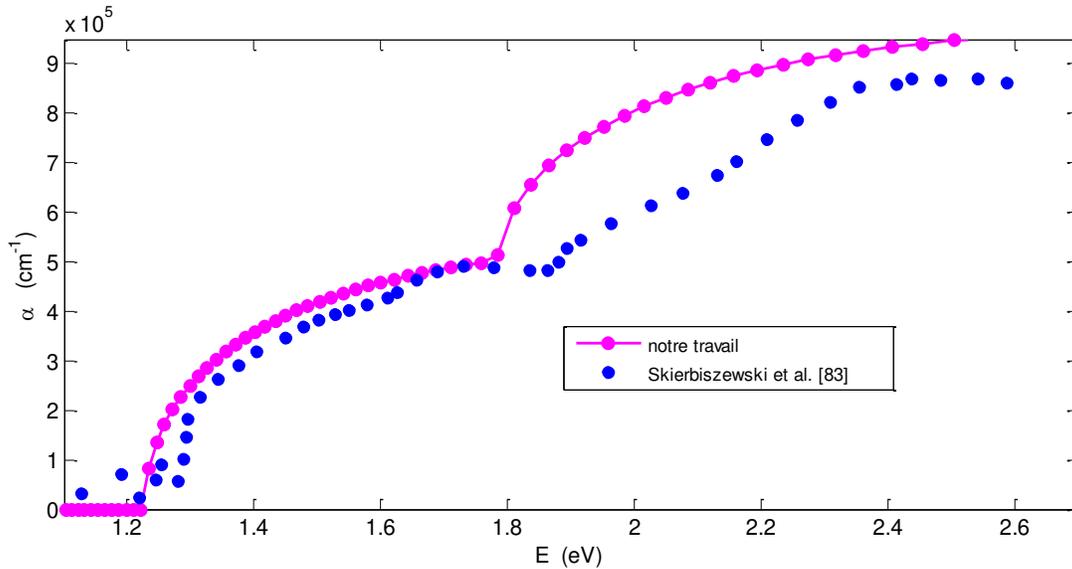


Figure 3. 20: Coefficient d'absorption mesuré et simulé pour l'alliage quaternaire  $\text{In}_{0.04}\text{Ga}_{0.96}\text{As}_{0.99}\text{N}_{0.01}$  en fonction de l'énergie incidente E

### 3. Modélisation du phénomène de transport pour les semiconducteurs III-V

L'étude des propriétés du transport électronique dans les semiconducteurs III-V est indispensable avant toute utilisation du matériau, car elle permet de décrire le mouvement des particules à l'intérieur du cristal en analysant les différents types d'interactions et leurs effets sur la vitesse des électrons. C'est la caractéristique la plus importante pour distinguer entre un semiconducteur rapide ou non et par la suite déterminer ses performances y compris le domaine d'utilisation soit en logique rapide ou en hyperfréquence. La mobilité définie en tant que vitesse de déplacement des porteurs de charges, plusieurs modèles théoriques sont proposés pour décrire cette mobilité tels que les modèles de Klaassen [111], d'Arora et al. [112], de Noor Mohammad [113], de Caughey et Thomas [114] et de MINIMOS 6 [115]. Ce dernier basé sur la formule de Caughey et Thomas en conjonction avec des coefficients dépendants de la température. Pour notre travail on a appliqué ce modèle sur les binaires GaAs, InP semiconducteurs de type III-V et le Si, Ge des semiconducteurs classiques. Les résultats sont illustrés dans la figure (3.21) avec les paramètres suivants :

Tableau 3. 6: les constantes utilisées pour le calcul de mobilité des alliages GaAs, InP, Si, Ge [116]

Paramètre	GaAs		InP		Ge		Si	
	n	P	n	p	n	p	n	P
$\mu_{\vartheta,300}^{min}$	800	40	1120	24	850	300	80	45
$\mu_{\vartheta,300}^L$	8500	470	5300	200	3800	1800	1430	460
$c_{\vartheta,300}^{ref}$	$10^{17}$	$10^{17}$	$4.10^{16}$	$2.5 \times 10^{17}$	$2.6 \times 10^{17}$	$10^{17}$	$1.12 \times 10^{17}$	$2.23 \times 10^{17}$
$\alpha_{\vartheta,300}$	0.5	1	0.6	1	0.56	1	0.72	0.72
$\gamma_{0,\vartheta}$	-2.2	-0.9	-1.9	-1.2	-1.66	- 2.33	-2	-2.18
$\gamma_{1,\vartheta}$	-0.9	-0.9	2	1.2	-	-	-0.45	-0.45
$\gamma_{2,\vartheta}$	-0.9	-0.9	2	1.2	-	-	-0.15	-0.15
$\gamma_{3,\vartheta}$	6.2	0.5	3.7	0.47	-	-	3.2	3.2
$\gamma_{4,\vartheta}$	-	-	-	-	-	-	0.065	0.065

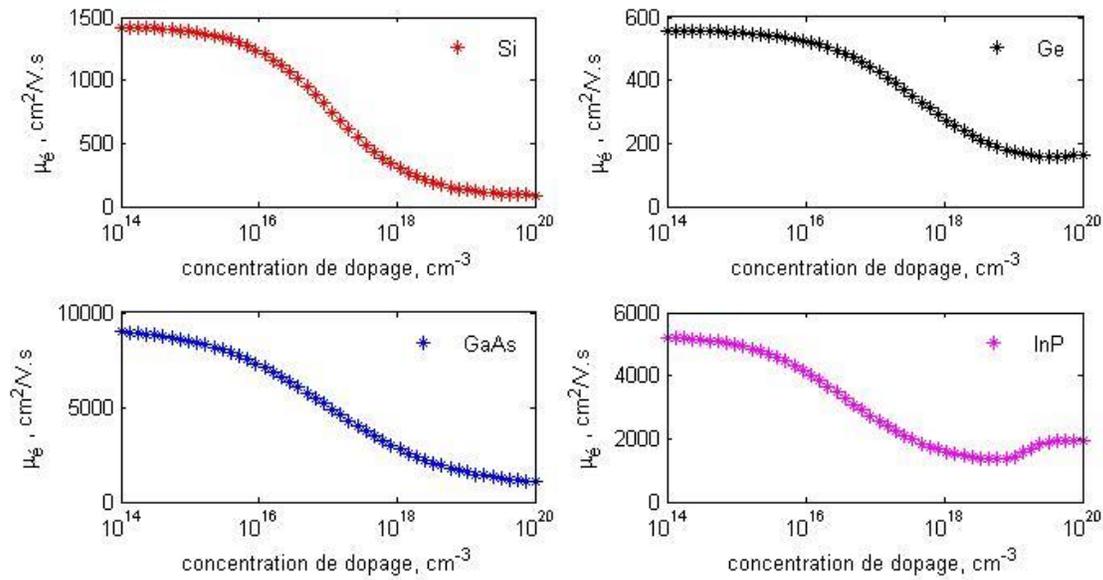


Figure 3. 21: Mobilité des électrons en fonction de la concentration de dopage pour différentes structures : Si, Ge, GaAs, InP à T=300 K

La figure (3.20) présente la variation de la mobilité des électrons en fonction de la concentration de dopage à T=300 K pour différentes structures comme le Si et le Ge semiconducteurs de type VI et le GaAs. InP semiconducteurs de type III-V selon le modèle MINIMOS 6. Elle montre que la mobilité diminuée légèrement avec la concentration de dopage jusqu'à une concentration de dopage de l'ordre de  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$  où la mobilité des quatre structures diminue d'une façon remarquable puis se stabilise sauf pour InP qui présente une légère augmentation puis une stabilisation au-delà d'un dopage de l'ordre de  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$ . On constate aussi que la mobilité des semiconducteurs III-V (GaAs, InP) est plus élevée à celle des semiconducteurs classiques (Si, Ge). C'est la raison pour laquelle on utilise ces matériaux dans la fabrication des dispositifs rapides.

Le modèle MINIMOS 6 est développé pour le Si et étendue à tous les autres matériaux semiconducteurs et tient compte de l'impact de la diffusion des impuretés en volume et en surface d'une part et de l'effet de la variation de la température sur la diffusion des porteurs de charges d'autre part à travers la relation [116] :

$$\mu_v^{Li} = \mu_v^{min} + \frac{\mu_v^L - \mu_v^{min}}{1 + \left(\frac{C_I}{C_v^{ref}}\right)^{\alpha_v}} \quad (\text{III-75})$$

Avec  $\mu_v^{Li}$  représentant la mobilité effective. L'indice Li désigne l'influence du réseau cristallin et les impuretés sur la diffusion des porteurs de charge (lattice and impurity), v désigne le type de porteur : n pour les électrons, p pour les trous.  $C_1$  désigne la concentration d'impuretés ionisées. Et  $\mu_v^L, C_v^{ref}, \alpha_v, \mu_v^{min}$  sont donnés respectivement par [116] :

$$\mu_v^L = \mu_{v,300}^L \cdot \left(\frac{T_L}{300K}\right)^{\gamma_{0,v}} \quad (\text{III-76})$$

$$C_v^{ref} = C_{v,300}^{ref} \cdot \left(\frac{T_L}{300K}\right)^{\gamma_{3,v}} \quad (\text{III-77})$$

$$\alpha_v = \alpha_{v,300} \cdot \left(\frac{T_L}{300K}\right)^{\gamma_{4,v}} \quad (\text{III-78})$$

$$\mu_v^{min} = \begin{cases} \mu_{v,300}^{min} \cdot \left(\frac{T_L}{300K}\right)^{\gamma_{1,v}} & T \geq 200K \\ \mu_{v,300}^{min} \cdot \left(\frac{2}{3}\right)^{\gamma_{1,v}} \cdot \left(\frac{T_L}{300K}\right)^{\gamma_{1,v}} & T < 200K \end{cases} \quad (\text{III-79})$$

Les termes  $\mu_{v,300}^{min}, \mu_{v,300}^L, C_{v,300}^{ref}, \alpha_{v,300}, \gamma_0, \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4$  sont des constantes [116].

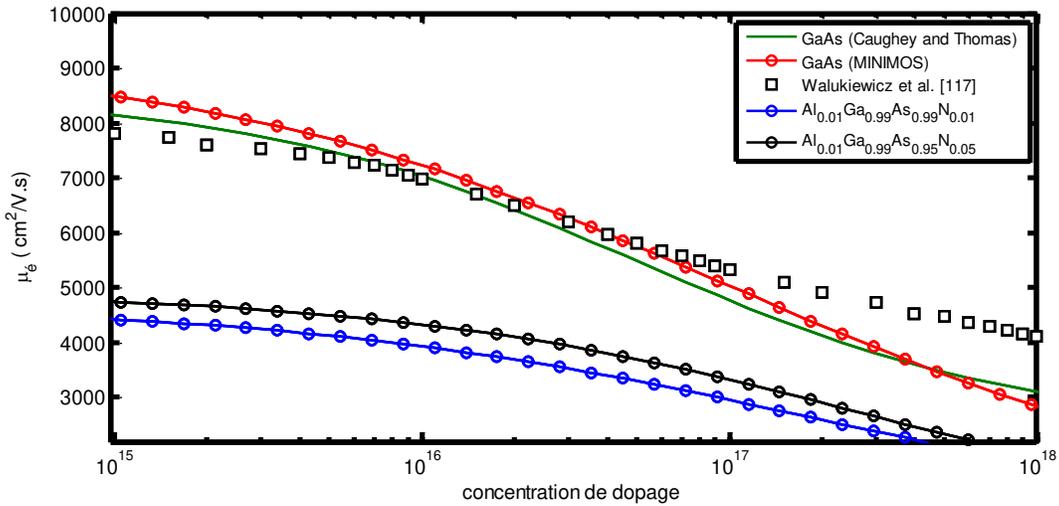


Figure 3. 22: Mobilité des électrons en fonction de la concentration de dopage pour GaAs, à T=300 K pour différents modèles et mesures expérimentales.

La figure (3.22) montre la variation de la mobilité des électrons en fonction de la concentration de dopage pour différentes concentrations d'Al et de N.

En premier lieu, les courbes bleue et noire (une même concentration d'Al = 1%) on remarque que l'augmentation de la concentration de N augmente la mobilité des porteurs de charges. En deuxième lieu, les courbes verte et rouge (une même concentration d'Al = 0%) sont obtenues par l'application du modèle MINIMOS 6 à la structure binaire GaAs (courbe rouge) et par l'application du modèle de Caughey et Thomas à la même structure binaire GaAs (courbe verte). Ces courbes montrent que les résultats obtenus sont en bon accord avec les datas expérimentaux de Walukiewicz et al. [117]. À la fin, la comparaison entre les deux groupes de courbes montre que l'augmentation de la concentration de l'Al (elle passe de 0% à 1%) baisse la mobilité des porteurs de charges.

Le modèle MINIMOS6 est utilisé pour le calcul de la mobilité des porteurs de charges pour les structures binaires. Pour les structures ternaires on applique la relation suivante [116] :

$$\frac{1}{\mu^{AB}} = \frac{1-x}{\mu^A} + \frac{x}{\mu^B} + \frac{(1-x)x}{C_\mu} \quad (\text{III-80})$$

Où  $\mu^{AB}$  représente la mobilité pour la structure ternaire constitué par les deux structures binaires parentes A avec fraction (1-x), et B avec fraction x, caractérisées respectivement par leurs mobilités  $\mu^A$  et  $\mu^B$ .  $C_\mu$  représente le terme correctif pour le ternaire AB. (Cette relation ressemble à la somme  $R_{AB}$  de deux résistances  $R_A$  et  $R_B$  en parallèles :

$$\frac{1}{R_{AB}} = \frac{1}{R_A} + \frac{1}{R_B} \quad \text{Ou de deux condensateurs en série } \frac{1}{C_{AB}} = \frac{1}{C_A} + \frac{1}{C_B} )$$

Pour les structures quaternaires il existe d'autres relations plus complexes nécessitant d'autres termes correctifs qui sont indisponibles dans la littérature pour les nouveaux matériaux que nous étudions y compris notre structure d'intérêt AlGaAsN. Le contournement de ce manque de paramètres nous a amené à utiliser l'interpolation linéaire entre les inverses des mobilités des différentes binaires parents constituant l'alliage.

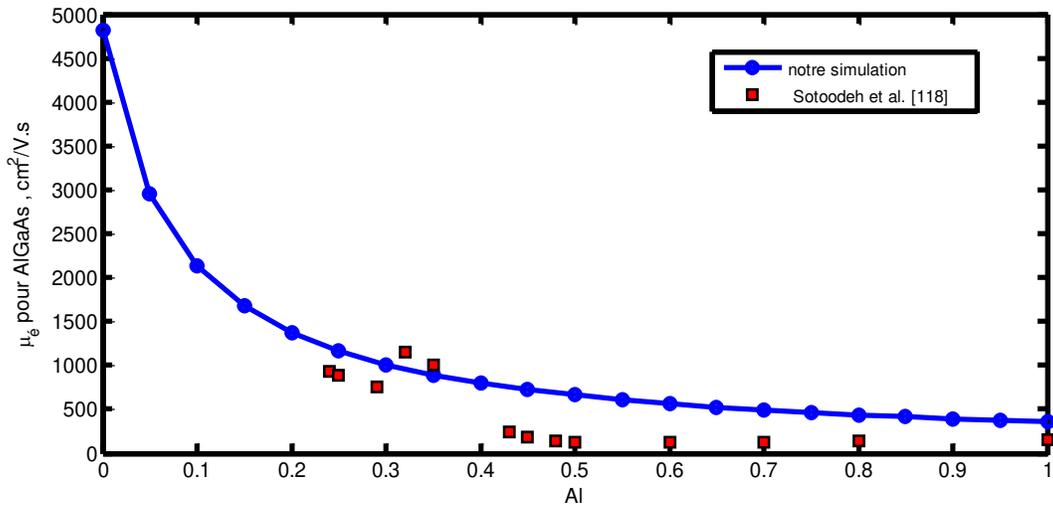


Figure 3. 23: Mobilité des électrons en fonction de la concentration d'(Al) pour le ternaire  $Al_xGa_{1-x}As$

La figure (3.23) montre la validation de cette méthode utilisée pour le calcul de la mobilité des électrons pour la structure ternaire  $Al_xGa_{1-x}As$  en fonction de la concentration d'(Al).

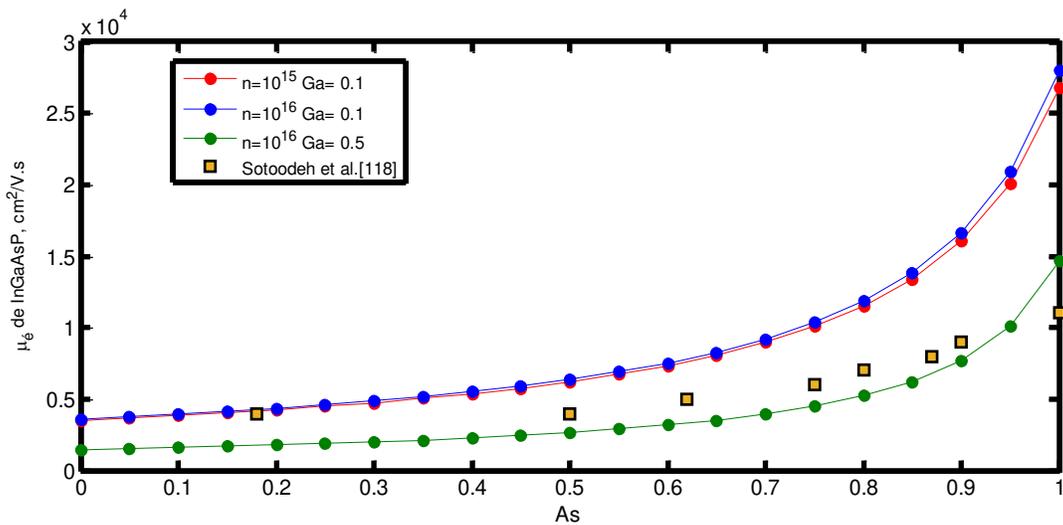


Figure 3. 24: Mobilité des électrons en fonction de la concentration d'As pour différentes structures quaternaires à base de l'alliage InGaAsP

Pour cette structure, la mobilité diminue avec l'(Al) est les résultats sont donc en corrélation avec les mesures expérimentales publiées par Sotoodeh et al. [118].

Dans le même cadre de la validation de l'interpolation linéaire, la figure (3.24) illustre la variation de la mobilité des électrons en fonction de concentration d'(As) pour différentes structures quaternaires à base de l'alliage  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{P}_y$  pour des taux de dopage d'impuretés différents. Elle montre que la mobilité des électrons augmente avec la concentration de (As).

La figure (3.24) montre que pour les mêmes concentrations de (Ga= 10%) (courbes rouge et bleue), la mobilité augmente légèrement avec la concentration de dopage des impuretés (n) alors qu'elle diminue avec la concentration de (Ga) (courbes bleue et verte) et  $n= 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ . Ces résultats sont en corrélation avec les mesures expérimentales publiées par Sotoodeh et al. [118]. Ceci valide la méthode de calcul choisie pour les structures quaternaires.

### Conclusion

Dans ce chapitre on a présenté les différents modèles théoriques pour étudier les propriétés structurales tels que la théorie  $\mathbf{k.p}$  et les modèles BAC, VBAC et DBAC. Pour les propriétés optiques, tel que le coefficient d'absorption, il est calculé par la relation basée sur le principe que l'absorption ne se fait que lorsque l'énergie incidente est plus grande que l'énergie de la bande interdite. Concernant les propriétés de transport comme la mobilité des électrons et des trous, on a appliqué le modèle MINIMOS 6 pour les structures binaires (existence des paramètres du modèle ainsi que les valeurs expérimentales) comme l'alliage GaAs. Pour les structures plus complexes ternaires et quaternaires le modèle MINIMOS 6 prévoit des termes correctifs nécessitant d'autres paramètres. L'indisponibilité de ces paramètres nous a obligé de contourner le problème en appliquant la méthode de l'interpolation linéaire entre les différentes binaires parents (à la base des structures ternaires et quaternaires). Nous avons validé cette approche avec les données expérimentales existantes dans le but de l'appliquer pour notre structure quaternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$  (objet de notre étude) que nous présenterons dans le prochain chapitre.

## CHAPITRE 4 : SIMULATION, RÉSULTATS ET DISCUSSIONS

### Introduction

Dans ce chapitre on va présenter nos résultats de simulation basés sur les modèles et les relations théoriques détaillés dans les chapitres précédents, où on va étudier l'effet de l'incorporation de (N) et (Al) sur les propriétés optoélectroniques de la structure quaternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$  déposé sur le Ge afin de déterminer les concentrations optimales des différents éléments constituant l'alliage. La première partie de ce chapitre on montre l'intérêt de cette structure par rapport aux autres alliages à savoir, une meilleure insertion de (N) dans la structure d'une façon significative et plus homogène avec un paramètre de maille très proche de celui du substrat. La deuxième partie est dédiée à l'étude de l'effet de l'incorporation de (N) et de (Al) sur les propriétés électroniques, structurales, optiques, électriques et de transport. Et enfin, déterminer les concentrations optimales des différents éléments constituant l'alliage  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$ . La troisième partie porte sur l'étude des propriétés optoélectroniques de l'alliage ainsi optimisé.

#### 1. L'intérêt de la structure $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$

Les matériaux à base des nitrures dilués tel que le ternaire GaAsN attirent l'intérêt de beaucoup de chercheurs à travers le monde à cause principalement de leurs bandes interdites qui diminuent d'une façon remarquable avec de faibles concentrations de (N). En effet, l'incorporation d'une faible quantité de (N) produit une décroissance plus importante de l'énergie de la bande interdite de l'ordre de 10 à 100 fois plus que dans les composés III-V traditionnels (~150 meV pour 1% de (N)) [119]. Parallèlement, cette diminution engendre des contraintes dans le cristal qui sont ajoutées à d'autres contraintes créées par la différence entre les rayons atomiques de (N) et (As), ce qui provoque la formation de défauts pour relaxer ces contraintes [120]. Généralement on a trois types de défauts : les complexes (N-N) [121], les complexes interstitiels (N-As) et les lacunes de Gallium (Ga) [122]. Ces défauts favorisent l'apparition des niveaux d'énergie tels que les pièges à électrons E1 qui se comportent comme des centres de recombinaison non-radiatifs [123], les pièges à trous H2 qui se comportent comme des états accepteurs [124] et les pièges à trous H1 qui jouent le rôle de centres de recombinaison peu profonds [125]. Ces défauts endommagent la qualité cristalline du matériau et attribueraient un faible temps de vie des porteurs ce qui réduit la longueur

de diffusion et donc la mobilité des porteurs dans le cristal. Ce problème de défaut peut être minimisé dans les alliages nitrures dilués qui contiennent de l'Indium ( In) car d'une part, sa présence engendre la diminution de la bande interdite avec un accord de maille entre le substrat et la couche épitaxiée [126] et d'autre part, la formation des liaisons In-N réduisent les contraintes induites par les autres liaisons dans le cristal ce qui améliore à la fois la qualité cristalline et la mobilité des porteurs [127]. Cependant, le nombre de ces liaisons est très faible surtout avec la basse incorporation de (N). Une approche alternative consiste à introduire une faible quantité de (Al) (Al<15%), ce qui augmente d'une façon significative l'efficacité d'incorporation de (N) [128]. L'incorporation de l'(Al) forme préférentiellement des liaisons avec (N) car la liaison (Al-N=2.88 eV) est plus forte que la liaison (Ga-N=2.24 eV) [129,130]. Ceci augmente l'incorporation de (N) dans la couche AlGaAsN et 'les atomes de (N) vont occuper les sites du groupe V situés à proximité des atomes Al et non des atomes de Ga [131,132]. Les atomes de (N) vont alors s'incorporer d'une façon plus homogène et réduire la formation de complexes (N-N-As) et les défauts non-radiatifs [133]. Cette distribution plus homogène des atomes de (N) minimise les mécanismes de diffusion engendrés par les agrégats de (N) d'où l'augmentation de la mobilité. Ci-dessous, on va montrer l'effet de l'incorporation de (N) et de l'(Al) pour les différentes propriétés de la structure  $Al_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$  déposé sur le Ge.

## 2. Propriétés électroniques

On désigne par propriétés électroniques toutes les propriétés à l'échelle de l'électron voire de l'atome, y compris le paramètre de maille, la contrainte et l'épaisseur critique. Le paramètre de maille principale propriété des réseau cristallins. La contrainte est induite soit par la déposition des deux matériaux avec paramètres de maille proches ou bien par la différence entre les tailles atomiques des éléments formant l'alliage lui-même. L'épaisseur critique indique l'épaisseur limite où l'énergie élastique emmagasinée devient suffisante pour générer des défauts structuraux qui relaxent partiellement les contraintes dans le cristal. Pour le calcul de ces propriétés on va appliquer les modèles détaillés dans le chapitre précédent où les paramètres sont illustrés dans le tableau (4.1) :

Tableau 4. 1 : Les paramètres des structures binaires utilisés pour le calcul des propriétés optoélectroniques [134-138]

Paramètre	GaAs	AlAs	GaN	AlN
$a$ (Å)	5.653	5.6611	4.5	4.38
$E_g$ (eV)	1.42	3.099	3.29	4.9
$\alpha$ (meV /k)	0.5405	0.885	0.593	0.593
$\beta$ (k)	204	530	600	600
$\Delta_0$ (eV)	0.341	0.28	0.017	0.019
$a_c$ (eV)	-7.17	-5.64	-2.20	-6
$a_v$ (eV)	-1.16	-2.47	-5.20	-3.4
$b$ (eV)	-2.0	-2.3	-2.20	-1.9
$C_{11}$ (GPa)	1221	1250	293	304
$C_{12}$ (GPa)	566	534	159	160
$m_e$ ( $m_0$ )	0.067	0.15	0.15	0.25
$m_{s_0}^*$	0.172	0.28	0.29	0.47
$\gamma_1$	6.98	3.76	2.67	1.92
$\gamma_2$	2.06	0.82	0.75	0.47
$\gamma_3$	2.93	1.42	1.10	0.85

### 2.1 L'effet de l'incorporation de (N) et le (Al) sur le paramètre de maille :

Les paramètres de maille aussi appelés paramètres cristallins, sont des grandeurs utilisées pour décrire entièrement la maille élémentaire d'un cristal. On distingue trois longueurs ( $a$ ,  $b$ ,  $c$ ) et trois

angles  $(\alpha, \beta, \gamma)$ . Ces grandeurs sont en général différentes les unes des autres selon le système réticulaire du cristal. Pour le système cubique (zinc blende pour les semiconducteurs III-V), la symétrie du réseau impose certaines égalités tel que  $a=b=c$  et  $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$  et on parle alors d'un seul paramètre de maille ( $a$ ). Lors de la réalisation des alliages binaires avec des paramètre de maille différents, le paramètre de maille de l'alliage obtenu peut être considéré comme évoluant linéairement en fonction de la composition des différentes structures binaires suivant la loi de Végard [139].

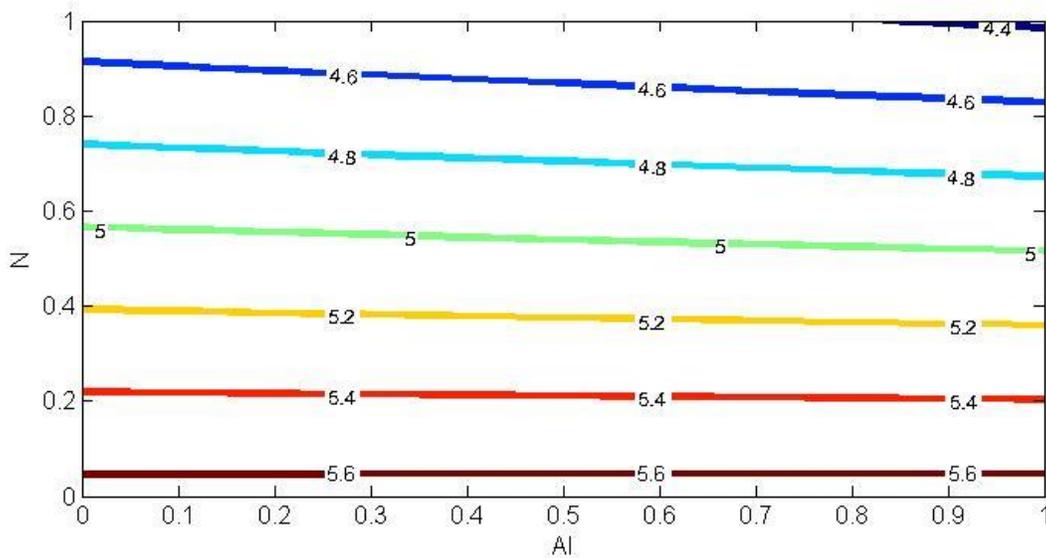


Figure 4. 1: Le paramètre de maille de l'alliage  $Al_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$  en fonction de la concentration de (N) et de l'(Al)

La figure (4.1) illustre la variation du paramètre de maille de l'alliage  $Al_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$  en fonction de la concentration de l'(Al) et de (N). Elle montre que le paramètre de maille de la structure diminue d'une façon remarquable avec (N) cela est dû au fait que lors de la substitution de (N) à la place de (As), on obtient des composés binaires (GaN avec un paramètre de maille de  $4.5\text{Å}$  à la place de GaAs avec un paramètre de maille de  $5.65\text{Å}$  et AlN avec un paramètre de maille de  $4.38\text{Å}$  au lieu de AlAs avec un paramètre de maille de  $5.66\text{Å}$ ).

Dans cette même figure le paramètre de maille diminue légèrement avec la concentration de l'(Al), car la substitution de l'(Al) à la place de (Ga), induit des composés binaires (AlAs avec un paramètre de maille de  $5.66\text{Å}$  à la place de GaAs avec un paramètre de maille de  $5.65\text{Å}$  et AlN

avec un paramètre de maille de  $4.38\text{\AA}$  au lieu de GaN avec un paramètre de maille de  $4.5\text{\AA}$ ). Donc l'incorporation de l'(Al) influe légèrement sur le paramètre de maille de l'alliage tandis que (N) influe d'une façon significative sur ce dernier. Ceci engendre une contrainte importante illustrée dans la figure (4.2).

## 2.2 L'effet de l'incorporation de (N) et de l'(Al) sur la contrainte

Selon le modèle de Bir et Pikus [78] détaillé dans le chapitre 3 on a obtenu la figure (4.2) qui illustre la variation de la contrainte totale  $\epsilon_{\text{totale}}$  pour différentes concentrations de (N) et de l'(Al). Elle est la sommation entre les contraintes dans le plan de la couche  $\epsilon_{xx}$ ,  $\epsilon_{yy}$  et la contrainte dans la direction de croissance  $\epsilon_{zz}$ .

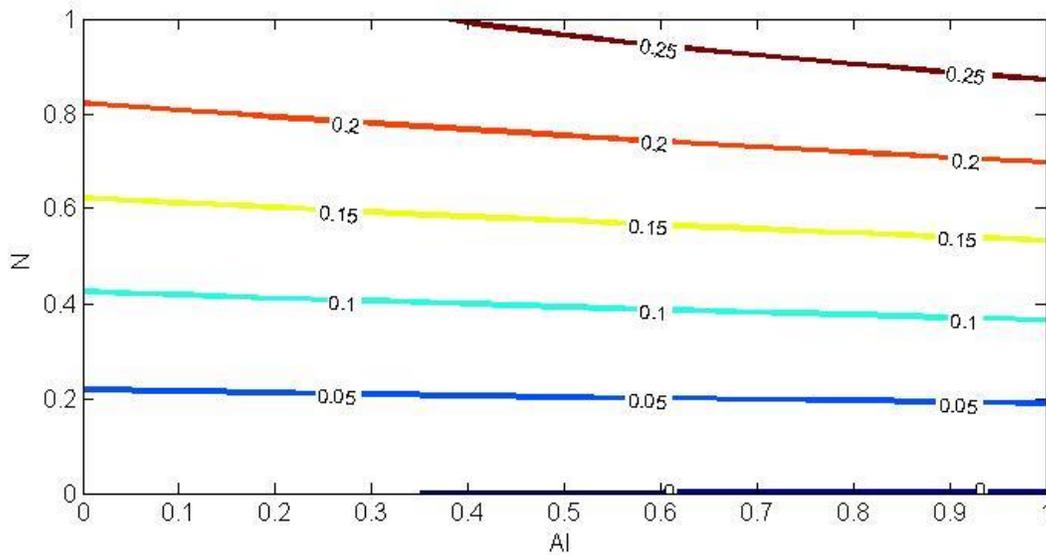


Figure 4. 2: La contrainte totale de la structure  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$  déposé sur Ge en fonction des concentrations de (N) et de (Al)

La figure (4.2) montre un même comportement que celui du paramètre de maille à sa voire, l'incorporation de (Al) engendre une contrainte minime voire nulle contrairement à l'incorporation (N) qui induit une contrainte importante avec des valeurs positives, cette apparition de la contrainte est justifiée par la différence entre le paramètre de maille de la structure quaternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$  et le substrat (Ge). Cette différence continue d'augmenter avec l'augmentation de la concentration de (N) tel qu'au-delà d'une concentration de l'ordre de 10% de (N), la contrainte dépasse les 2 %. Ceci induit la formation des défauts de relaxation et détériore la qualité cristalline

du réseau. En conclusion, cette étude permet de choisir comme limite d'incorporation de (N), 10 %. Aussi, le signe positif de la contrainte signifie que le paramètre de maille de (Ge) est strictement supérieur à celui de la structure  $Al_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$ , donc quel que soit la concentration de (N) et de l'(Al), on a toujours une contrainte en tension où la levée de la dégénérescence donne la bande de plus haute énergie  $E_{lh}$ .

### 2.3 L'effet de l'incorporation de (N) et de (Al) sur l'épaisseur critique

La figure (4.3) représentant la variation de l'épaisseur critique en fonction des concentrations de (N) et de l'(Al). Cette épaisseur critique  $h_c$  est obtenue en appliquant le modèle de Matthews et Blakeslee [98] détaillé dans le chapitre 3 pour les paramètres du tableau (4.1).

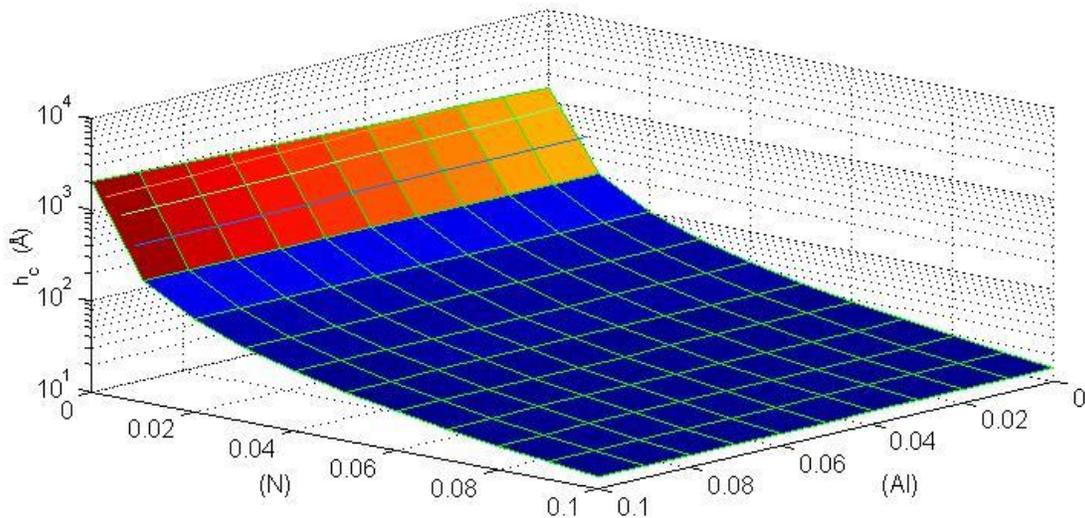


Figure 4. 3: L'épaisseur critique de la structure  $Al_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$  déposé sur le Ge en fonction de la concentration de (N) et de l'(Al)

L'épaisseur critique  $h_c$  diminue légèrement avec la concentration de l'(Al) mais d'une façon significative avec la concentration de (N). Cette épaisseur présente des valeurs maximales pour une contrainte minimale, et des valeurs minimales (autour de quelques nanomètres) pour des contraintes correspondant à des concentrations autour de 1% de (N). Ces valeurs numériques sont illustrées dans la figure (4.4).

La figure (4.4), illustre les valeurs de l'épaisseur critique en fonction de la concentration de (N) et de l'(Al). Pour des concentrations autour de 4% de (N) l'épaisseur critique de la structure est strictement inférieure à 50 Å (5nm), pour des concentrations autour de 8 % de (N) l'épaisseur critique de la structure est strictement inférieure à 20 Å (2nm) et pour des concentrations supérieures à 10 % l'épaisseur critique de la structure devient inférieure à 1nm. Cette dernière est difficile à obtenir expérimentalement. Selon ces résultats qui sont en accord avec l'étude de la contrainte, on admet la concentration de 10% comme limite d'incorporation pour (N).

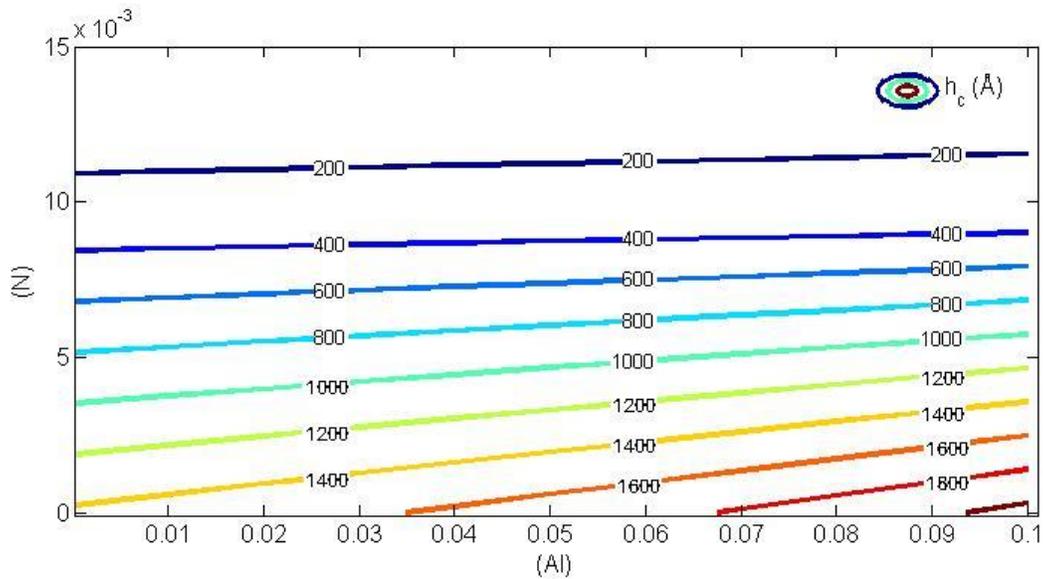


Figure 4. 4: L'épaisseur critique de la structure  $Al_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$  déposé sur Ge en fonction de la concentration de (N) et de l'(Al)

### 3. Propriétés structurales

Dans ce paragraphe on va ressortir l'effet des phénomènes électroniques sur la structure de bandes de l'alliage  $Al_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$  tout en respectant la limite de 10% pour (N) selon les résultats précédents. L'énergie de la bande interdite de la structure quaternaire  $Al_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$  calculée dans le modèle BAC [81] est la distance entre la sous-bande de plus haute énergie dans la bande de valence  $E_{vh}$ , et la sous-bande de plus faible énergie dans la bande de conduction  $E_c^-$  (après éclatement en  $E_c^+$  et  $E_c^-$  de la bande de conduction sous l'effet de l'incorporation de (N)).

### 3.1 L'effet de l'incorporation de (N) et de l'(Al) sur la bande interdite

L'effet de la contrainte [78] et l'application du modèle BAC [81] donne quatre transitions énergétiques  $E_{c-lh}^-$ ,  $E_{c-hh}^-$ ,  $E_{c-lh}^+$ ,  $E_{c-hh}^+$ . La variation de l'énergie de la bande interdite en fonction de la concentration de (N) et de l'(Al) est illustrée dans la figure (4.5).

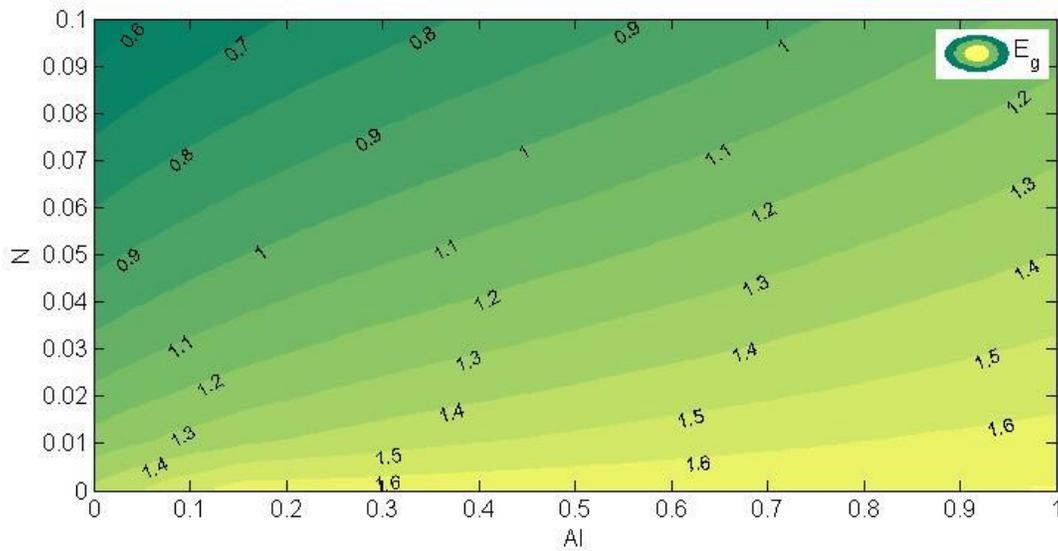


Figure 4. 5: L'énergie de la bande interdite de la structure  $Al_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$  déposé sur Ge en fonction de la concentration de(N) et d'(Al)

Elle montre que l'incorporation de l'(Al) augmente légèrement l'énergie de la bande interdite de l'alliage tandis qu'elle diminue d'une façon remarquable avec (N), c'est l'une des propriétés des nitrures dilués. Dans cette même figure, l'énergie de gap de 1 eV est obtenue pour différentes concentrations de (N) et d'(Al). Cette valeur nous intéresse car le but de notre travail est de trouver les concentrations optimales d'(Al) et de (N) donnant une énergie de gap proche de 1eV pour utiliser cette couche comme quatrième jonction dans une cellule multijonction.

Le tableau (4.2) présente les quatre transitions énergétiques pour trois structures quaternaires à base de l'alliage  $Al_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$ . Les concentrations de (N) et d'(Al) pour ces structures sont choisis selon les datas expérimentaux de Kolhatkar et al. [140].

Tableau 4. 2: Les quatre transitions et les mesures de Kolhatkar et al. [140] pour différentes structures

La structure	$E_{c-lh}^+$ (eV)	$E_{c-hh}^-$ (eV)	$E_{c-hh}^+$ (eV)	$E_{c-lh}^-$ (eV)	Eg (eV) Mesurée [140]	$\frac{\Delta a}{a}$ (%) (erreur relative)
$Al_{0.05}Ga_{0.95}N_{0.006}As_{0.994}$	1.741	1.362	1.755	1.348	1.360	0.8
$Al_{0.1}Ga_{0.9}N_{0.014}As_{0.986}$	1.849	1.308	1.877	1.280	1.300	1.5
$Al_{0.15}Ga_{0.85}N_{0.034}As_{0.966}$	1.998	1.179	2.060	1.120	1.220	8.9

Ces datas expérimentaux sont en bon accord avec nos calculs obtenus dans le cadre du modèle BAC de l'énergie de la transition  $E_{c-lh}^-$ . Cette dernière représente l'énergie de la bande interdite la plus faible parmi les quatre transitions énergétiques. Et expérimentalement elle représente l'énergie la plus faible pour produire une excitation des électrons et les faire passer de la bande de valence vers la bande de conduction. La corrélation entre les deux résultats diminue avec l'augmentation de la concentration de (N) et (Al) (l'erreur relative passe de 0.8% pour des concentrations de 5 et 0.6% respectivement pour l'(Al) et (N) à 8.9% pour des concentrations de 15 et 3.4% respectivement pour l'(Al) et (N)). Ceci s'explique par la différence entre notre substrat (Ge) et (GaAs) utilisé par de Kolhatkar et al. [140].

### 3.2 Le diagramme d'énergie pour la structure $Al_{0.06}Ga_{0.94}As_{0.98}N_{0.02}$

La figure (4.6) illustre le diagramme d'énergie de la structure  $Al_{0.06}Ga_{0.94}As_{0.98}N_{0.02}$  obtenu par le modèle de Bir et Pikus [78] prenant uniquement l'effet de la contrainte sur la structure des bandes et le modèle BAC tenant en compte de l'effet conjugué de la contrainte et de (N) sur cette structure. Selon le modèle de Bir et Pikus [78], la levée de la dégénérescence entre les sous-bande de trous lourds et trous légers donne deux transitions d'énergie,  $E_{c-lh}$ ,  $E_{c-hh}$ . La première  $E_{c-lh} = 1.5093$  eV, représente la distance entre la sous-bande  $E_{lh}$  est la bande de conduction  $E_c$  et la seconde  $E_{c-hh} = 1.5473$  eV représentant la distance entre la sous-bande  $E_{hh}$  est la bande de conduction  $E_c$  avec les valeurs de décalages respectivement de 0.0367 eV, 0.012 eV et 0.025 eV pour  $\Delta E_c$ ,  $\Delta E_{lh}$  et

$\Delta E_{hh}$ . L'application du modèle BAC [81], conduit en premier lieu à éclatement de la bande de conduction sous l'effet de (N) et en deuxième lieu l'effet de la contrainte conduit à la levée de la dégénérescence entre les sous-bande de trous lourds et trous légers. Ce qui nous donne au total quatre transitions énergétiques  $E_{c-lh}^-$ ,  $E_{c-hh}^-$ ,  $E_{c-lh}^+$ ,  $E_{c-hh}^+$  avec les valeurs respectivement 1.1786, 1.2165, 1.8647 et 1.9026 eV. On constate que la moyenne entre les deux transitions  $E_{c-lh}^-$ ,  $E_{c-lh}^+$  est égale à 1.52165 eV. Cette valeur est proche à celle de  $E_{c-lh} = 1.5473$  eV, de même pour  $E_{c-hh}^-$ ,  $E_{c-hh}^+$ , la moyenne est égale à 1.52165 eV et est proche de celle de  $E_{c-hh} = 1.55955$  eV. Cette levée de dégénérescence et l'éclatement de la bande de conduction (quatre transitions énergétiques) rend le modèle BAC [81] plus adapté pour l'explication des résultats expérimentaux qui ne pouvaient être expliqués au paravent par le modèle de Bir et Pikus [78].

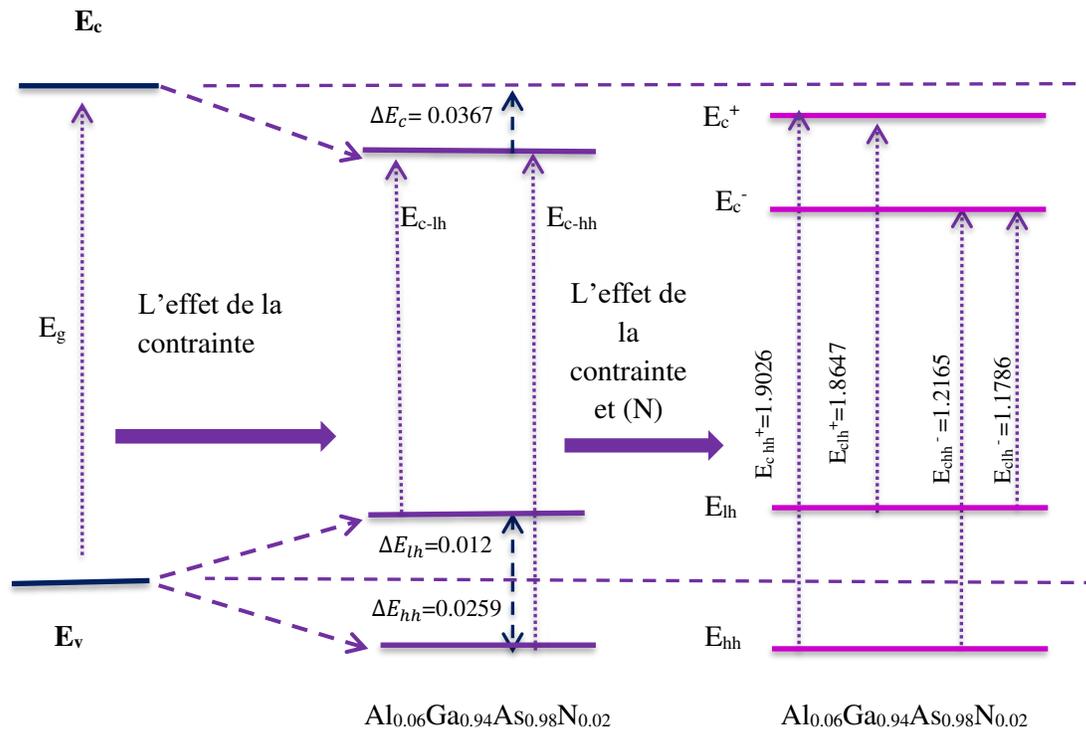


Figure 4. 6: Diagramme d'énergie pour la structure  $\text{Al}_{0.06}\text{Ga}_{0.94}\text{As}_{0.98}\text{N}_{0.02}$

La figure (4.7) illustre l'effet de (N) sur la bande de conduction pour différentes structures. Elle montre que le phénomène de l'éclatement de la bande de conduction en deux sous-bandes d'énergie  $E_{c^+}$ ,  $E_{c^-}$ , est observé pour toutes les structures. L'écartement de ces deux sous bandes

augmente avec la concentration de (N), menant à une énergie  $E_c^-$  plus basse et une énergie  $E_c^+$  plus haute. Nos résultats [142] sont en bonne corrélation avec les mesures expérimentales obtenues par PROCZ et al. [141] pour la structure  $Al_{0.15}Ga_{0.85}AsN$ , et les travaux de BEAUDOIN et al. [82] pour la structure  $GaAs_{1-x}N_x$ .

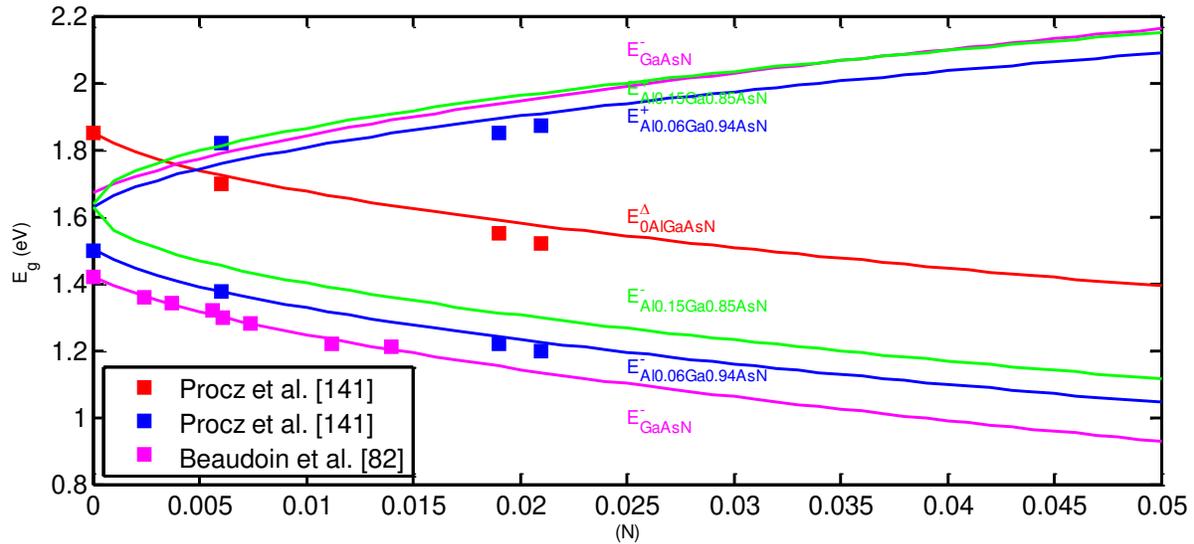


Figure 4. 7: L'éclatement de la bande de conduction sous l'effet N pour différentes structures

A cause des différentes utilisations des cellules solaires PV (spaciales, terrestres, sous marines ....) l'étude de l'effet de la température et de la pression sur la structure des bandes s'impose.

### 3.3 L'effet de la température sur la bande interdite des alliages à base de $Al_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$

La figure (4.8) illustre la variation de l'énergie de la bande interdite pour différentes structures à base de l'alliage  $Al_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$  en fonction de la température.

La figure (4.8) montre que les énergies de la bande interdite diminuent avec la température pour toutes les structures, diminue avec l'augmentation (N) et baisse avec l'augmentation de l'(Al). Par exemple, à  $T= 0$  K, à une même concentration d'(Al)=5%, on constate qu'en augmentant la concentration de (N) (de 0.34 % (courbe bleue) à 0.6% (courbe verte), la bande interdite diminue (de 1.503 eV à 1.089 eV). De la même façon, pour la même concentration de (N)=0.34%, l'augmentation de l'(Al) (de 5 (courbe verte) à 15% (courbe rose)), augmente la bande interdite de 1.089 eV à 1.291eV. En fin nos résultats de simulation obtenus par l'application de l'interpolation

linéaire et la formule de VARSHNI [99], sont en très bon accord avec les mesures expérimentales de LOURENCO et al. [100]. Les paramètres utilisés lors de notre simulation sont donnés par le tableau 4.3

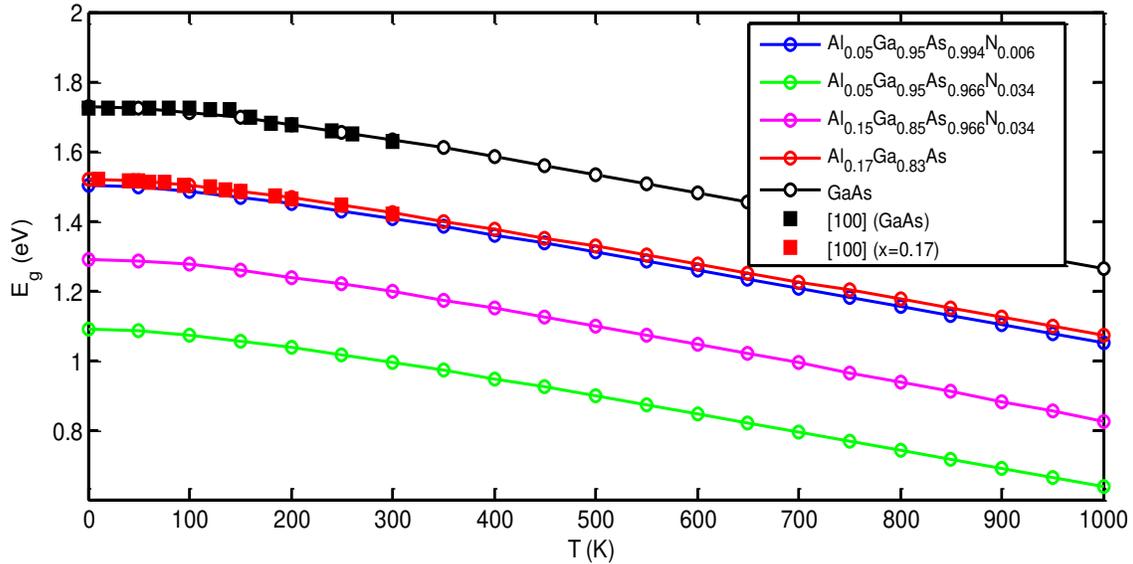


Figure 4. 8 : L'énergie de la bande interdite en fonction de la température pour des différentes structures

La diminution de la bande interdite pour n'importe quelle structure avec la température est expliquée par le fait qu'à haute température les liens interatomiques sont affaiblis, donc une faible énergie peut casser ces liaisons et on obtient un électron libre. De ce fait en augmentant la température les porteurs de charge ont plus de facilité d'acquérir une énergie thermique supérieure à l'énergie de la bande interdite leur permettant de franchir cette dernière et passer à la bande de conduction.

Tableau 4. 3 : Les constantes empiriques utilisées pour le calcul de la bande interdite en fonction de la température [92]

La structure	$E_g(0)$ (eV)	$\alpha$ [eV.K <sup>-1</sup> ]	$\beta$ [K]
GaAs	1.519	5.405e-4	204

AlAs	3.099	8.85e-4	530
GaN	3.299	5.93e-4	600
AlN	4.900	5.93e-4	600

### 3.4 L'effet de la pression sur la bande interdite pour les alliages à base de $Al_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$

La figure (4.9) représente la variation de la bande interdite pour différentes structures à base de l'alliage  $Al_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$  en fonction de la pression.

La figure (4.9) montre que l'énergie de la bande interdite pour toutes structures augmente linéairement avec la pression. Cette forme linéaire provient de l'équation (III-68) [102] où le terme quadratique ( $\beta$  est très petit) est négligeable pour les structures binaires parents pour notre structure et il ne reste que le terme linéaire ( $\alpha$ ). La simulation de l'effet de la pression sur les structures est faite par l'application de l'interpolation linéaire et les données illustrées dans le tableau (4.4). La figure montre aussi que la bande interdite diminue avec (N). Elle passe de 1.462 eV pour N= 0.6% (pour la courbe bleu) à 1.055eV pour N=3.4% (la courbe verte) et cela pour une même concentration d'(Al). Concernant l'effet de la concentration de l'(Al) sur la bande interdite pour une même concentration de (N), l'énergie de la bande interdite augmente avec l'augmentation de (Al) (elle passe de 1.055 eV pour Al= 5% (la courbe verte) à 1.178 eV pour Al=15% (la courbe rouge). La disponibilité des datas expérimentaux de SHAN et al. [103] pour la structure  $Al_{0.12}Ga_{0.88}As$  (courbe noire) nous a permis de valider notre simulation.

L'effet de la pression sur la bande interdite peut se justifier par le rôle contraire que joue la pression par rapport à la température. Si on augment la pression les liens interatomiques sont comprimés de ce fait une énergie plus importante est nécessaire pour faire franchir la bande interdite et permet au l'électron de passer à la bande de conduction.

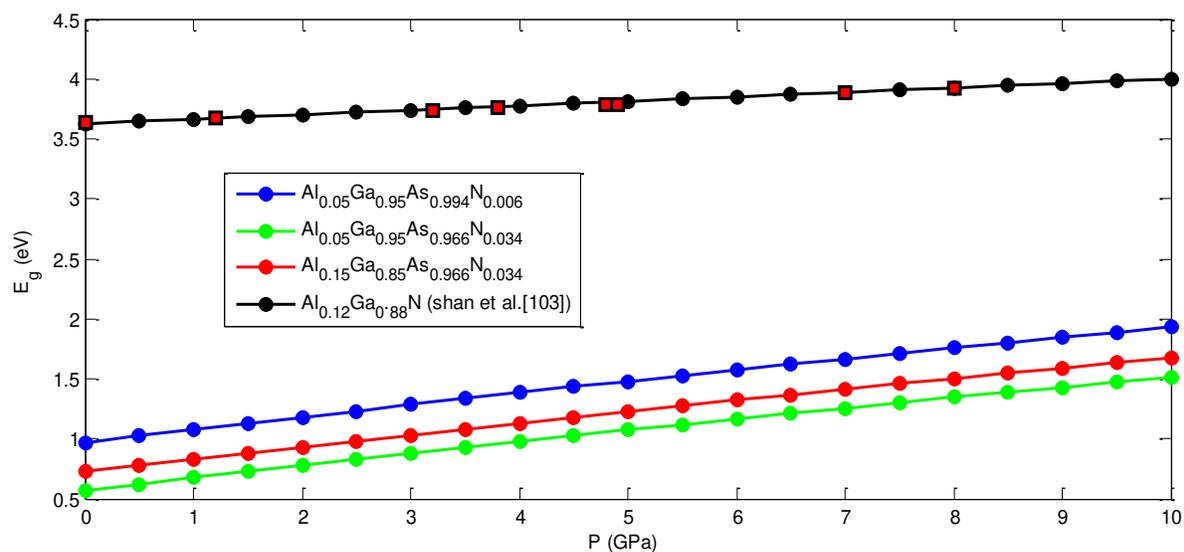


Figure 4. 9: L'énergie de la bande interdite en fonction de la pression

Tableau 4. 4: Les constantes empiriques utilisées pour le calcul de la bande interdite en fonction de la pression illustrées sur la figure (4.9)

	$E_i(0)$ (eV) [143]	$\alpha$ (eV/GPa)	$\beta$ (eV/GPa <sup>2</sup> )
AlN	5.94	$42 \text{ e}^{-3}$ [143]	$-0.34\text{e}^{-3}$ [144]
GaN	3.3	$41.7 \text{ e}^{-3}$ [143]	$-0.38\text{e}^{-3}$ [144]
GaAs	1.008	$109.4 \text{ e}^{-3}$ [143]	$-1.34 \text{ e}^{-3}$ [145]
AlAs	2.048	$104.5 \text{ e}^{-3}$ [143]	$-1.53 \text{ e}^{-2}$ [145]

#### 4. Propriétés de transport pour les alliages à base de $Al_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$

D'après le modèle du transport MINIMOS 6 [115] détaillé dans le chapitre trois, la mobilité est influencée par la température, la concentration du dopage des impuretés et l'effet de la concentration de (N) et de l'(Al). Dans cette partie on présente nos résultats de l'étude de l'effet de ces paramètres sur la mobilité des porteurs de charges. Les données numériques utilisées sont illustrées dans le tableau (4.5).

Tableau 4. 5 : les paramètres de la mobilité des électrons et des trous pour les différents binaires [115]

Paramètre	GaAs		AlAs		GaN		AlN	
	n	p	n	p	n	p	n	p
$\mu_{\vartheta,300}^{min}$	800	40	10	5	295	55	295	-
$\mu_{\vartheta,300}^L$	8500	470	250	130	1478	30	683	14
$c_{\vartheta,300}^{ref}$	$10^{17}$	$10^{17}$	$10^{17}$	$2.9 \times 10^{17}$	$10^{17}$	$3 \times 10^{17}$	$10^{17}$	-
$\alpha_{\vartheta,300}$	0.5	1	0.5	1	0.66	2	1.16	-
$\gamma_{0,\vartheta}$	-2.2	-0.9	-2.1	-2.2	-1.26	-	-1.26	-
$\gamma_{1,\vartheta}$	-0.9	-0.9	-	-	-1.02	-	-1.82	-
$\gamma_{2,\vartheta}$	-0.9	-0.9	-	-	-	-	-	-
$\gamma_{3,\vartheta}$	6.2	0.5	-	0.5	3.02	-	3.78	-
$\gamma_{4,\vartheta}$	-	-	-	-	0.81	-	0.86	-

##### 4.1 L'effet de la température et la concentration de dopage des impuretés sur la mobilité

La figure (4.10) présente la variation de la mobilité des électrons en fonction de la concentration du dopage des impuretés pour différentes températures.

La figure (4.10) montre que la mobilité des électrons diminue pour différentes valeurs de la température. À une même température la courbe de la mobilité reste presque constante pour des concentrations du dopage inférieures à  $10^{16}$  mais au-delà de cette valeur, la mobilité diminue d'une

façon remarquable. Cette diminution est justifiée soit par l'effet de la température, soit par celui de la concentration du dopage sur la vitesse de déplacement des porteurs de charge. Quand la température augmente l'agitation thermique des électrons augmente, le nombre des collisions augmente ce qui diminue le libre parcours moyen de déplacement des électrons et donc la mobilité. En parallèle, la présence des impuretés accroît le nombre d'obstacles et influe sur le déplacement des porteurs de charges et contribue aussi à la diminution de la mobilité.

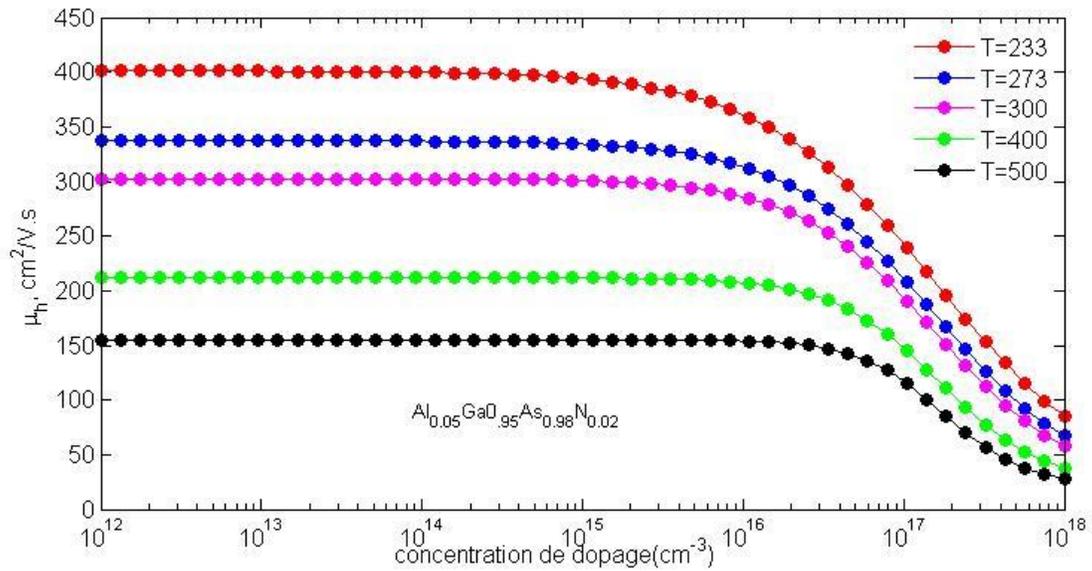


Figure 4. 10: La mobilité des électrons en fonction de la concentration du dopage des impuretés pour différentes températures

Ci-dessous la figure (4.11) illustre la variation de la mobilité des trous en fonction de la température et la concentration du dopage des impuretés.

La figure (4.11) montre que la mobilité des trous, comme celle des électrons, diminue avec la température et reste presque constante pour des concentrations du dopage inférieures à  $10^{16}$ . Au-delà de cette valeur la mobilité diminue d'une façon remarquable à cause de la présence des impuretés qui influe sur le déplacement de ces porteurs de charges ce qui engendre la diminution de la mobilité.

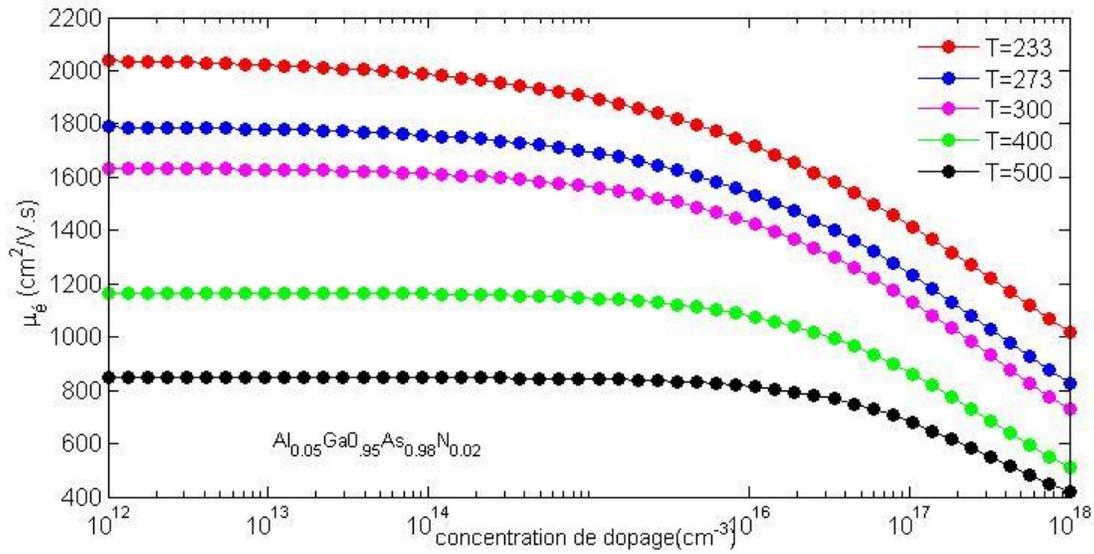


Figure 4. 11: La mobilité des trous en fonction de la température et la concentration du dopage des impuretés

#### 4.2 L'effet de l'incorporation de (N) et de l'(Al) sur la mobilité

La figure (4.12) illustre la variation de la mobilité pour les électrons en fonction des concentrations (N) et (Al) pour une concentration des impuretés=  $10^{15}$  et à  $T=300$  K.

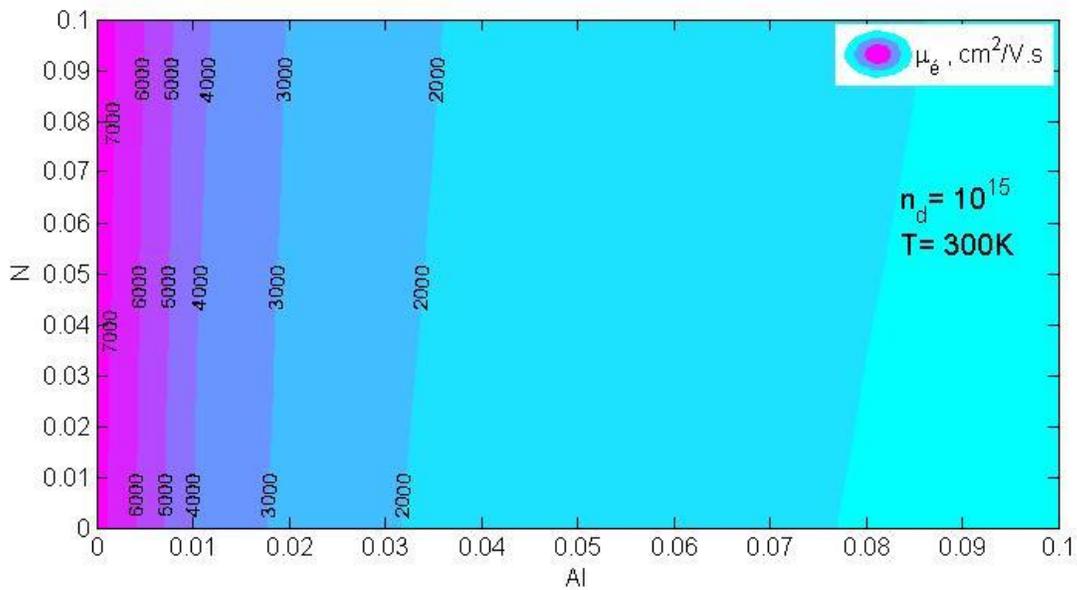


Figure 4. 12 : La mobilité des électrons en fonction des concentrations de (N) et de (Al)

La figure (4.12) montre que la mobilité des électrons diminue avec l'(Al) et croit légèrement avec (N). Cela est dû au fait que dans l'équation (III-75) pour obtenir une mobilité importante il faut avoir un numérateur important et un dénominateur le plus faible possible. Lors de la substitution de (N) à la place de (As), on obtient des composés binaires (GaN à la place de GaAs et AlN au lieu de AlAs). Ces composés sont caractérisés dans le cas de la mobilité des électrons par :

- Pour le GaN par rapport au GaAs on a un numérateur faible et un grand dénominateur.
- Pour le AlN par rapport au AlAs on a grand un numérateur et un petit dénominateur.

L'ensemble de ces paramètres donne une mobilité des électrons qui croit avec la concentration de (N).

Au contraire la substitution de l'(Al) à la place de (Ga), induit des composés binaires (AlAs à la place de GaAs et AlN au lieu de GaN). Ces composés sont caractérisés pour la mobilité des électrons par un faible numérateur et un grand dénominateur. Ceci donne une mobilité des électrons qui décroît avec la concentration de (Al).

De même la figure (4.13) illustre la variation de la mobilité des trous en fonction des concentrations (N) et (Al) pour une concentration des impuretés=  $10^{15}$  et à T=300 K.

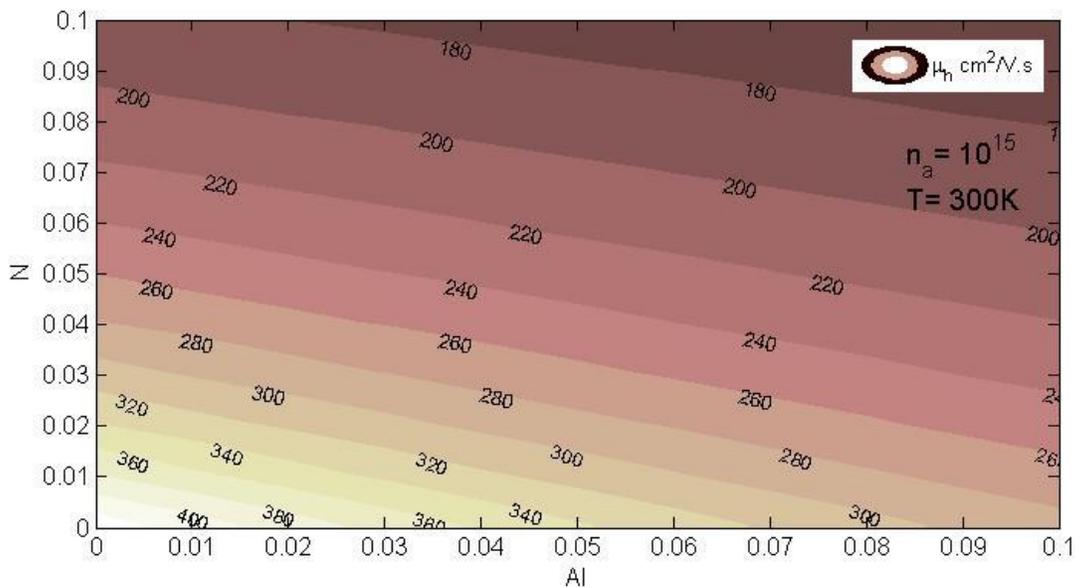


Figure 4. 13: La mobilité des trous en fonction des concentrations de (N) et de l'(Al)

La figure (4.13) montre que la mobilité diminue avec l'(Al), ainsi qu'avec (N). Cela est dû au fait que lors de la substitution de (N) à la place de (As), et de l'(Al) au lieu de (Ga), les composés binaires obtenus en cas de la mobilité des trous donnent des numérateurs plus faibles et des dénominateurs plus grands pour les deux substitutions. Ce qui baisse la mobilité des trous en fonction de (N) et en fonction de (Al).

### 5. Propriétés optiques (le coefficient d'absorption pour la structure $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$ )

Parmi toutes les propriétés optiques on a focalisé notre attention sur le coefficient d'absorption vu son intérêt pour différencier les matériaux surtout dans le domaine photovoltaïque. On a déjà vu que l'absorption se fait lorsque l'énergie de la lumière est supérieure ou égale à celle de la bande interdite [108]. Puisque la structure  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$  déposé sur le Ge présente quatre transitions optiques, selon le modèle BAC,  $E_{c-lh}^-$ ,  $E_{c-hh}^-$ ,  $E_{c-lh}^+$ ,  $E_{c-hh}^+$  elle présente respectivement quatre coefficients d'absorption  $\alpha_{c-lh}^-$ ,  $\alpha_{c-hh}^-$ ,  $\alpha_{c-lh}^+$ ,  $\alpha_{c-hh}^+$  (l'équation (III.74) [110]) dans la figure (4.14). La somme de ces coefficients d'absorption donne  $\alpha_{total}$  le coefficient d'absorption total.

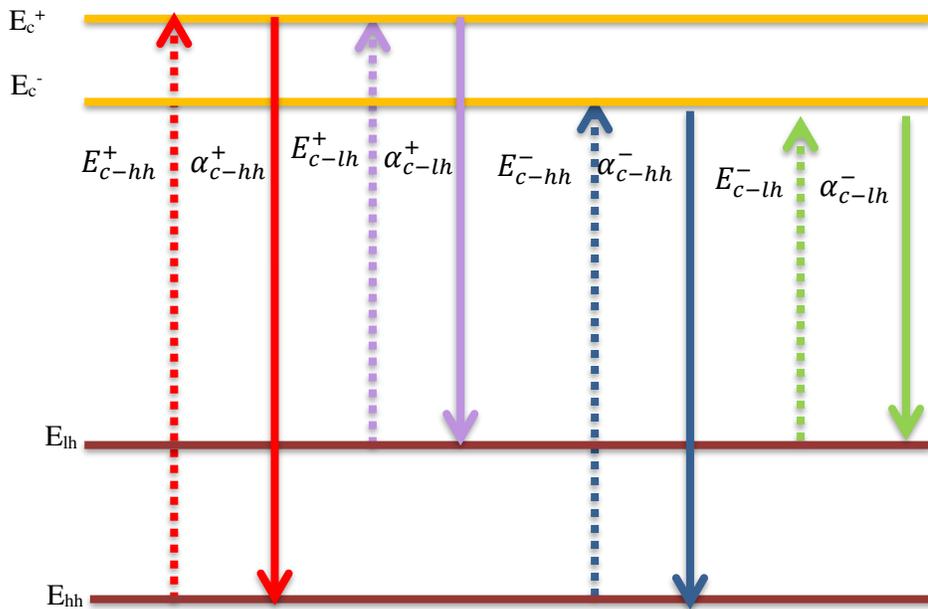


Figure 4. 14 : Le diagramme d'énergie et les coefficients d'absorption pour les quatre transitions

5.1 L'effet de la concentration de (N) et de (Al) sur le coefficient d'absorption pour une énergie incidente donnée:

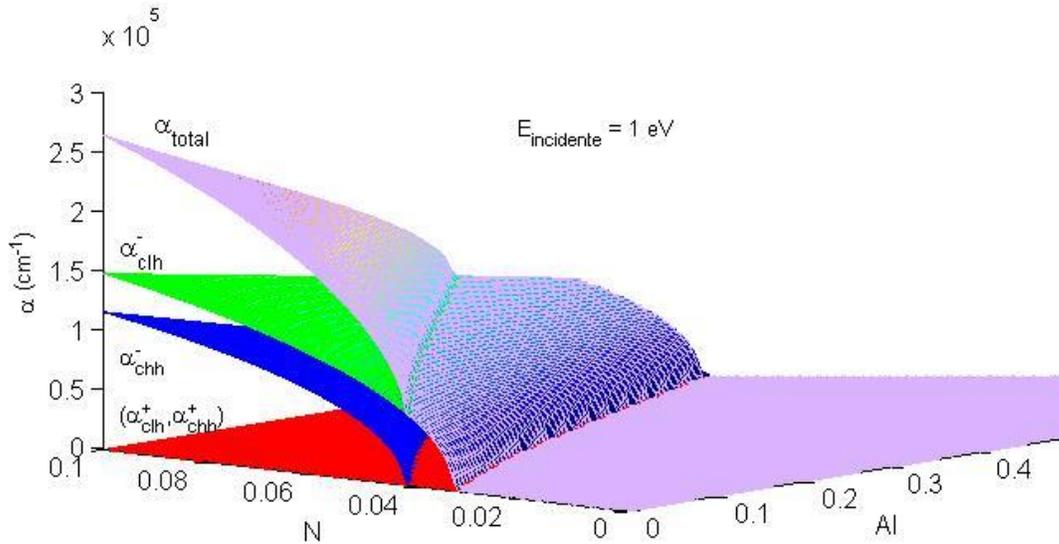


Figure 4. 15 : Les coefficients d'absorption en fonction de (N) et de (Al) pour une  $E= 1 \text{ eV}$

La figure (4.15) présente les coefficients d'absorption des quatre transitions et leur somme  $\alpha_{total}$  en fonction de la concentration de (N) et de (Al) pour une énergie incidente de 1eV. Elle montre que l'on n'a pas d'absorption, pour les transitions  $E_{c-lh}^+$ ,  $E_{c-hh}^+$  ( $\alpha_{c-lh}^+ = \alpha_{c-hh}^+ = 0$ ), car ces énergies sont strictement supérieures à l'énergie incidente de 1 eV quel que soit la concentration de (N) et de (Al).

Par contre, pour la transition  $E_{c-lh}^-$  elle présente l'énergie minimale et la figure (4.16) nous montre les mêmes tendances que pour la figure ci-dessus (4.15). A savoir, l'absorption est nulle pour de faibles concentrations de (N) et de (Al) et ne commence qu'à partir de  $N=3.5\%$  et  $Al = 0\%$ . Elle devient plus importante pour des concentrations plus élevées de (N) car ce dernier baisse la transition  $E_{c-lh}^-$ . En revanche elle diminue avec l'(Al) car ce dernier augmente l'énergie de la bande interdite.

De la même façon, la figure (4.17) montre que l'absorption pour la transition  $E_{c-hh}^-$  est nulle pour de faibles concentrations de (Al) et de (N). Elle ne commence qu'à partir de  $N=4.3\%$  et  $Al = 0\%$ .

Elle augmente avec (N) et diminue avec l'(Al). On constate que la gamme d'absorption pour cette transition est inférieure à celle pour la transition  $E_{c-lh}^-$  car l'énergie  $E_{c-lh}^-$  est inférieure à  $E_{c-hh}^-$ .

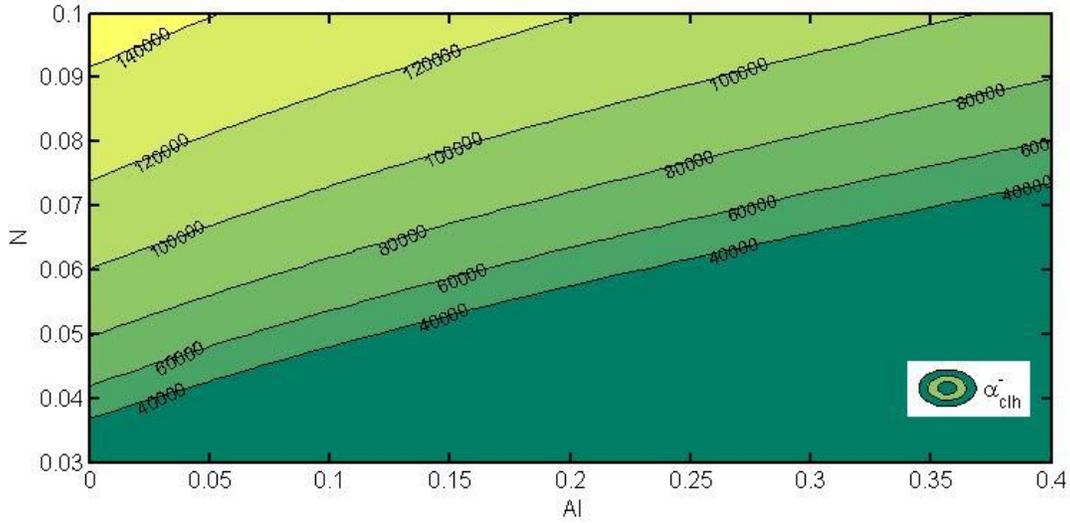


Figure 4. 16 :  $\alpha_{c-lh}^-$  en fonction de la concentration de (N) et de (Al) pour une E=1eV

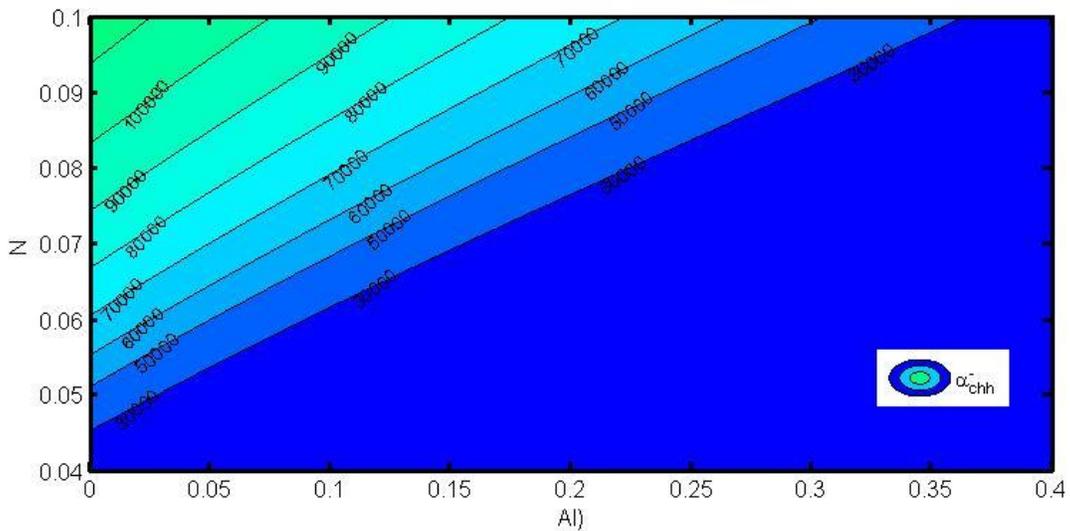


Figure 4. 17 : le coefficient d'absorption  $\alpha_{c-hh}^-$  en fonction de la concentration de (N) et de (Al) pour une E=1eV

Pour des énergies incidentes plus grandes que les transitions  $E_{c-lh}^+, E_{c-hh}^+$ , 2eV à titre d'exemple, on obtient quatre coefficients d'absorption différents et le coefficient d'absorption total comme illustre la figure (4.18) :

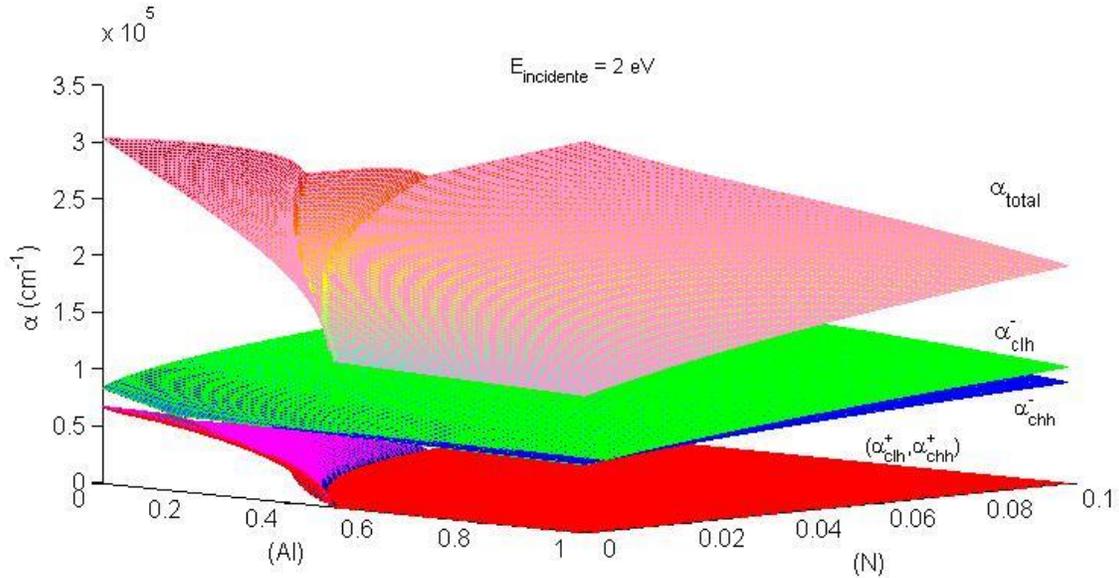


Figure 4. 18 : Les coefficients d'absorption en fonction de la concentration de (N) et de (Al) pour  $E= 2 \text{ eV}$

la figure (4.18) montre qu'on a quatre coefficients d'absorption  $\alpha_{c-lh}^-, \alpha_{c-hh}^-, \alpha_{c-lh}^+, \alpha_{c-hh}^+$  variants en fonction de (N) et de (Al). Chaque coefficient représente respectivement l'absorption propre à l'énergie de transition  $E_{c-lh}^-, E_{c-hh}^-, E_{c-lh}^+, E_{c-hh}^+$  et le cinquième est le coefficient d'absorption total  $\alpha_{\text{total}}$ . On constate que l'absorption est importante pour  $E_{c-lh}^-$  même avec de faibles concentrations de (N) et de (Al) car l'énergie incidente est strictement supérieure à celle de  $E_{c-lh}^-$  quel que soit la concentration de (N) et de (Al). L'absorption pour cette transition continue d'augmenter avec (N), tandis qu'elle diminue légèrement avec l'(Al). Les valeurs de coefficient d'absorption  $\alpha_{c-lh}^-$  sont représentés sur la figure (4.19).

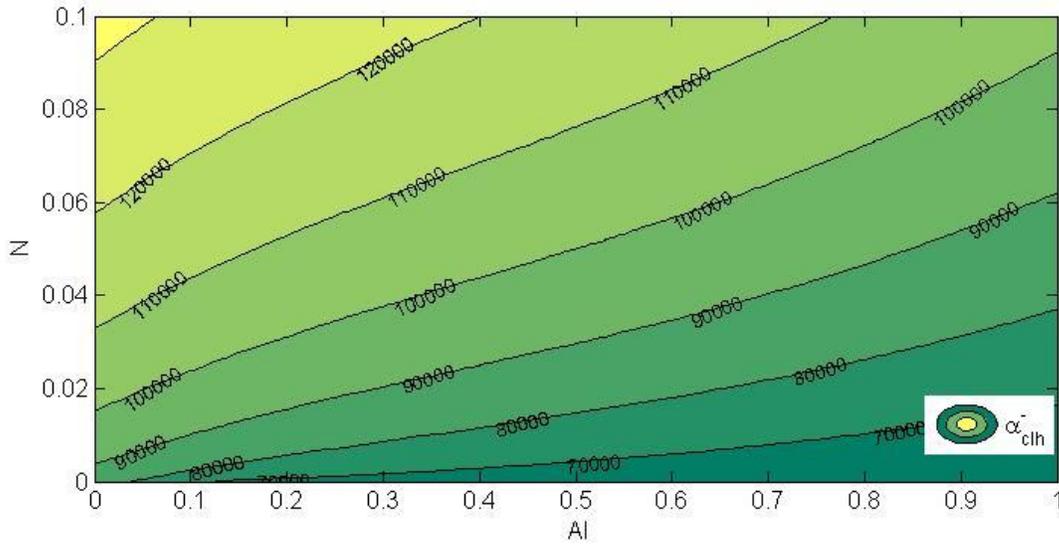


Figure 4. 19:  $\alpha_{c-lh}^-$  en fonction de la concentration de (N) et de (Al) pour E=2V

De la même façon, la figure (4.20) illustre la variation du coefficient d'absorption de transition  $E_{c-hh}^-$  en fonction de la concentration de (N) et de (Al). On constate que l'absorption diminue toujours avec l'(Al), et augmente avec (N). Le coefficient d'absorption  $\alpha_{c-hh}^-$  présente des valeurs un peu plus faibles que celles de  $\alpha_{c-lh}^-$ , car la transition  $E_{c-hh}^-$  est plus importante que  $E_{c-lh}^-$ .

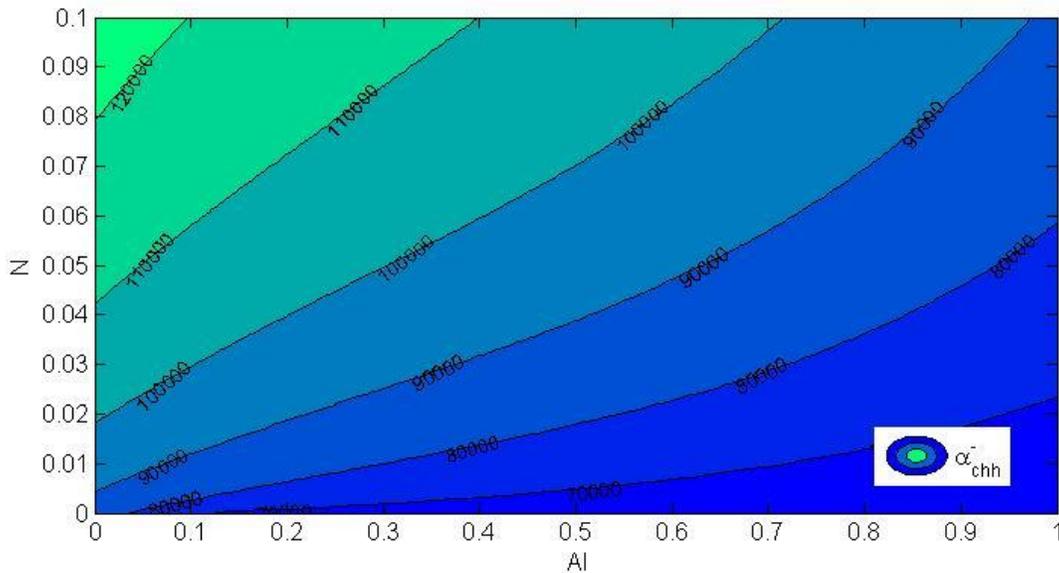


Figure 4. 20 :  $\alpha_{c-hh}^-$  en fonction de la concentration de (N) et de (Al) pour E=2 eV

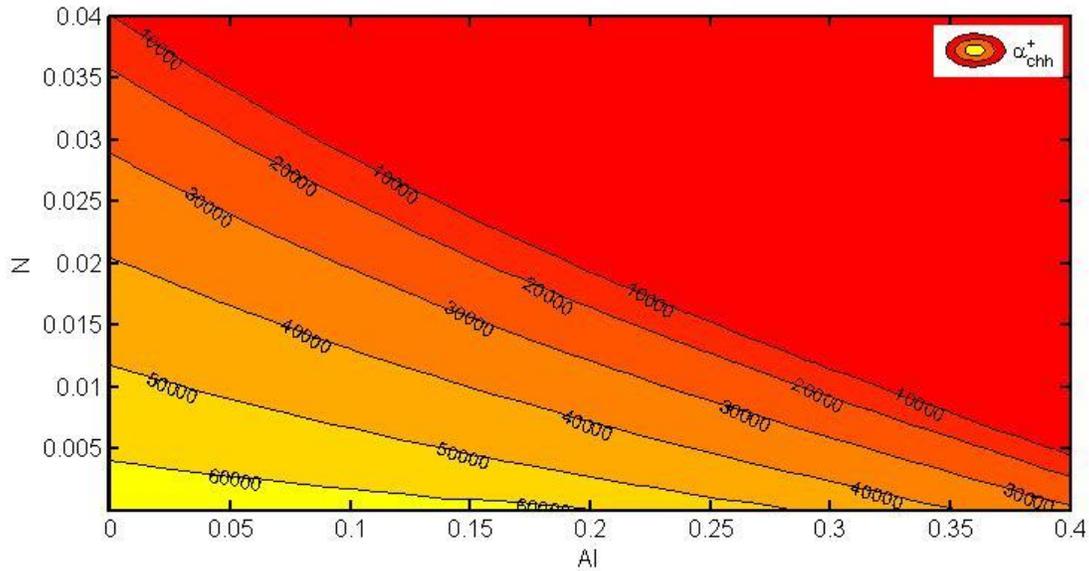


Figure 4. 21:  $\alpha_{c-hh}^+$  en fonction des concentrations N et de (Al) pour E=2 eV

La figure (4.21) représente les valeurs du coefficient d'absorptions  $\alpha_{c-hh}^+$  pour la transition  $E_{c-hh}^+$  en fonction de la concentration de (N) et de (Al).

On constate que l'absorption commence avec des valeurs importantes pour de faibles concentrations de (N) et de (Al). Elles diminuent avec l'augmentation respective des deux concentrations. Selon le modèle BAC, l'écartement entre les deux sous bandes de conduction augmente avec la concentration de (N) vu précédemment à la figure (4.7) et menant aux énergies  $E_{c-hh}^-$   $E_{c-lh}^-$  plus basses et des énergies  $E_{c-hh}^+$  ,  $E_{c-lh}^+$  supérieures à l'énergie incidente E=2eV. Ceci donne une absorption faible voire nulle pour des concentrations élevées de (N). Cette absorption diminue avec (Al), car ce dernier n'induit pas d'éclatement des bandes mais augmente la bande interdite.

De la même façon, la figure (4.22) présente les valeurs du coefficient d'absorptions  $\alpha_{c-lh}^+$  pour la transition  $E_{c-lh}^+$  en fonction de la concentration de (N) et de (Al). On constate que l'absorption commence à une valeur importante puis diminue avec (N) et (Al) pour les mêmes raisons que pour

$\alpha_{c-hh}^+$ . Les valeurs de ce dernier sont inférieures à ceux de  $\alpha_{c-lh}^+$  car  $E_{c-lh}^+$  est plus faible que  $E_{c-hh}^+$

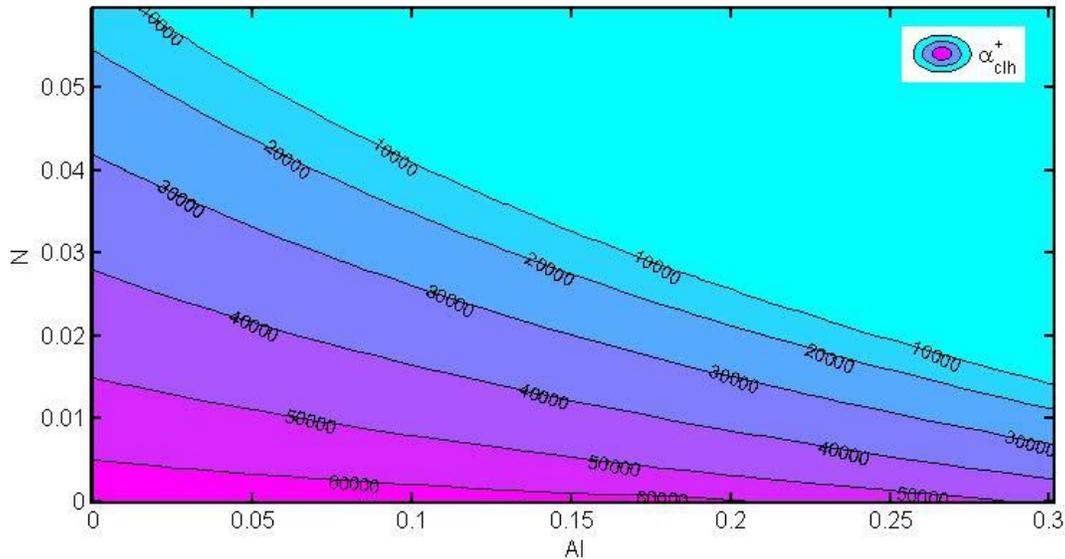


Figure 4. 22:  $\alpha_{c-lh}^+$  en fonction de la concentration de (N) et de (Al) pour E= 2 eV

## 5.2 L'étude du coefficient d'absorption total en fonction des longueurs d'onde $\lambda$ pour les structures à base de l'alliage $Al_{0.01}Ga_{0.99}As_{1-y}N_y$ avec ( $y \leq 10\%$ ) :

La figure (4.23) montre la variation du coefficient d'absorption total  $\alpha_{total}$  en fonction des énergies incidentes pour différentes structures à base de l'alliage  $Al_{0.01}Ga_{0.99}As_{1-y}N_y$  avec ( $y \leq 10\%$ ). Cette limite est obtenue d'après nos résultats de simulation lors de l'étude des propriétés structurales.

Toutes les courbes illustrées dans la figure (4.23) représentent des structures ayant la même concentration de (Al) =1%, mais différentes concentrations de (N) variants entre 1% et 10%. On distingue trois parties sur la figure (4.23), la première pour des énergies incidentes comprises entre 0.5 et 2.225 eV, on constate que l'absorption commence progressivement pour des concentrations de plus en plus petites de (N) (de 10 à 1%), ainsi que l'amplitude de cette absorption augmente avec la concentration de (N). Pour la deuxième partie correspondant à des énergies incidentes comprises entre 2.225 et 3.5 eV, le comportement de l'absorption s'inverse c'est-à-dire aux faibles concentrations de (N) correspondent les plus grandes absorptions. La troisième partie, pour des énergies incidentes supérieures à de 3.5 eV, toutes les structures quelles qu'elles soient la concentration de (N) présentent la même valeur de l'absorption c'est l'amplitude maximal pour la

concentration de (Al) = 1%. La figure montre aussi que chaque courbe présente un point singulier au minimum, après chacun de ce point l'absorption augmente d'une façon remarquable.

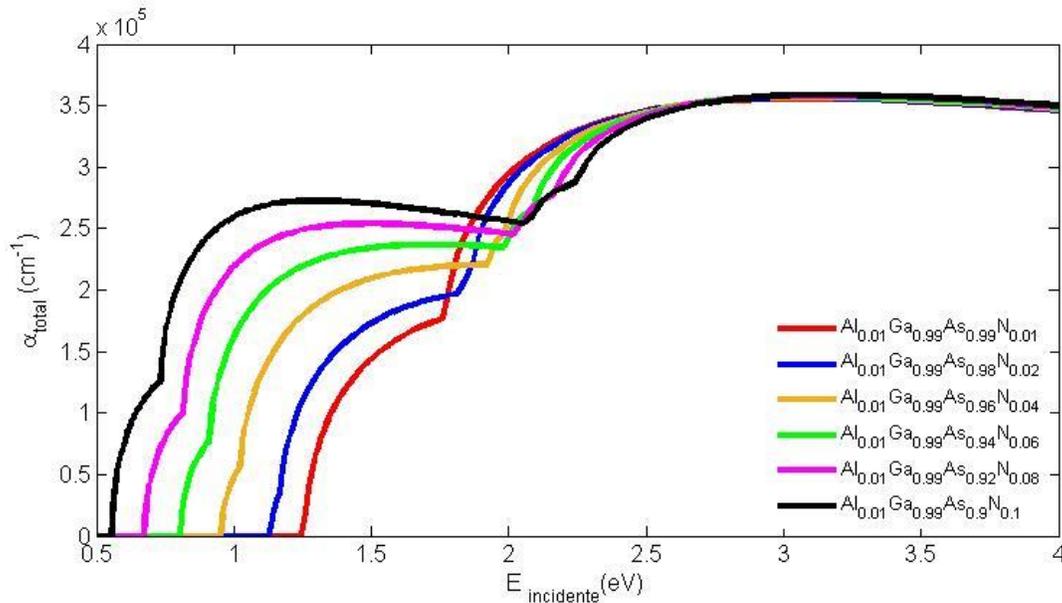


Figure 4. 23 : le coefficient d'absorption total pour des structures à base de l'alliage  $Al_{0.01}Ga_{0.99}As_{1-y}N_y$  en fonction des énergies incidentes avec ( $x=1\%$  et  $1\% \leq y \leq 10\%$ )

Le nombre de ces points singuliers augmente proportionnellement avec la concentration de (N), tel que pour  $N=0.01\%$  (courbe rouge) on constate qu'on a un seul point, tandis que pour  $N=10\%$  (courbe noire) on a trois points singuliers. Ces points et le point de départ de l'absorption s'expliquent par les transitions énergétiques (au nombre de quatre) pour chaque structure, mais le rapprochement de certaines valeurs de transitions énergétiques ne laisse pas apparaître ces points singuliers sur la figure (4.23). Par exemple la structure  $Al_{0.01}Ga_{0.99}As_{0.9}N_{0.1}$  (courbe noire) laisse apparaître trois points singuliers en plus du point de départ d'énergies de 0.5559, 0.734, 2.0793 et 2.2574 correspondants respectivement aux énergies de transition  $E_{c-lh}^-$ ,  $E_{c-hh}^-$ ,  $E_{c-lh}^+$  et  $E_{c-hh}^+$ . Au-delà de cette dernière énergie l'absorption devient maximale.

Pour la même raison, pour les structures  $Al_{0.01}Ga_{0.99}As_{0.92}N_{0.08}$ ,  $Al_{0.01}Ga_{0.99}As_{0.94}N_{0.06}$ ,  $Al_{0.01}Ga_{0.99}As_{0.96}N_{0.04}$  correspondants aux courbes rose, verte, jaune motard, on observe trois points singuliers en plus le point de départ (tableau 4.6). Cependant pour les structures  $Al_{0.01}Ga_{0.99}As_{0.98}N_{0.02}$  et  $Al_{0.01}Ga_{0.99}As_{0.99}N_{0.01}$  représentées respectivement par les courbes bleue et rouge on ne distingue dans la figure (4.23) qu'un point singulier en plus du point de départ. Ceci

est dû au rapprochement d'une part des énergies de transitions  $E_{c-lh}^-$  et  $E_{c-hh}^-$ . Et des énergies de transition  $E_{c-lh}^+$  et  $E_{c-hh}^+$  d'autre part (tableau 4.6). Comme précédemment, l'absorption devient maximale au-delà de l'énergie  $E_{c-hh}^+$ .

Tableau 4. 6: les valeurs de transitions énergétiques et le nombre des points singuliers pour des structures à base de l'alliage  $Al_x Ga_{1-x}As_{1-y}N_y$  (avec  $x=1\%$  et  $1\% \leq y \leq 10\%$ )

La structure	$E_{c-lh}^-$ (Point de départ)	$E_{c-hh}^-$ (Premier point singulier)	$E_{c-lh}^+$ (Deuxième point singulier)	$E_{c-hh}^+$ (Troisième point singulier)	Le nombre de points singuliers + point de départ apparaissent sur la figure (4.23)
$Al_{0.01}Ga_{0.99}As_{0.9}N_{0.1}$ (Courbe noire)	0.5559	0.7340	2.0793	2.2574	3+1
$Al_{0.01}Ga_{0.99}As_{0.92}N_{0.08}$ (Courbe rose)	0.6738	0.8163	2.0390	2.1815	3+1
$Al_{0.01}Ga_{0.99}As_{0.94}N_{0.06}$ (courbe verte)	0.8036	0.9109	1.9897	2.097	3+1
$Al_{0.01}Ga_{0.99}As_{0.96}N_{0.04}$ (Courbe jaune motard)	0.951	1.0234	1.9256	1.998	3+1
$Al_{0.01}Ga_{0.99}As_{0.98}N_{0.02}$ (Courbe bleue)	1.1302	1.1682	1.8323	1.8703	1+1
	Valeurs proches : un seul point singulier		Valeurs proches : un point de départ		
$Al_{0.01}Ga_{0.99}As_{0.99}N_{0.01}$ (Courbe rouge)	1.2461	1.267	1.7604	1.7813	1+1
	Valeurs proches : un seul point singulier		Valeurs proches : : un point de départ		

Pour une valeur plus élevée de la concentration d'Al (=10%), comme illustre la figure (4.24), les absorptions commencent à des énergies incidentes plus importantes car l'ajout de le (Al) provoque l'augmentation de l'énergie de la bande interdite. Ceci nécessite des énergies plus importantes pour le début de l'absorption de ces structures (tableau 4.7).

Tableau 4. 7: les valeurs de transitions énergétiques pour des structures à base de l'alliage  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$  (avec  $x=10\%$  et  $1\% \leq y \leq 10\%$ )

La structure	$E_{c-lh}^-$	$E_{c-lh}^+$	$E_{c-lh}^+$	$E_{c-hh}^+$
$\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.99}\text{As}_{0.99}\text{N}_{0.01}$	1.3326	1.3529	1.8149	1.8352
$\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.99}\text{As}_{0.98}\text{N}_{0.02}$	1.2122	1.2501	1.8913	1.9291
$\text{Al}_{0.01}\text{Ga}_{0.99}\text{As}_{0.96}\text{N}_{0.04}$	1.0297	1.1028	1.9878	2.0610
$\text{Al}_{0.01}\text{Ga}_{0.99}\text{As}_{0.94}\text{N}_{0.06}$	0.8807	0.9895	2.0533	2.1621
$\text{Al}_{0.01}\text{Ga}_{0.99}\text{As}_{0.92}\text{N}_{0.08}$	0.7498	0.8946	2.1033	2.2482
$\text{Al}_{0.01}\text{Ga}_{0.99}\text{As}_{0.9}\text{N}_{0.1}$	0.6310	0.8122	2.1439	2.3251

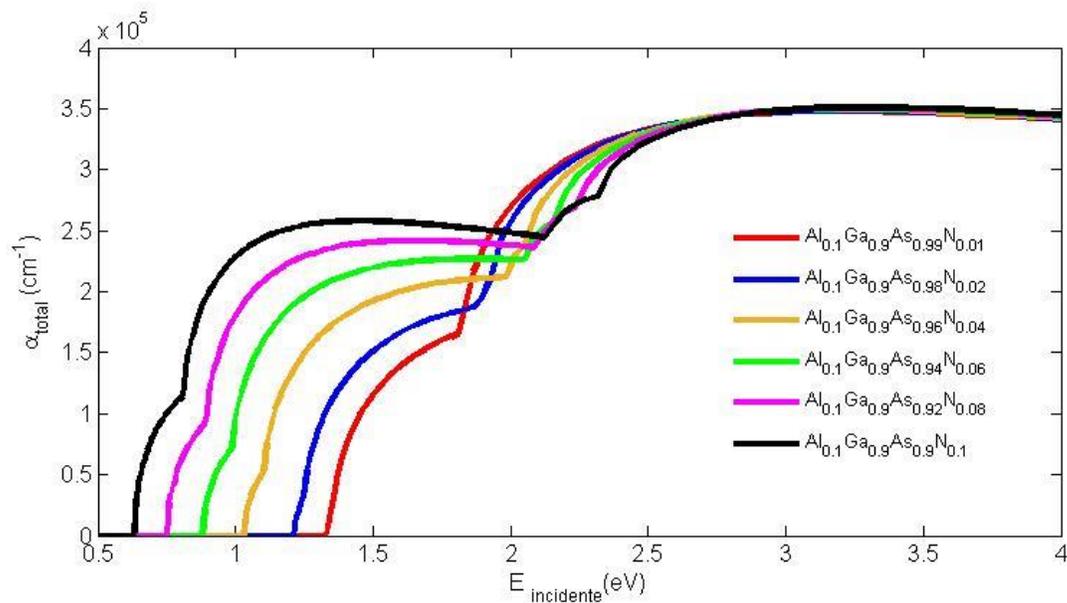


Figure 4. 24 : Les coefficients d'absorption totale des différentes structures à base de l'alliage  $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$  en fonction des énergies incidentes

La figure ci-dessus montre, de la même façon que la figure (4.23), que l'absorption commence en premier lieu pour des concentrations plus élevées de (N) et elles deviennent maximales après une plage d'énergie plus grande. Pour l'(Al), l'absorption ne commence qu'à partie des énergies plus importantes où on peut dire vers des longueurs d'onde plus faibles ( $E = 1.24/\lambda$ ). On constate aussi que l'(Al) baisse légèrement l'amplitude de l'absorption maximale et que cette baisse est plus apparente pour des concentrations plus élevées d'(Al) (=80%) comme illustre la figure (4.25) :

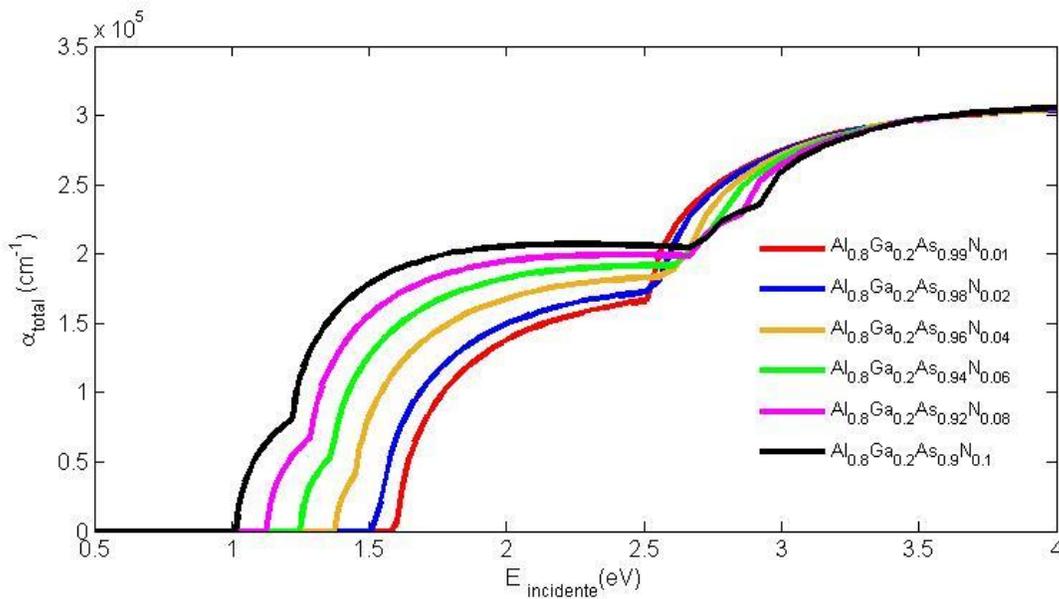


Figure 4. 25 : Les coefficients d'absorption totale des différentes structures à base de l'alliage  $Al_{0.8}Ga_{0.2}As_{1-y}N_y$  en fonction des énergies incidentes

On constate que l'amplitude de l'absorption maximale diminue avec la concentration d'(Al). L'absorption maximale est autour de  $3.6e^5$ ,  $2.8e^5$  pour des concentrations d'(Al) respectivement de 1% et 80%.

Les concentration d'(Al) et de (N) modifient la plage d'absorption et son amplitude. Pour des concentrations élevées d'(Al) on obtient une absorption pour des longueurs d'onde faibles et une amplitude plus baisse, tandis que pour des concentrations plus élevées de (N) on obtient une absorption pour des longueurs d'onde plus grande et une amplitude plus importante. Le choix des concentrations de (Al) et (N) dépend du domaine d'utilisation de la structure.

## 6. Propriétés électriques

Dans cette partie on va étudier les propriétés électriques de la jonction (pn) formée par la superposition des matériaux  $Al_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$  (type n) et  $Al_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$  (type p). Lors de l'identification du taux de dopage ( $N_a$ ,  $N_d$ ) de la jonction, le manque de données pour  $E_c$  et  $E_v$  des différentes structures binaires parents constituant notre structure, nous a obligé de proposer des concentrations du dopages des impuretés.

Les résultats des travaux de BELLAL et al. [146] sur la cellule solaire homo-jonction à base de l'alliage GaAs, montrent que les taux de dopage des impuretés optimaux pour l'alliage GaAs sont  $N_a=5.10^{18}$  et  $N_d= 1.10^{17}$  alors, pour notre étude le GaAs représentant la matrice hôte (où on fait varier les concentrations de (N) et d'(Al)) on a choisi ces mêmes taux de dopage.

L'étude réalisée concerne l' l'efficacité quantique externe (EQE), les caractéristiques  $J(V)$ ,  $P(V)$ ,  $FF$ ,  $I_{cc}$ ,  $V_{co}$  et le rendement de conversion final  $\eta$ .

### 6.1 L'efficacité quantique externe (EQE)

L'étude de EQE est importante à cause de sa relation directe avec le coefficient d'absorption selon l'équation (II-41) [56]. Elle présente la probabilité qu'un photon incident d'énergie  $E$  fourni un électron.

La variation de EQE en fonction des longueurs d'onde  $\lambda$  pour des différentes structures à base de l'alliage  $Al_{0.01}Ga_{0.99}As_{1-y}N_y$  tel que ( $y \leq 10\%$ ) est illustrée dans la figure (4.26). On constate que l'EQE est plus importante pour des concentrations de (N) plus élevées. Pour des concentrations de (N) égales à 1%, 2%, 4%, 6%, 8% et 10% on a une EQE respectivement de 52%, 53%, 60%, 63%, 66% et 67%. Cette dernière présente aussi une mi-hauteur proportionnelle à la concentration de (N) ( tableau (4.8)):

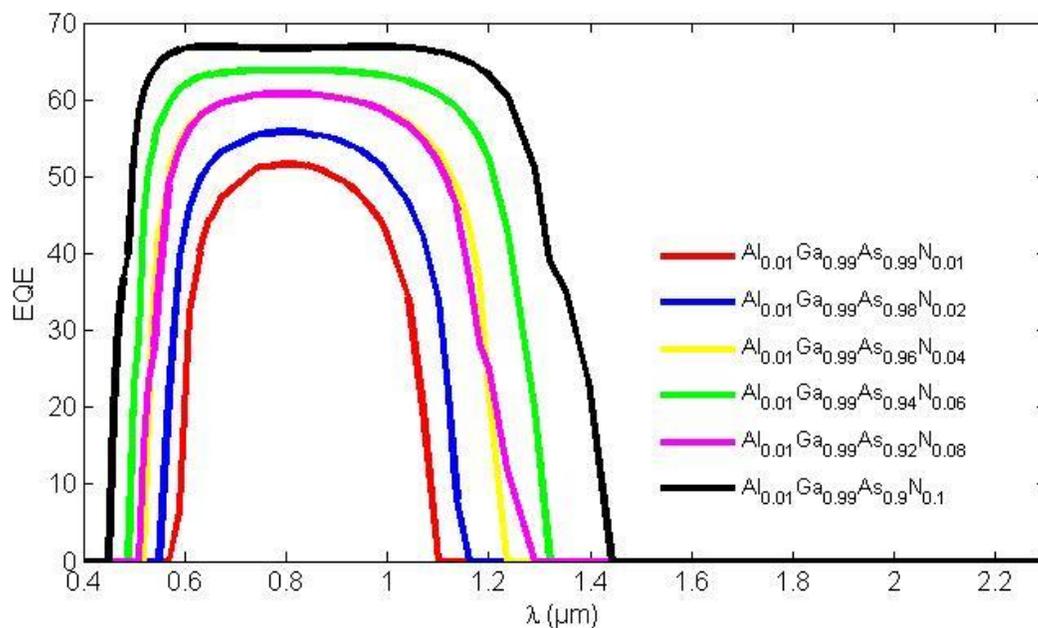


Figure 4. 26 : L'efficacité quantique externe en fonction de  $\lambda$  pour différentes structures à base de l'alliage  $\text{Al}_{0.01}\text{Ga}_{0.99}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$

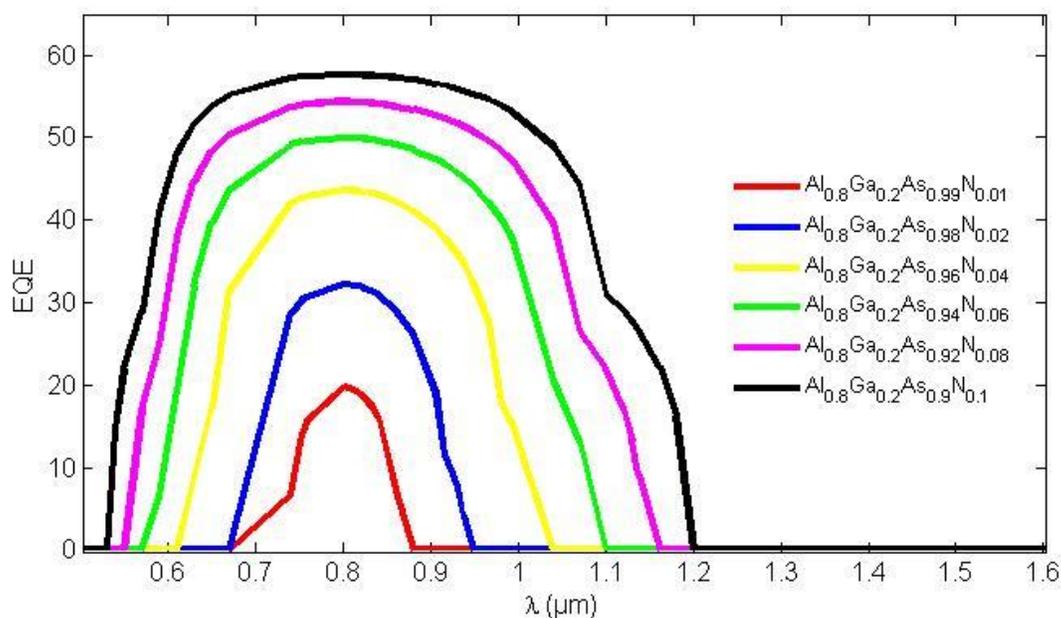


Figure 4. 27: L'efficacité quantique externe (EQE) en fonction de  $\lambda$  pour différentes structures à base de l'alliage  $\text{Al}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$

La figure (4.27) illustre la variation de EQE en fonction de ( $\lambda$ ) pour différentes structures à base de l'alliage  $Al_{0.8}Ga_{0.2}As_{1-y}N_y$  (avec  $y \leq 10\%$ ). Elle montre un même type de variation que la figure précédente (4.27). Et la comparaison des valeurs de l'EQE pour (Al) =1% et 80% (avec une même concentration de (N)) montre une diminution de façon significative de l'amplitude de l'EQE et les mi-hauteurs pour toutes les structures (tableau 4.8) car l'ajout d'(Al) baisse l'absorption et donc l'EQE.

Tableau 4. 8: les valeurs de l'efficacité quantique externe EQE pour des structures à base de l'alliage  $Al_x Ga_{1-x}As_{1-y}N_y$  (avec  $x=1, 80\%$  et  $1\% \leq y \leq 10\%$ )

		N=1%	N=2%	N=4%	N=6%	N=8%	N=10%
Al=1%	EQE <sub>max</sub> (%)	52	53	60	63	66	67
	$\lambda_1$	0.61	0.58	0.54	0.51	0.48	0.47
	$\lambda_2$	1.06	1.11	1.19	1.26	1.33	1.36
	$\Delta\lambda$	0.45	0.53	0.65	0.75	0.85	0.89
	EQE <sub>max</sub> /2 (%)	26	26.5	30	31.5	33	33.5
Al=80%	EQE <sub>max</sub> (%)	20	32	44	50	55	58
	$\lambda_1$	0.75	0.71	0.65	0.62	0.60	0.57
	$\lambda_2$	0.85	0.91	0.97	1.02	1.07	1.12
	$\Delta\lambda$	0.1	0.2	0.32	0.4	0.47	0.55
	EQE <sub>max</sub> /2 (%)	10	16	22	25	27.5	24

## 6.2 La caractéristique J(V)

La caractéristique J(V) est la propriété la plus importantes pour les cellules PV sachant que le rendement de conversion dépend du courant collecté. Son amélioration passe par l'augmentation du courant collecté qui lui-même dépend de l'augmentation de l'absorption à travers un choix adéquat des matériaux.

La figure (4.28) illustre la caractéristique J(V) pour différentes structures à base de l'alliage  $Al_{0.8}Ga_{0.2}As_{1-y}N_y$  (avec  $y \leq 10\%$ ).

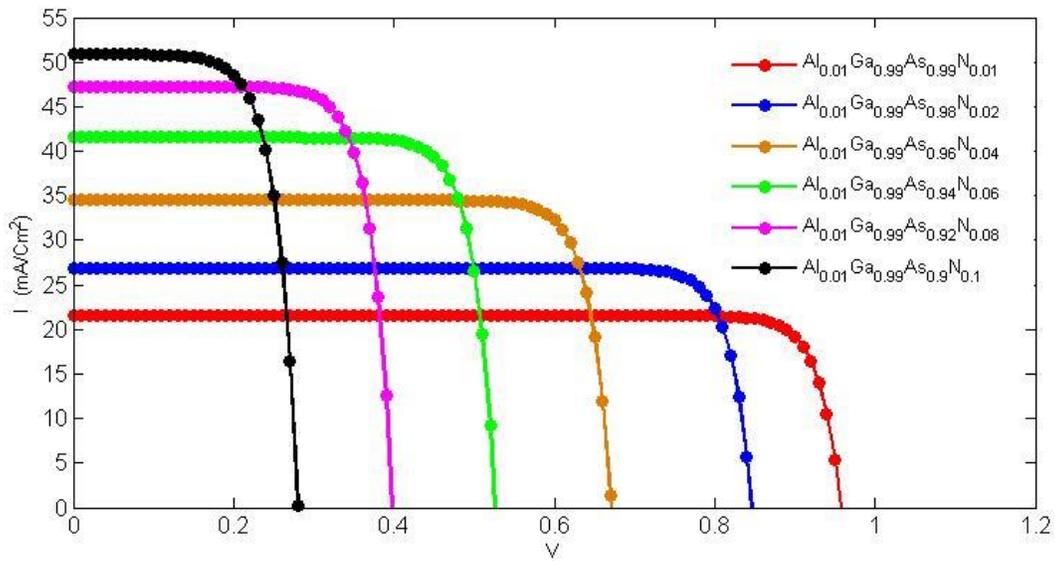


Figure 4. 28 : La caractéristique J(V) pour différentes structures à base de l'alliage  $Al_{0.01}Ga_{0.99}As_{1-y}N_y$  ( $y \leq 10\%$ )

La figure (4.28) montre que pour des concentrations de plus en plus élevées de (N) les structures présentent un courant de courte circuit ( $I_{cc}$ ) plus important et une tension de circuit ouverte ( $V_{co}$ ) plus faible. Donc le (N) augmente le  $I_{cc}$  et baisse la  $V_{co}$ .

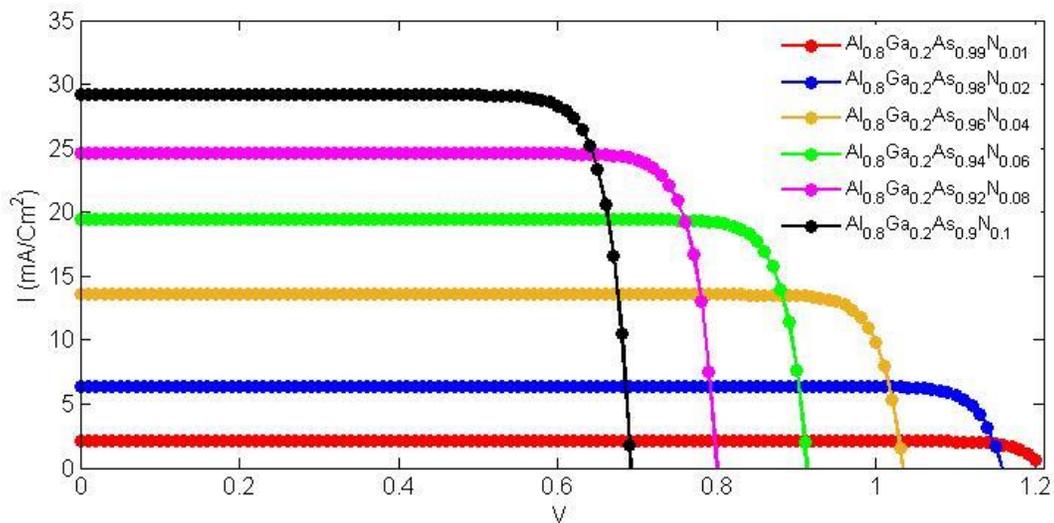


Figure 4. 29: La caractéristique J(V) pour différentes structures à base de l'alliage  $Al_{0.8}Ga_{0.2}As_{1-y}N_y$  ( $y \leq 10\%$ )

La comparaison entre la figure (4.28) pour une concentration d'(Al) égale à 1% et la figure (4.29) pour une concentration d'(Al) égale à 80% montre que l'(Al) a un effet inverse par rapport au (N) où l'on a une baisse de  $I_{cc}$  et une augmente de  $V_{co}$ . Ces résultats sont justifiés car l'augmentation de la concentration de (N) abaisse l'énergie de la bande interdite et par conséquent la  $V_{co}$  baisse. La bande interdite et la  $V_{co}$  sont reliés par une relation de proportionnalité. Aussi l'augmentation de la concentration de (N) augmente l'absorption même pour de faibles énergies incidentes. Ceci provoque une croissance considérable de la valeur de  $I_{cc}$ . Tous ces phénomènes sont inversés pour l'(Al).

### 6.3 La puissance P(V) :

La Figure (4. 30) montre que la puissance délivrée est nulle pour un voltage nul ( $v=0$ ), puis elle monte par la suite avec la tension jusqu'à une valeur maximale  $P_{max}$ , ensuite elle diminue jusqu'à zéro pour une tension  $V_{co}$  différente de zéro.

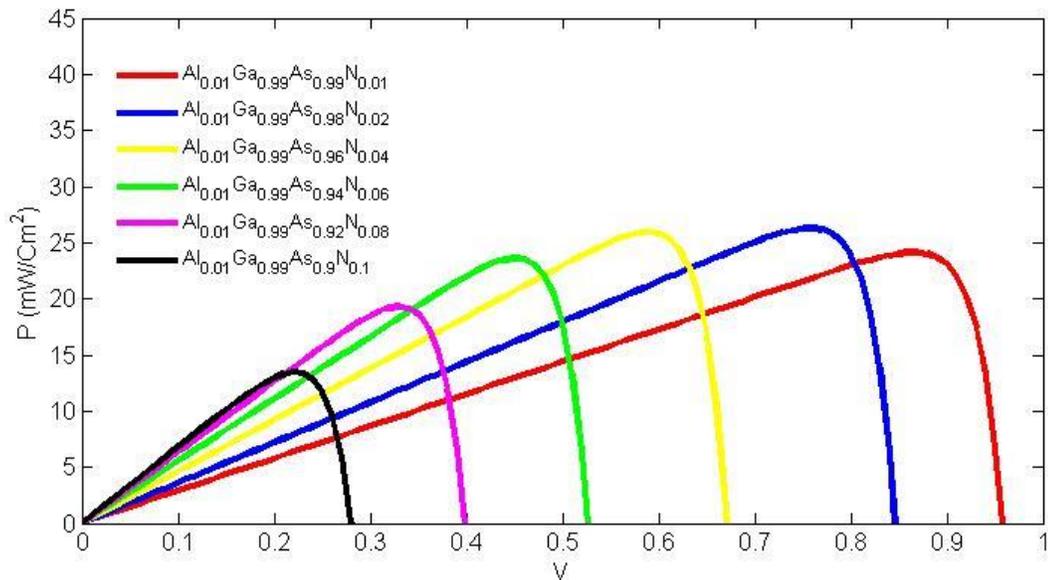
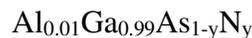


Figure 4. 30: La puissance en fonction de la tension pour différentes structures à base de l'alliage



L'amplitude des points des puissances maximales  $P_{max}$  des différents structures à base de l'alliage  $Al_{0.01}Ga_{0.99}As_{1-y}N_y$ , varie en fonction de (N) telle que leur lieu géométrique suit une forme

parabolique (elle augmente avec (N) jusqu'à une valeur maximale puis elle diminue avec des concentrations plus élevées).

La figure (4.31) illustre la variation de la puissance en fonction de V pour différentes structures à base de l'alliage  $Al_{0.8}Ga_{0.99}As_{1-y}N_y$ . En augmentant la concentration d'(Al) de 1% à 80% l'amplitude de la puissance diminue alors que la  $V_{co}$  augmente.

La forme de la courbe de chacune des structures est la même que précédemment avec la même remarque pour le lieu géométrique des puissances maximales.

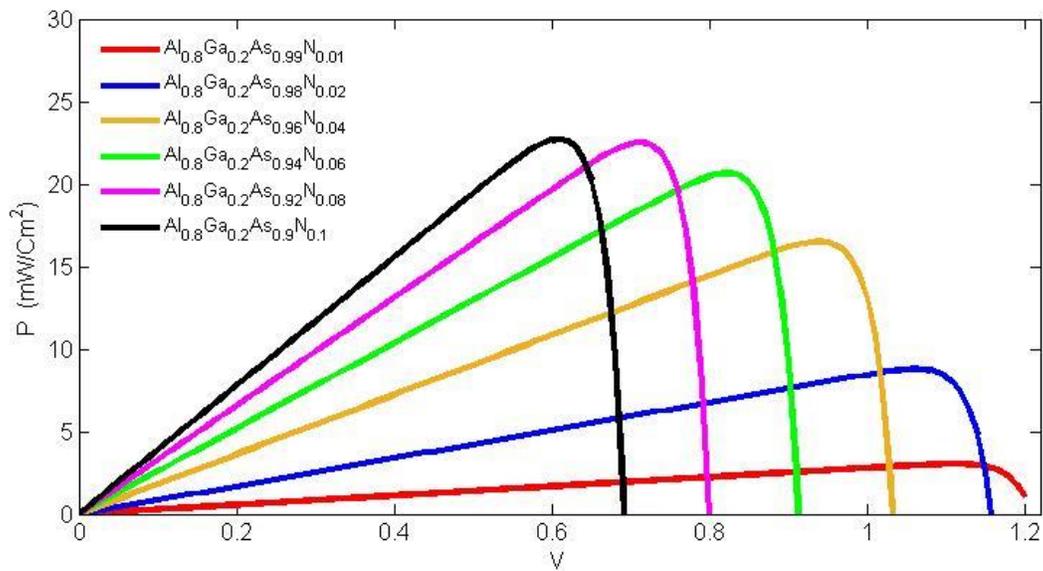


Figure 4. 31 : La puissance (P) en fonction de de la tension (V) pour différentes structures à base de l'alliage  $Al_{0.8}Ga_{0.99}As_{1-y}N_y$

Ces valeurs de la puissance maximale (les  $P_{max}$ ) pour des différentes concentrations de (N) et d'(Al) sont illustrées dans la figure (4.32).

Cette figure explicite bien la nature parabolique de la courbe des lieux géométriques de la puissance maximale en fonction de la concentration de (N) et d'(Al). On constate que les valeurs les plus importantes de  $P_{max}$  sont comprises entre les concentrations de 1et 11% pour l'(Al) et entre

1 et 5% pour (N). Pour ces dernières concentrations, la figure (4.33) nous montre les lieux géométriques de la puissance maximale des différentes structures.

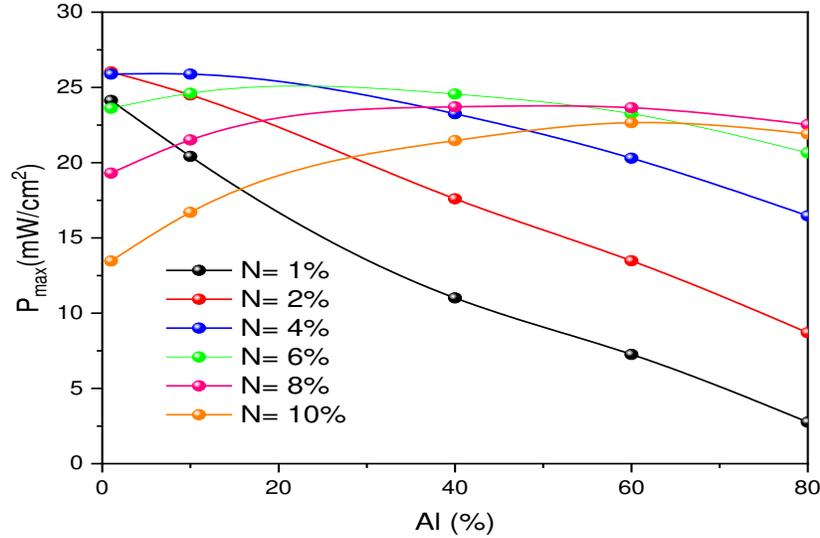


Figure 4. 32: Les lieux géométriques des puissances maximales pour différentes des structures à base de l'alliage  $Al_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$  ( $y \leq 10\%$ )

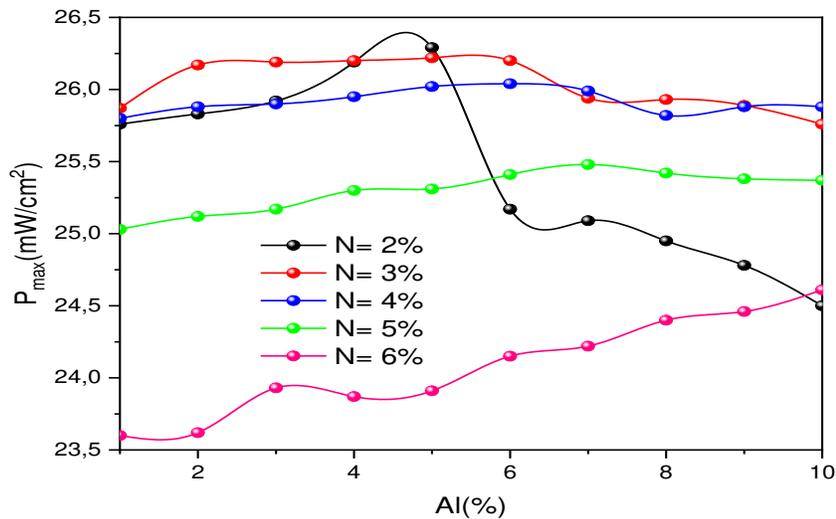


Figure 4. 33: Les lieux géométriques de la puissance maximale pour différentes structures à base de l'alliage  $Al_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$  ( $1 \leq x \leq 10\%$  et  $2 \leq y \leq 4\%$ )

De la figure précédente on en déduit :  $MAX(P_{max}) = 26.29 \text{ (mW/cm}^2\text{)}$  pour la structure  $Al_{0.05}Ga_{0.95}As_{0.98}N_{0.02}$ .

Cette même valeur correspond à celle du rendement de conversion final selon l'équation (II-45) pour une puissance lumineuse incidente ( $P_{inc}$ ) égale à  $100 \text{ (mW/cm}^2\text{)}$ .

Ceci nous amène à choisir l'alliage  $Al_{0.05}Ga_{0.95}As_{0.98}N_{0.02}$  comme structure optimale donnant un rendement de conversion final autour de 26.3%.

## 7. L'étude des propriétés optoélectroniques de la structure $Al_{0.05}Ga_{0.95}As_{0.98}N_{0.02}$

Avant de terminer notre travail, nous pensons qu'une partie de notre objectif est atteint. A savoir, la détermination des concentrations optimales de (N=2%) et de (Al=5%) dans la structure  $Al_{0.05}Ga_{0.95}As_{0.98}N_{0.02}$ . Ceci nous permettra de re-évaluer les propriétés optoélectroniques précédentes (structurales, optiques, de transport et électriques) sous les conditions :  $N_a=5.10^{18}$ ,  $N_d= 1.10^{17}$  à  $T=300 \text{ K}$  et une pression ambiante. :

### 7.1 Les propriétés structurales :

En effectuant les calculs précédents en imposant les valeurs optimales des concentrations de (N) et (Al) on obtient pour notre structure optimale :

Le paramètre de maille	La contrainte	L'épaisseur critique
5.6304 Å	0.004 = (0.4%)	1028 Å

Dans le cadre du modèle BAC, le diagramme de bande d'énergie (quatre transitions énergétiques) et les décalages énergétiques sont illustrés dans la figure (4.34) :

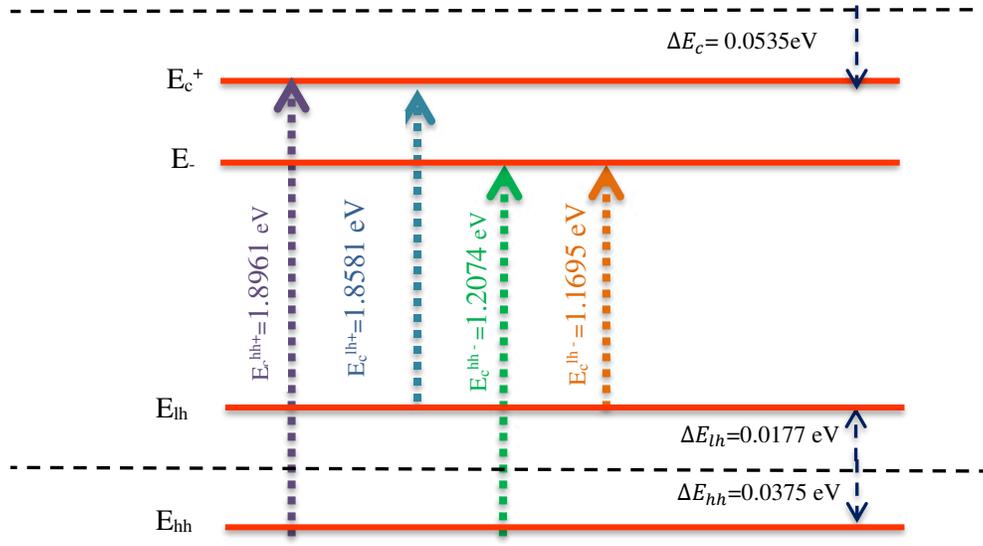


Figure 4. 34: Diagramme d'énergie pour la structure  $\text{Al}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{As}_{0.98}\text{N}_{0.02}$

### 7.2 Les caractéristiques optiques (les coefficients d'absorption)

La figure (4.35) illustre la variation des coefficients d'absorption de notre structure optimale  $\text{Al}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{As}_{0.98}\text{N}_{0.02}$  en fonction de l'énergie des photons incidents.

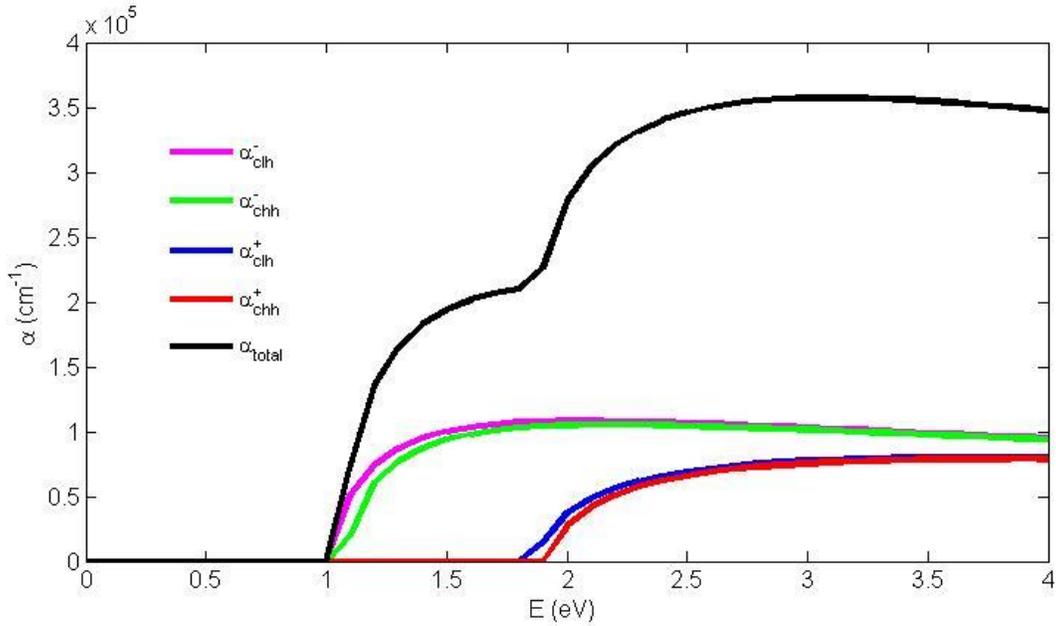


Figure 4. 35: Coefficients d'absorption de la structure  $\text{Al}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{As}_{0.98}\text{N}_{0.02}$  en fonction de l'énergie du photon incident

On note que l'absorption commence à partir d'une valeur  $E \sim 1$  eV correspond à l'énergie de transition  $E_{ch^-}$ . L'absorption totale présente trois points singuliers pour des énergies autour de 1.2, 1.8 et 1.9 eV correspondant respectivement aux énergies de transitions  $E_{ch^-}$ ,  $E_{ch^+}$  et  $E_{chh^+}$ . À partir de cette dernière énergie l'absorption totale présente un pic puis elle continue de diminuer progressivement avec l'énergie du photon incident. La plage d'absorption pour cette structure optimale comprend le domaine visible, et l'infrarouge proche comme indique la figure (4.36).

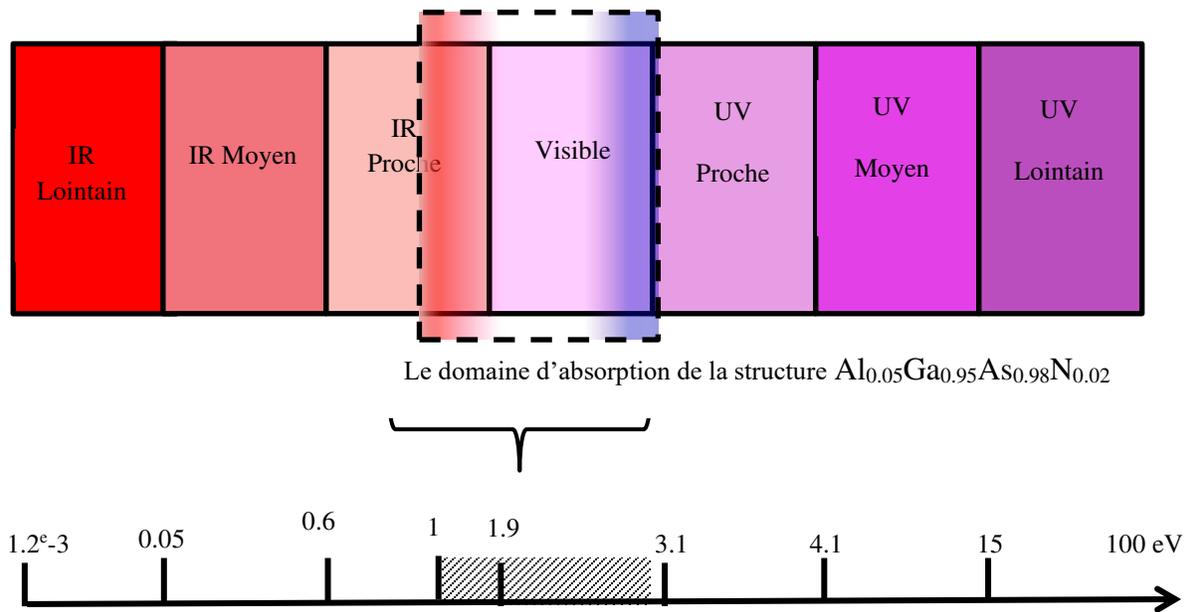


Figure 4. 36: Domaine d'absorption de la structure  $Al_{0.01}Ga_{0.99}As_{0.97}N_{0.03}$

### 7.3 Les propriétés de transport :

La figure (4.37) illustre la variation de la mobilité des trous et des électrons pour notre structure optimale  $Al_{0.05}Ga_{0.99}As_{0.97}N_{0.02}$  en fonction de la température pour des concentrations du dopage de  $N_a=5.10^{18}$  et de  $N_d= 10^{17}$ . à  $T=300$  K on a :

Mobilité des électrons	Mobilité des trous
$\sim 1138 \text{ cm}^2 / V. s$	$\sim 33.5 \text{ cm}^2 / V. s$

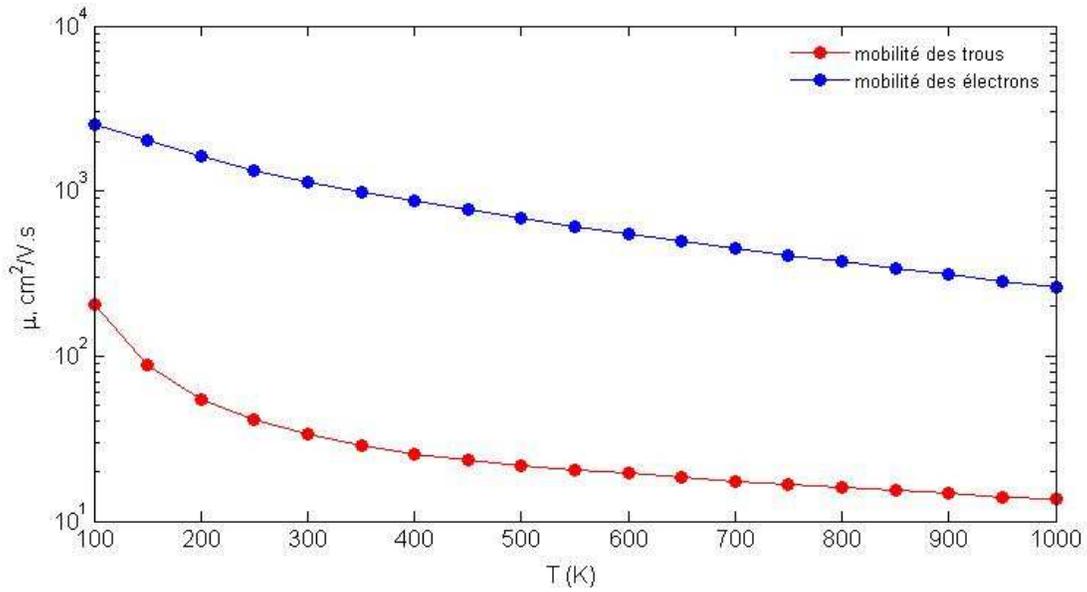


Figure 4. 37: La mobilité des porteurs de charges pour la structure  $\text{Al}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{As}_{0.98}\text{N}_{0.02}$  en fonction de la température

#### 7.4 Les propriétés électriques de la cellule formée par la structure optimale :

La figure (4.38) résume les caractéristiques  $J(V)$  et  $P(V)$  obtenues pour notre structure :

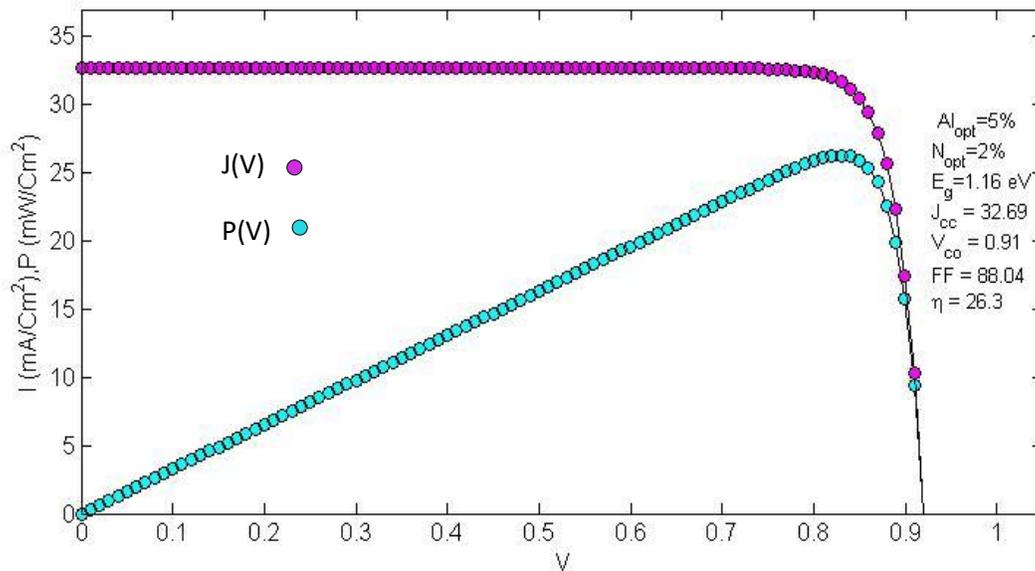


Figure 4. 38: Les caractéristiques électriques de la structure  $\text{Al}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{As}_{0.98}\text{N}_{0.02}$  en fonction de la tension

Notre cellule formée par la structure optimale  $\text{Al}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{As}_{0.98}\text{N}_{0.02}$  déposé sur le Ge nous donne les caractéristiques  $J(V)$  et  $P(V)$  sous forme de « fiche signalétique » :

$I_{cc}$	$V_{co}$	FF	$\eta$
32.69	0.91	88.04	26.29%

### Conclusion

Dans ce chapitre on a appliqué les modèles physiques détaillés dans les chapitres précédents dans l'objectif d'étudier l'impact de l'incorporation de (N) et (Al) sur les propriétés optoélectroniques de la structure  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$  déposé sur le Ge et de déterminer les concentrations optimales des éléments constituant la structure. Ces dernières nous permettent de recalculer les propriétés optoélectroniques de cette structure. L'étude des propriétés structurales montre que l'énergie de la bande interdite augmente légèrement avec (Al) mais diminue considérablement avec (N). La concentration élevée en N (au-delà de 10%) engendre une contrainte importante (supérieure à 2%) alors que cette dernière est légèrement influencée par l'(Al). L'étude des propriétés de transport montre que la mobilité des électrons décroît avec la température, la concentration du dopage au-delà de  $10^{16}$  et avec (Al) mais elle augmente avec (N). Concernant la mobilité des trous, elle diminue avec tous les paramètres précédents. L'étude des propriétés optiques montre que l'amplitude de coefficient d'absorption diminue avec (Al), et croit avec le (N), mais l'ajout de (Al) et de (N) modifient la plage d'absorption tel que pour des concentrations élevées de (Al) on obtient une absorption pour des longueurs d'onde faibles, tandis que pour des concentrations plus élevées de (N) on obtient une absorption pour des longueurs d'onde plus grande. Le choix des concentrations de (Al) et (N) dépend du domaine d'utilisation de la structure. L'étude des propriétés électriques qui se base sur l'étude des propriétés optiques montre que (Al) abaisse le courant de court-circuit mais augmente la tension de circuit ouverte contrairement au (N) qui abaisse la tension de circuit ouverte mais augmente le courant court-circuit. Le produit de ces deux paramètres est optimal pour la combinaison de (Al = 5% et N = 2%) qui nous donne les meilleures caractéristiques optoélectroniques avec un rendement de 26,29%.

## CONCLUSION GÉNÉRALE

Depuis le début de la découverte de l'effet PV et de la réalisation de la première cellule en 1930, la technologie n'a cessé d'améliorer le rendement de ce type de cellules PV dites « mono-jonction ». Après une lente maturation elles ont atteint leurs limites théoriques du rendement de l'ordre de 29%. Dès le début de cette aventure il est apparu une restriction dans leur absorption du spectre solaire. Ce déficit est surmonté par la conception de cellules PV à plusieurs couches dites « multijonction » où chacune d'elles absorbe à une plage propre d'absorption qui se recouvrent. Cette dernière qui dépend fortement des caractéristiques optoélectroniques des matériaux, détermine la quantité du photocourant généré dans la cellule et donc le rendement de conversion final. La conception de ces nouvelles cellules a été réservé dès le début aux applications spatiales (prix excessivement chère) mais le développement dans le domaine de la physique des matériaux à progressivement permis la démocratisation de l'utilisation de ces multijonction pour des applications terrestres sophistiquées en diminuant le coût de la production) en attendant leurs applications dans le domaine grand publique.

Parmi les matériaux qui attirent l'attention des chercheurs à cause de leurs propriétés unique pour le domaine PV, les structure III-V-N. Ces alliages présentent l'inconvénients de la non incorporation de (N) d'une façon significative et homogène. D'où l'ajout de l'(Al) qui joue un rôle primordial dans l'incorporation de (N) d'après les études récentes.

Dans le cadre de cette thèse, nous avons étudié l'effet de l'incorporation de (N) et (Al) sur les propriétés de l'alliage  $Al_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$  pour des applications photovoltaïques. L'objectif finale de ce travail été de déterminer les concentrations optimales de telle sorte qu'on obtienne une énergie de bande interdite proche de 1 eV, avec une contrainte minimale et un rendement le plus élevé possible pour la cellule formée par cette structure.

Après l'étude de plusieurs modèles théoriques pour la simulation des propriétés optoélectroniques des différentes structures y compris la nôtre. Et vu l'indisponibilité de plusieurs paramètres empiriques indispensables à la simulation, on a opté pour l'utilisation de l'interpolation linéaire entre les différentes structures binaires parents des structures plus complexes comme méthode de

calcul. Tous nos résultats de simulation sont validés pour les structures ternaires comme les structures quaternaires avant d'être utilisés pour notre structure  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$ .

Les résultats de simulation pour cette dernière structure des propriétés électroniques, structurales, optiques, électriques et les propriétés de transport montrent que l'énergie de la bande interdite augmente légèrement avec l'(Al), mais diminue considérablement avec (N). Cette même bande interdite est influencée par les paramètres extérieurs tel que la température qui engendre une diminution et la pression qui provoque une augmentation de cette énergie de gap.

La concentration élevée en (N) imposant une contrainte élevée, cette dernière est légèrement influencée par la concentration en (Al). La mobilité des électrons décroît avec la température, une concentration du dopage des impuretés au-delà de  $10^{16}$  et avec l'(Al), mais elle augmente avec (N), tandis que la mobilité des trous diminue avec tous les paramètres précédents. Enfin l'amplitude du coefficient d'absorption diminue avec l'(Al) d'une part mais ce dernier ainsi que (N) modifient l'intervalle d'absorption tel que pour des concentrations élevées d'(Al) on obtient une absorption pour des longueurs d'onde faibles, tandis que pour des concentrations plus élevées de (N) on obtient une absorption pour des longueurs d'onde plus grande. Donc le choix des concentrations de (Al) et (N) dépend du domaine d'utilisation de la structure. Concernant les propriétés électriques l'augmentation de la concentration d'(Al) provoque une diminution de l'amplitude de la puissance, du courant de court circuit ( $I_{cc}$ ) mais il augmente la tension de circuit ouverte ( $V_{co}$ ), contrairement l'augmentation de la concentration de (N) engendre un croisement de l'amplitude de la puissance et le ( $I_{cc}$ ) avec une diminution de la valeur de ( $V_{co}$ ).

Le produit de ces deux paramètres est optimal pour des concentrations de (Al) = 5% et (N) = 2% menant à la structure  $\text{Al}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{As}_{0.98}\text{N}_{0.02}$  lui correspondant un rendement de 26,29%. Elle est caractérisée par un paramètre de maille de 0.56304 nm proche de celui du (Ge) = 0.56512 nm entraînant une faible contrainte autour de 0.4%. Ceci permis l'empilement verticale des autres structures (pour des cellules multijonction). Une épaisseur critique de 102.8 nm, une énergie de gap autour de 1.1695 eV et finalement un rendement de conversion de 26.29 %.

Il est important de noter que ce travail n'est qu'une initiation à la recherche et que ce travail sera suivi par d'autres travaux utilisant ces résultats pour la conception d'autres cellules multi jonctions optimales fabriquées à partir de quatre jonctions ou plus, ainsi que cette structure peut

être utiliser dans des diverses applications tel que médecine, la télécommunication (fibres optiques) ....

Ainsi il est important de dire que la modélisation et la simulation sont des outils très utiles permettant d'économiser beaucoup de temps, d'argent et qui marche en parallèle avec l'expérience.

## PUBLICATIONS

- [1] Benahmed, A., Aissat, A., Bouzaki, M., Bestam, R., Chaouchi, S., & **Bellil, W.** (2014). Optical transitions in quantum dots. *Journal of New Technology and Materials*, 277(1747), 1-3.
- [2] Aissat, A., Ghomrani, M. A., **Bellil, W.**, Benkouider, A., & Vilcot, J. P. (2015). The doping effect on the properties of zinc oxide (ZnO) thin layers for photovoltaic applications. *International Journal of Hydrogen Energy*, 40(39), 13685-13689.
- [3] **Bellil, W.**, Aissat, A., & Vilcot, J. P. (2018). Performance of the structure  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_1\text{-yNy}$  déposé sur le Ge for solar cell applications. *Optik*, 171, 803-808.
- [4] Aissat, A., Bestam, R., Nacer, S., **Bellil, W.**, & Vilcot, J. P. (2018, December). Improvement the Efficiency of Solar Cell Based on GaAsNSb/Si. In *2018 6th International Renewable and Sustainable Energy Conference (IRSEC)* (pp. 1-4). IEEE.
- [5] **Bellil, W.**, Aissat, A., & Vilcot, J. P. (2018, December). Substrate Effect on InGaN Optoelectronic Properties. In *2018 6th International Renewable and Sustainable Energy Conference (IRSEC)* (pp. 1-4). IEEE.
- [6] **Bellil, W.**, Aissat, A., & Vilcot, J. P. (2019). Optimization and Comparison between the efficiency of GaNAsSb and GaInNAs single solar cells deposited on GaAs. *Procedia Computer Science*, 151, 1028-1033.

## CONFERENCES

- [1] **Bellil, W.**, Aissat, A., & Vilcot, J. P. (2018). Substrate effect on InGaN optoelectronic properties. 6th International Renewable and Sustainable Energy Conference Dec. 5-8, 2018, Rabat – Morocco
- [2] Aissat, A., Bestam, R., Nacer, S., **Bellil, W.**, & Vilcot, J. P. (2018, December). Improvement the Efficiency of Solar Cell Based on GaAsNSb/Si. In *2018 6th International Renewable and Sustainable Energy Conference (IRSEC)* (pp. 1-4). IEEE. Dec. 5-8, 2018, Rabat – Morocco.
- [3] **Bellil, W.**, Aissat, A., & Vilcot, J. P. (2019). Optimization and Comparison between the efficiency of GaNAsSb and GaInNAs single solar cells deposited on GaAs. The International Workshop on Microwave Engineering, Communications Systems and Technologies (MECST'2019). April 29-02, Louvain- Belgium.
- [4] Aissat, A., **Bellil, W.**, Bestam, R., & Vilcot, J. P. (2014). Modeling and Simulation of the Structure Based on the Semiconductor III-V for Solar Cell Application. *Journal of New Technology and Materials*, 277(1747), 1-4.
- [5] Benahmed, A., Aissat, A., Bouzaki, M., Bestam, R., Chaouchi, S., & **Bellil, W.** (2014). Optical transitions in quantum dots. *Journal of New Technology and Materials*, 277(1747), 1-3.
- [6] **Bellil, W.**, Aissat, A., & Vilcot, J. P. (2015). GaAsN quantum well active regions for optoelectronic applications. The first international conference on solar energy 4-5 May 2015, University of BBA, Algeria.

## REFERENCES

- [1] Hakim, M. (2010). La nouvelle stratégie de développement en algérie: enjeux et défis. *Studia Universitatis Babes Bolyai-Oeconomica*, 55(1), 79-94.
- [2] International Energy Agency. (2018). Key world energy statistics.
- [3] Baude, M., Baudry, M., Dussud, F. X., Duvernoy, J., Bultheel, C., & Vailles, C. (2018). Chiffres clés du climat France, Europe et Monde. Edition 2019.
- [4] Luque, A. (2011). Will we exceed 50% efficiency in photovoltaics? *Journal of Applied Physics*, 110(3), 11.
- [5] Rodriguez-Ubinas, E. D. W. I. N., Alhammadi, N., Alantali, M., & Alzarouni, S. (2020). Building Integrated Photovoltaic Solutions In Arid Climates: Experimental Analysis Of Copper Indium Gallium Selenide And Crystalline Silicon Modules Integrated As Ventilated FAÇADES. *Eco-Architecture VIII: Harmonisation between Architecture and Nature*, 195, 115.
- [6] Stoddard, L., Abiecunas, J., & O'Connell, R. (2006). Economic, energy, and environmental benefits of concentrating solar power in California (No. NREL/SR-550-39291). National Renewable Energy Lab. (NREL), Golden, CO (United States).
- [7] Multon, B., Robin, G., Ruellan, M., & Ahmed, H. B. (2004). Situation énergétique mondiale à l'aube du 3ème millénaire. Perspectives offertes par les ressources renouvelables.
- [8] Acket, C., & Vaillant, J. (2011). *Les énergies renouvelables: état des lieux et perspectives*. Editions Technip.
- [9] Frot, J. (2002). Nuclear and the environment.
- [10] Polytech'Savoie, D. U. (2010). Enjeux et situation des énergies renouvelables en Europe.
- [11] Sze, S. M., & Ng, K. K. (2006). *Physics of semiconductor devices*. John wiley & sons.
- [12] Kittel, C., McEuen, P., & McEuen, P. (1996). *Introduction to solid state physics* (Vol. 8, pp. 105-130). New York: Wiley.
- [13] King, R. R., Law, D. C., Edmondson, K. M., Fetzer, C. M., Kinsey, G. S., Yoon, H., ... & Karam, N. H. (2007). 40% efficient metamorphic GaInP/ GaInAs/ Ge multijunction solar cells. *Applied physics letters*, 90(18), 183516.
- [14] Kolhatkar, G. (2011). Characterisation of high-efficiency multi-junction solar cells and tunnel junctions (Doctoral dissertation, University of Ottawa (Canada)).
- [15] Geisz, J. F., & Friedman, D. J. (2002). III–N–V semiconductors for solar photovoltaic applications. *Semiconductor Science and Technology*, 17(8), 769.
- [16] Kolhatkar, G. (2014). Épitaxie Par Faisceaux Chimiques D'alliages Nitrures Dilués À Base D'aluminium Pour Des Applications Photovoltaïques (Doctoral dissertation, Université de Sherbrooke).
- [17] <https://www.nrel.gov/> (cite official The National Renewable Energy Laboratory)
- [18] El Jouad, Zouhair. Réalisation et caractérisation des cellules photovoltaïques organiques. Diss. 2016.
- [19] Becquerel, E. (1839). On electric effects under the influence of solar radiation. *Compt. Rend.*, 9, 561.
- [20] Smith, W. (1876). The action of light on selenium.
- [21] Adams, W. G., & Day, R. E. (1877). *R. Soc. Proc.* 24 (1876) 163. *Philos. Mag*, 1, 295.
- [22] Fritts, C. E. (1883). On a new form of selenium cell, and some electrical discoveries made by its use. *American Journal of Science*, (156), 465-472.
- [23] Minchin, G. M. (1893). XXXV. The magnetic field of a circular current. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 35(215), 354-365.
- [24] Paty, M. (1993). Einstein (Albert) 1879-1955.
- [25] Ohl, R. S. (1948). U.S. Patent No. 2,443,542. Washington, DC: U.S. Patent and Trademark Office.
- [26] Chapin, D. M., Fuller, C. S., & Pearson, G. L. (1954). A new silicon p-n junction photocell for converting solar radiation into electrical power. *Journal of Applied Physics*, 25(5), 676-677.
- [27] Prince, M. (1955). Silicon solar energy converters. *Journal of Applied Physics*, 26(5), 534-540.
- [28] Loferski, J. J. (1956). Theoretical considerations governing the choice of the optimum semiconductor for photovoltaic solar energy conversion. *Journal of Applied Physics*, 27(7), 777-784.

- [29] Hegedus, S. S., & Luque, A. (2003). Status, trends, challenges and the bright future of solar electricity from photovoltaics. *Handbook of photovoltaic science and engineering*, 1-43.
- [30] Nguyen, P. H., Michel, C., & Bottin, J. (1983). Etude de la conversion PV: effets des résistances parasites des photopiles. *Revue de physique Appliquée*, 18(12), 775-779.
- [31] Zhang, X., Zhao, T., Mao, W., Tan, D., & Chang, L. (2018). Multilevel Inverters for Grid-Connected Photovoltaic Applications: Examining Emerging Trends. *IEEE Power Electronics Magazine*, 5(4), 32-41.
- [32] Dupuis, J. (2009). Elaboration et caractérisation de couches de SiO<sub>x</sub>Ny: H et SiNx: H réalisées par méthode PECVD: application à la face arrière des cellules PV en Si (Doctoral dissertation, PhD thesis, INSA Lyon).
- [33] Mahfoud, A. (2015). Modélisation des cellules solaires tandem à couches minces et à haut rendement (Doctoral dissertation, Université de Sétif).
- [34] Gorge, V. (2012). Caractérisations de matériaux et tests de composants des cellules solaires à base des nitrures des éléments III-V (Doctoral dissertation, Paris 11).
- [35] Françoise, M. (2009). Développement de cellules PV à hétérojonctions Si et contacts en face arrière (Doctoral dissertation, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon).
- [36] Jacopin, G. (2012). Nanofils de semiconducteurs à grande énergie de bande interdite pour des applications optoélectroniques (Doctoral dissertation, Université Paris Sud-Paris XI).
- [37] Sabria, T. (2013). Modélisation de l'influence de la composition chimique «x» des matériaux arsenic sur les propriétés de transport électroniques (doctoral dissertation).
- [38] Mrinalini, M., Islavath, N., Prasanthkumar, S., & Giribabu, L. (2018). Stipulating Low Production Cost Solar Cells All Set to Retail...!. *The Chemical Record*.
- [39] Kenieche, D. (2016). Etude théorique et pratique de la cathodoluminescence en vue de la détermination de l'influence des défauts dans les semi-conducteurs II-VI.
- [40] Mimoune, M. (2016). Étude des capteurs PV basés sur les nanotechnologies (Doctoral dissertation, Université du Québec à Trois-Rivières).
- [41] Chen, Y., Altermatt, P. P., Chen, D., Zhang, X., Xu, G., Yang, Y., ...& Verlinden, P. J. (2018). From Laboratory to Production: Learning Models of Efficiency and Manufacturing Cost of Industrial Crystalline Silicon and Thin-Film Photovoltaic Technologies. *IEEE Journal of Photovoltaics*, 8(6), 1531-1538.
- [42] Woodhouse, M., Margolis, A., James, T., Feldman, D., Goodrich, A. (2012). cost model results for several PV technologies. *National Renewable Energy Laboratory*.
- [43] Woodhouse, M. A., Smith, B., Ramdas, A., & Margolis, R. M. (2019). Crystalline Silicon Photovoltaic Module Manufacturing Costs and Sustainable Pricing: 1H 2018 Benchmark and Cost Reduction Road Map (No. NREL/TP-6A20-72134). *National Renewable Energy Laboratory*. (NREL), Golden, CO (United States).
- [44] Louwen, A., Van Sark, W., Schropp, R., & Faaij, A. (2016). A cost roadmap for silicon heterojunction solar cells. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 147, 295-314.
- [45] Emery, K. (2003). Measurement and characterization of solar cells and modules. *Handbook of Photovoltaic Science and Engineering*, 701-752.
- [46] Gueymard, C. A. (2004). The sun's total and spectral irradiance for solar energy applications and solar radiation models. *Solar energy*, 76(4), 423-453.
- [47] Dusseau, P. L. (2009). Interactions rayonnement-matière. *Institut d'Électronique du Sud (IES)*.
- [48] Aroyo, M. I., Orobengoa, D., de la Flor, G., Tasci, E. S., Perez-Mato, J. M., & Wondratschek, H. (2014). Brillouin-zone database on the Bilbao Crystallographic Server. *Acta Crystallographica Section A: Foundations and Advances*, 70(2), 126-137.
- [49] SOUICI, AH, and Groupe de Cristallographie. "Physique des Semi-conducteurs." (2013).
- [50] Gray, J. L. (2003). The physics of the solar cell. *Handbook of photovoltaic science and engineering*, 2, 82-128.
- [51] Abada, S. (2011). Étude et optimisation d'un générateur photovoltaïque pour la recharge d'une batterie avec un convertisseur Sepic.

- [52] Benmoussa, W. C., Amara, S., & Zerga, A. (2007). "Etude comparative des modèles de la caractéristique courant-tension d'une cellule solaire au silicium monocristallin". *Revue des Energies Renouvelables ICRES-07*, 301-306.
- [53] Charles, J. P., Haddi, A., Maouad, A., Bakhtiar, H., Zerga, A., Hoffmann, A., & Mialhe, P. (2000). La Jonction, du Solaire à la Microélectronique. *Revue des Energies renouvelables*, 3, 1-16.
- [54] Thuillier, B. (2001). Caractérisation structurale des contacts ohmiques réalisés à partir d'encre métalliques sur cellules photovoltaïques en silicium multicristallin (Doctoral dissertation, institut national des sciences appliquees de lyon).
- [55] Baghdadli, T., Zerga, A., & Benyoucef, B. (1999). Optimisation du Rendement de Conversion Photovoltaïque des Cellules Solaires à base de GaAs et de Si. *Revue énergies renouvelables: Valorisation*, 27-31.
- [56] Hegedus, S. S., & Shafarman, W. N. (2004). Thin-film solar cells: device measurements and analysis. *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, 12(2-3), 155-176.
- [57] Navarro, J. M. (2008). Cellules photovoltaïques organiques transparentes dans le visible (Doctoral dissertation, Université de Toulouse, Université Toulouse III-Paul Sabatier).
- [58] McEvoy, A., Castaner, L., & Markvart, T. (2012). *Solar cells: materials, manufacture and operation*. Academic Press.
- [59] Dib, w. (2011). Modélisation des structures photovoltaïques aspects fondamentaux et appliques, (Doctoral dissertation, Université de TLEMCEM).
- [60] Benmohamed, Z., Remram, M., & Laugier, A. (1999). Influence des Couches Antireflets sur les Performances d'une Cellule Solaire au Silicium Multicristallin. *Rev. Energ. Ren. Valorisation*, 43, 46
- [61] Wang, L. W., & Zunger, A. (1996). Pseudopotential-based multiband  $k \cdot p$  method for  $\sim 250\ 000$ -atom nanostructure systems. *Physical Review B*. 54(16). 11417.
- [62] Williamson, A. J. (2000). AJ Williamson and A. Zunger. *Phys. Rev. B* 61. 1978 (2000). *Phys. Rev. B*. 61. 1978.
- [63] Cardona, M., & Peter, Y. Y. (2005). *Fundamentals of semiconductors*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- [64] Vogl, Á., Hjalmarson, H. P., & Dow, J. D. (1983). A semi-empirical tight-binding theory of the electronic structure of semiconductors. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. 44(5). 365-378.
- [65] Jancu, J. M., Scholz, R., Beltram, F., & Bassani, F. (1998). Empirical sp<sup>3</sup>s\* tight-binding calculation for cubic semiconductors: General method and material parameters. *Physical Review B*. 57(11). 6493.
- [66] Enderlein, R., & Horing, N. J. (1997). *Fundamentals of semiconductor physics and devices*. World Scientific.
- [67] Schulz, S., & Czycholl, G. (2005). Tight-binding model for semiconductor nanostructures. *Physical Review B*. 72(16). 165317.
- [68] Goringe, C. M., Bowler, D. R., & Hernandez, E. (1997). Tight-binding modelling of materials. *Reports on Progress in Physics*. 60(12). 1447.
- [69] Boykin, T. B., Klimeck, G., Bowen, R. C., & Oyafuso, F. (2002). Diagonal parameter shifts due to nearest-neighbor displacements in empirical tight-binding theory. *Physical Review B*. 66(12). 125207.
- [70] Brennan, K. F. (1999). *The physics of semiconductors: with applications to optoelectronic devices*. Cambridge university press.
- [71] Stier, O., Grundmann, M., & Bimberg, D. (1999). Electronic and optical properties of strained quantum dots modèled by 8-band  $k \cdot p$  theory. *Physical Review B*. 59(8). 5688.
- [72] Richard, S. (2004). Modélisation Physique de la structure électronique, du transport et de l'ionisation par choc dans les matériaux IV-IV massifs, contraints et dans les puits quantiques (Doctoral dissertation, Université Paris Sud-Paris XI).
- [73] Kittel, C., & Fong, C. Y. (1963). *Quantum theory of solids (Vol. 3)*. New York: Wiley
- [74] Kane, E. O. (1957). Band structure of indium antimonide. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. 1(4). 249-261.
- [75] Van de Walle, C. G., & Martin, R. M. (1986). Theoretical calculations of heterojunction discontinuities in the Si/Ge system. *Physical Review B*. 34(8). 5621.

- [76] Van de Walle. C. G. (1989). Band lineups and deformation potentials in the model-solid theory. *Physical review B*. 39(3). 1871.
- [77] Cuminal. Y. (1997). Réalisation et étude de diodes lasers à base de GaSb émettant vers 2. 3  $\mu\text{m}$  pour application à l'analyse des gaz (Doctoral dissertation).
- [78] Bir. G. L.. & Pikus. G. E. (1974). Symmetry and strain-induced effects in semiconductors.
- [79] Chang. C. S.. & Chuang. S. L. (1995). Modeling of strained quantum-well lasers with spin-orbit coupling. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*. 1(2). 218-229.
- [80] Kudrawiec, R., et al. "Experimental investigation of the CMN matrix element in the band anticrossing model for GaAsN and GaInAsN layers." *Solid state communications* 129.6 (2004): 353-357.
- [81] Wu. J.. Shan. W.. & Walukiewicz. W. (2002). Band anticrossing in highly mismatched III–V semiconductor alloys. *Semiconductor Science and Technology*. 17(8). 860.
- [82] Beaudoin. M.. Chan. I. C. W.. Beaton. D.. Elouneq-Jamroz. M.. Tiedje. T.. Whitwick. M.. ... & Zangenberg. N. (2009). Band edge absorption of GaAsN films measured by the photothermal deflection spectroscopy. *Journal of Crystal Growth*. 311(7). 1662-1665.
- [83] Skierbiszewski, C. (2002). Experimental studies of the conduction-band structure of GaInNAs alloys. *Semiconductor science and technology*, 17(8), 803.
- [84] K.-I. Lin. K.-L. Lin. B.-W. Wang. H.-H. Lin. J.-S. Hwang. *Appl. Phys. Express* 6 (2013)121202.
- [85] Y.-T. Lin. T.-C. Ma. T.-Y. Chen. H.-H. Lin. *Appl. Phys. Lett.* 93 (2008) 171914.
- [86] Habchi. M. M.. Nasr. A. B.. Rebey. A.. & El Jani. B. (2013). Electronic band structure calculation of GaNAsBi alloys and effective mass study. *Infrared Physics & Technology*. 61. 88-93.
- [87] Samajdar. D. P.. Das. U.. Sharma. A. S.. Das. S.. & Dhar. S. (2016). Influence of Bi and N related impurity states on the band structure and band offsets of GaSbBiN alloys. *Current Applied Physics*. 16(12). 1687-1694.
- [88] Mal. I.. Samajdar. D. P.. & Das. T. D. (2017). Effect of Sb and N resonant states on the band structure and carrier effective masses of GaAs<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub>Sb<sub>y</sub> alloys and GaAs<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub>Sb<sub>y</sub>/GaAs quantum wells calculated using  $k \cdot p$  Hamiltonian. *Superlattices and Microstructures*. 106. 20-32.
- [89] Aho, A., Korpijärvi, V. M., Isoaho, R., Malinen, P., Tukiainen, A., Honkanen, M., & Guina, M. (2016). Determination of composition and energy gaps of GaInNAsSb layers grown by MBE. *Journal of Crystal Growth*, 438, 49-54.
- [90] Aissat, A., Nacer, S., Ykhlef, F., & Vilcot, J. P. (2013). Modeling of Ga<sub>1-x</sub>In<sub>x</sub>As<sub>1-y-z</sub>N<sub>y</sub>Sb<sub>z</sub>/GaAs quantum well properties for near-infrared lasers. *Materials Science in Semiconductor Processing*, 16(6), 1936-1942.
- [91] Vegard. L. (1921). Die konstitution der mischkristalle und die raumfüllung der atome. *Zeitschrift für Physik*. 5(1). 17-26.
- [92] Vurgaftman. I. Meyer. J. Á.. & Ram-Mohan. L. Á. (2001). Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys. *Journal of applied physics*. 89(11). 5815-5875.
- [93] Glisson. T. H.. Hauser. J. R.. Littlejohn. M. A.. & Williams. C. K. (1978). Energy bandgap and lattice constant contours of III–V quaternary alloys. *Journal of Electronic Materials*. 7(1). 1-16.
- [94] Bakir. A. (2007). Investigation of the Band Alignment of Long-Wavelength InGa(N)As(Sb) Quantum Wells on GaAs and InP Substrates (M.Sc. Thesis in Engineering Physics University of Gaziantep).
- [95] Srinivasan, S., Bertram, F., Bell, A., Ponce, F. A., Tanaka, S., Omiya, H., & Nakagawa, Y. (2002). Low Stokes shift in thick and homogeneous InGaN epilayers. *Applied physics letters*, 80(4), 550-552.
- [96] Hori, M., Kano, K., Yamaguchi, T., Saito, Y., Araki, T., Nanishi, Y., ... & Suzuki, A. (2002). Optical Properties of In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N with Entire Alloy Composition on InN Buffer Layer Grown by RF-MBE. *physica status solidi (b)*, 234(3), 750-754.
- [97] Schenk, H. P. D., Leroux, M., & De Mierry, P. (2000). Luminescence and absorption in InGaN epitaxial layers and the van Roosbroeck–Shockley relation. *Journal of Applied Physics*, 88(3), 1525-1534.
- [98] Matthews. J. W.. & Blakeslee. A. E. (1974). Defects in epitaxial multilayers: I. Misfit dislocations. *Journal of Crystal growth*. 27. 118-125.

- [99] Varshni, Y. P. (1967). Temperature dependence of the energy gap in semiconductors. *physica*. 34(1). 149-154.
- [100] Veje, E., El Allali, M., Sørensen, C. B., & Tidemand-Pedersen, P. (1993). Experimental determination of the GaAs and GaAlAs band-gap energy dependence on temperature and aluminium mole fraction in the direct band-gap region. *Physical Review B. Condensed Matter and Materials Physics*, (48), 4398-4404.
- [101] Loureno, S. A., Dias, I. F. L., Duarte, J. L., Laureto, E., Poças, L. C., Toghinho Filho, D. O., & Leite, J. R. (2004). Thermal expansion contribution to the temperature dependence of excitonic transitions in GaAs and AlGaAs. *Brazilian journal of physics*, 34(2A), 517-525.
- [102] Wei, S. H., & Zunger, A. (1999). Predicted band-gap pressure coefficients of all diamond and zinc-blende semiconductors: Chemical trends. *Physical Review B*. 60(8). 5404.
- [103] Shan, W., Ager III, J. W., Yu, K. M., Walukiewicz, W., Haller, E. E., Martin, M. C., ... & Yang, W. (1999). Dependence of the fundamental band gap of Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N on alloy composition and pressure. *Journal of applied physics*. 85(12). 8505-8507.
- [104] Rakhshani, A. E. (2001). Heterojunction properties of electrodeposited CdTe/CdS solar cells. *Journal of Applied Physics*, 90(8), 4265-4271.1
- [105] Jellison Jr, G. E., & Modine, F. A. (1996). Parameterization of the optical functions of amorphous materials in the interband region. *Applied Physics Letters*, 69(3), 371-373.
- [106] Niassé, O. A., Mbengue, B., BA, B., Youm, I., & Ndiaye, A. (2010). Modèle de calculs des coefficients d'absorption théorique de la cellule solaire n-CdS/p-CdTe. *Revue des Energies Renouvelables*. 13(2). 213-222.
- [107] Schubert, E. F. (2004). Refractive index and extinction coefficient of materials. *Refractive index and extinction coefficient of materials*.
- [108] El Gmili, Y. (2013). Étude et caractérisations par cathodoluminescence de couches minces d'InGaN pour le photovoltaïque (Doctoral dissertation, Université de Lorraine).
- [109] Jani, O. K. (2008). Development of wide-band gap InGaN solar cells for high-efficiency photovoltaics (Doctoral dissertation, Georgia Institute of Technology).
- [110] LUQUE, Antonio et HEGEDUS, Steven (ed.). *Handbook of photovoltaic science and engineering*. John Wiley & Sons, 2011.
- [111] D. B. M. Klaassen. A unified mobility model for device simulation—I. Model equations and concentration dependence. *Solid-State Electronics*. 35.7 (1992) 953-959.
- [112] N. D. Arora, J. R. Hauser, and D. J. Roulston. *IEEE Trans. Electron Devices* ED-29. 292 ~1982.
- [113] S.N. Mohammad. Temperature, electric field, and doping dependent mobilities of electrons and holes in semiconductors. *Solid-state electronics*. 36.12 (1993) 1677-1683.
- [114] D. M. Caughey and R. E. Thomas. Carrier mobilities in silicon empirically related to doping and field. *Proceedings of the IEEE*. 55.12 (1967) 2192-2193.
- [115] Selberherr, S., Schutz, A., & Potzl, H. W. (1980). MINIMOS-A two-dimensional MOS transistor analyzer. *IEEE Journal of Solid-State Circuits*, 15(4), 605-615.
- [116] Palankovski, V., & Quay, R. (2004). *Analysis and simulation of heterostructure devices*. Springer Science & Business Media.
- [117] Walukiewicz, W., Lagowski, L., Jastrzebski, L., Lichtensteiger, M., & Gatos, H. C. (1979). Electron mobility and free-carrier absorption in GaAs: Determination of the compensation ratio. *Journal of Applied Physics*, 50(2), 899-908.
- [118] Sotoodeh, M., Khalid, A. H., & Rezazadeh, A. A. (2000). Empirical low-field mobility model for III-V compounds applicable in device simulation codes. *Journal of applied physics*, 87(6), 2890-2900.
- [119] James S. Harris Jr.\*, R. Kudrawiec\*\*, H. B. Yuen, S. R. Bank, H. P. Bae, M. A. Wistey, D. Jackrel, E. R. Pickett, T. Sarmiento, L. L. Goddard, V. Lordi, and T. Gegov, *phys. stat. sol. (b)* 244, No. 8, 2707–2729 (2007) .

- [120] H. Kowaki, K.-H. Lee, T. Kojima, M. Inagaki, K. Ikeda, B. Bouzazi, et al., Optical DLTS for the study of recombination centers in  $\text{wé GaAsN}$  grown by chemical beam epitaxy, AIP Conference Proceedings. 41 (2013) 41.
- [121] T. Honda, M. Inagaki, H. Suzuki, N. Kojima, Y. Ohshita, M. Yamaguchi, Improvement of minority-carrier lifetime in  $\text{GaAsN}$  grown by chemical beam epitaxy, in: 35th IEEE Photovoltaic Specialists Conference, IEEE, Honolulu, HI, 2010: p. 2053.
- [122] W.M. Chen, I.A. Buyanova, C.W. Tu, H. Yonezu, Point defects in dilute nitride  $\text{III-N-As}$  and  $\text{III-N-P}$ , *Physica B: Condensed Matter*. 376-377 (2006) 545.
- [123] A. Khan, D.A. Rahman, S. Alsharif, J. Gou, A. Gapud, T. Sasaki, et al., Thermal annealing study of radiation induced defects in nitride-based multi-junction solar cell structures using Deep Level Transient Spectroscopy, in: Photovoltaic Specialists Conference (PVSC), 2010 35th IEEE, Honolulu, HI, 2010: p. 2560.
- [124] B. Bouzazi, H. Suzuki, N. Kojima, Y. Ohshita, M. Yamaguchi, Nitrogen related defects and their effect on the electrical properties of  $\text{GaAsN}$  grown by chemical beam epitaxy, in: 37th IEEE Photovoltaic Specialists Conference, IEEE, Seattle, WA, 2011: p. 000454.
- [125] B. Bouzazi, H. Suzuki, N. Kojima, Y. Ohshita, M. Yamaguchi, A recombination center in p-type  $\text{GaAsN}$  grown by chemical beam epitaxy, *Solar Energy Materials and Solar Cells*. 95 (2011) 281
- [126] J.-C. Harmand, A. Caliman, E.V.K. Rao, L. Largeau, J. Ramos, R. Teissier, et al.,  $\text{GaNaNsSb}$ : how does it compare with other dilute III V-nitride alloys, *Semiconductor Science and Technology*. 17 (2002) 778.
- [127] S. Kurtz, J. Webb, L. Gedvilas, D. Friedman, J. Geisz, J. Olson, et al., Structural changes during annealing of  $\text{GaInAsN}$ , *Applied Physics Letters*. 78 (2001) 748.
- [128] K. Volz, V. Gambin, W. Ha, M.A. Wistey, H. Yuen, S. Bank, et al., The role of Sb in the MBE growth of  $(\text{GaIn})(\text{NaNsSb})$ , *Journal of Crystal Growth*. 251 (2003) 360.
- [129] D.B. Jackrel, S.R. Bank, H.B. Yuen, M.A. Wistey, J.S. Harris, A.J. Ptak, et al., Dilute nitride  $\text{GaInNaNs}$  and  $\text{GaInNaNsSb}$  solar cells by molecular beam epitaxy, *Journal of Applied Physics*. 101 (2007) 114916.
- [130] S. Tixier, M. Adamcyk, E.C. Young, J.H. Schmid, T. Tiedje, Surfactant enhanced growth of  $\text{GaNaNs}$  and  $\text{InGaNaNs}$  using bismuth, *Journal of Crystal Growth*. 251 (2003) 449.
- [131] D. Jackrel, A. Ptak, S. Bank, H. Yuen, M. Wistey, D. Friedman, et al.,  $\text{GaInNaNsSb}$  Solar Cells Grown by Molecular Beam Epitaxy, 2006 IEEE 4th World Conference on Photovoltaic Energy Conference. (2006) 783.
- [132] J.S. Harris, R. Kudrawiec, H.B. Yuen, S.R. Bank, H.P. Bae, M.A. Wistey, et al., Development of  $\text{GaInNaNsSb}$  alloys: Growth, band structure, optical properties and applications, *Physica Status Solidi (B)*. 244 (2007) 2707.
- [133] W. Lu, R.P. Champion, C.T. Foxon, E.C. Larkins, A theoretical model for the MBE growth of  $\text{AlGaAsN}$  using ammonia as the N source, *Journal of Crystal Growth*. 312 (2010) 1029.
- [134] Aissat, A., Nacer, S., Seghilani, M., & Vilcot, J. P. (2010). Effect of on band alignment of compressively strained  $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{N}_y\text{As}_{1-y-z}\text{Sb}_z/\text{GaAs}$  quantum well structures. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 43(1), 40-44.
- [135] Vurgaftman, I., Meyer, J. Á., & Ram-Mohan, L. Á. (2001). Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys. *Journal of applied physics*, 89(11), 5815-5875.
- [136] Vurgaftman, I., & Meyer, J. N. (2003). Band parameters for nitrogen-containing semiconductors. *Journal of Applied Physics*, 94(6), 3675-3696.
- [137] Aissat, A., Nacer, S., Ykhlef, F., & Vilcot, J. P. (2013). Modeling of  $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}_{1-y-z}\text{NySb}_z/\text{GaAs}$  quantum well properties for near-infrared lasers. *Materials Science in Semiconductor Processing*, 16(6), 1936-1942.

- [138] Gönül, B., Köksal, K., & Bakır, E. (2006). Comparison of the band alignment of strained and strain-compensated GaInNAs QWs on GaAs and InP substrates. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 31(2), 148-154.
- [139] TESSON, Olivier. Caracterisations électrique et physico-chimique de couches minces de cuin (s x se 1-x) 2 en vue d'applications dans le domaine photovoltaïque. 2000. Thèse de doctorat. Nantes.
- [140] Kolhatkar, G., Boucherif, A., Valdivia, C. E., Wallace, S. G., Fafard, S., Aimez, V., & Arès, R. (2014). Growth optimization and optical properties of AlGaInAs alloys. *Journal of Applied Physics*, 115(16), 163513.
- [141] Procz, S., Fiederle, M., Kunzer, M., Köhler, K., & Wagner, J. (2008). Band anticrossing in diluted Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As<sub>1-y</sub>N<sub>y</sub> ( $x \leq 0.37$ ,  $y \leq 0.04$ ). *Journal of Applied Physics*, 103(7), 073103.
- [142] BELLIL, W., AISSAT, A., et VILCOT, J. P. Performance of the structure Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As<sub>1-y</sub>N<sub>y</sub> déposé sur le Ge for solar cell applications. *Optik*, 2018, vol. 171, p. 803-808.
- [143] Wang, S. Q., & Ye, H. Q. (2002). A plane-wave pseudopotential study on III-V zinc-blende and wurtzite semiconductors under pressure. *Journal of physics: condensed matter*, 14(41), 9579.
- [144] Kanoun, M. B., Goumri-Said, S., Merad, A. E., Merad, G., Cibert, J., & Aourag, H. (2004). Zinc-blende AlN and GaN under pressure: structural, electronic, elastic and piezoelectric properties. *Semiconductor science and technology*, 19(11), 1220.
- [145] Guha, S., Cai, Q., Chandrasekhar, M., Chandrasekhar, H. R., Kim, H., Alvarenga, A. D., ... & Melloch, M. R. (1998). Photoluminescence of short-period GaAs/AlAs superlattices: A hydrostatic pressure and temperature study. *Physical Review B*, 58(11), 7222.
- [146] NAJAT, Bellal et BENMOUSSA, Dennai. Simulation and Optimization Performance of GaAs Homojunction Solar Cell with BSF Layer. In : 2018 6th International Renewable and Sustainable Energy Conference (IRSEC). IEEE, 2018. p. 1-4.