

UNIVERSITE DE BLIDA 1

Faculté des Sciences

THESE DE DOCTORAT

En Physique

MODÉLISATION ET SIMULATION DES STRUCTURES À PQs, BQs, et NFs
POUR LA CONVERSION PHOTOVOLTAÏQUE

Par

Fethi BENYETTOU

Devant le jury composé de :

Mr. M. DERBAL	Professeur, U. de Blida 1	Président
Mr. A. AISSAT	Professeur, U. de Blida 1	Directeur de thèse
Mr. M. A. BENAMAR	Professeur, U. de Blida 1	Co-directeur de thèse
Mr. N. GABOUZ	D. de recherche, CRTSE	Examineur
Mr. A. MELLIT	Professeur, U. de Jijel	Examineur
Mr. A. KEFFOUS	M.C.A, CRTSE	Examineur
Mr. M. SIDOUMOU	M.C.A, U. de Blida 1	Invité

Blida, le 04 Juillet 2018

REMERCIEMENTS

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

Je remercie Monsieur Abdelkader AISSAT, mon tuteur, professeur à l'université Saâd DAHLAB de Blida d'accepter de m'encadrer ainsi que pour son aide, son suivi et ses précieux conseils le long de cette étude.

Je tiens à remercier aussi Monsieur Mohamed El Amine BENAMAR, professeur à l'université Saâd DAHLAB de Blida pour l'intérêt qu'il a porté à ce travail et lui exprime ma reconnaissance pour avoir bien voulu être le co-encadreur de cette thèse.

Je remercie vivement Monsieur Mourad DERBAL, professeur à l'université Saâd DAHLAB de Blida, pour m'avoir fait l'honneur de présider le jury.

Ma profonde gratitude va à monsieur Noureddine GABOUZ, directeur de recherche au centre de recherche en technologie des semiconducteurs pour l'énergétique CRTSE (Alger), qui a bien voulu examiner mes travaux en me faisant l'honneur de participer au jury.

J'exprime tous mes remerciements à Monsieur Adel MELLIT, professeur à l'université Mohammed Seddik BENYAHIA (Jijel) pour avoir bien voulu consacrer du temps à l'examen du manuscrit. Je le remercie de m'avoir honoré par sa participation au jury de thèse.

Je remercie également Monsieur Aissa KEFFOUS, maître de conférences au centre de recherche en technologie des semiconducteurs pour l'énergétique CRTSE (Alger) pour l'intérêt qu'il a accordé à mon travail et pour avoir accepté de participer au jury.

Je remercie aussi Monsieur Mohamed SIDOUMOU, maître de conférences à l'université Saâd DAHLAB de Blida pour avoir accepté d'être invité à ma soutenance.

Mes remerciements vont aussi à la direction de laboratoire de Nanostructures Semi-conductrices Epitaxies NSE sous la direction de Isabelle BERBEZIER, directrice de recherche et responsable de l'équipe, laboratoire IM2NP, Marseille, de m'avoir accueilli durant trois mois de stage au sein de leur équipe.

Je voudrais aussi exprimer mes sincères remerciements à tous mes collègues de doctorat et à l'équipe de laboratoires LATSI et FUNDAPL de l'université de Blida pour leurs encouragements et pour avoir, d'une manière ou d'une autre à contribuer à cette étude.

Enfin, il m'est extrêmement agréable de remercier particulièrement mes parents pour leurs motivations et ses encouragements permanents, et aussi à ma sœur, à sa petite Meriem et à mon frère.

ملخص

تتناقش هذه الأطروحة نمذجة و محاكاة الخلايا الشمسية ذات البنية النانوية الكمية مثل النقاط النانوية BQs , الجدران النانوية PQs و الأسلاك النانوية NFs المبنية على المواد النصف الناقلة الجديدة III-V و IV. من اجل هذا الهدف قمنا بتطوير برامج حسابات باستخدام برنامج المحاكاة SILVACO ATLAS التي سمحت لنا باستخراج منحى التيار-التوتر J-V, منحى الاستجابة الطيفية EQE, منحى الامتصاص الطيفي , منحى طبقات الطاقة و استخراج مختلف الخصائص المميزة للخلايا الشمسية.

هدف هذه الدراسة هو تحسين مردود الخلايا الشمسية عن طريق دراسة تأثير حجم و ابعاد , عدد طبقات, الجزء المولي للعناصر المكونة للمواد ذات البنية النانوية الكمية و ايضا تأثير درجة الحرارة من اجل الاستخدامات الحرارية-الفوتوفولتية TPV. من ناحية أخرى مقارنة مختلف الخلايا الشمسية المدروسة لاختيار احسنها مردودا.

في الأخير و كنوع من الخلايا الشمسية ذات البنية النانوية, قمنا بصناعة أسلاك نانوية من نوع قلب-فوقعة Si/SiO₂.

RESUME

Ce travail concerne la modélisation et la simulation des structures d'une cellule solaire à nanostructures quantiques comme les boîtes quantiques BQs, puits quantiques PQs et les nanofils NFs à base de nouveaux matériaux semi-conducteurs III-V et IV. Nous avons établi des programmes de calculs sous l'environnement SILVACO ATLAS, permettant de tracer la caractéristique courant-tension J-V, la réponse spectrale EQE, le spectre de la photoluminescence PL, le coefficient d'absorption, le diagramme de bande d'énergie et de calculer les différents paramètres caractéristiques de la cellule photovoltaïque correspondante.

L'objectif de cette étude est d'optimiser l'efficacité de conversion de la cellule solaire conventionnelle d'une part par l'étude de l'influence de certains paramètres comme les paramètres géométriques, le nombre, la fraction molaire des éléments constituant la nanostructure quantique correspondante, et aussi l'effet de la température pour les applications thermo-photovoltaïque TPV. Cette étude permet de comparer les différentes structures étudiées afin d'en sélectionner la meilleure.

Enfin, des nanostructures sous forme de nanofils cœur-coquille Si/SiO₂ ont été fabriquées, caractérisés et mise en contact en utilisant l'appareil de gravure (FIB focused ion beam) et la photolithographie laser pour les tester après pour applications photovoltaïques.

ABSTRACT

This thesis describes the modeling and simulation of quantum nanostructures solar cell structures such as quantum dots QDs, quantum wells QWs and nanowires NWs based on new semiconductor materials III-V and IV. We have established numerical programs under SILVACO ATLAS environment that allow us to plot and extract the current-voltage J-V characteristic, external quantum efficiency EQE, photoluminescence spectra PL, absorption coefficient, and energy band diagram, of a quantum nanostructure solar cell.

The goal of this work is to optimize the efficiency of a conventional solar cell by the study of the influence of some parameters such as the size, number of layers, the content of the elements which constitute the quantum nanostructure materials, and also the temperature effect for the thermo-photovoltaic applications TPV. In the other hand, compare the different structures studied in order to select the better nanostructure solar cell.

Finally, Si/SiO₂ core/shell nanowires have been fabricated and characterized using FIB focused ion beam and laser photolithography for photovoltaic applications.

TABLE DE MATIERE

REMERCIEMENTS.....	1
RESUME.....	2
TABLE DE MATIERES.....	4
LISTE DES ILLUSTRATIONS ET TABLEAUX.....	8
LISTE DES SYMBOLES ET ABRREVIATIONS.....	15
INTRODUCTION GENERALE.....	19

CHAPITRE 1 : LA PHYSIQUE DE LA CELLULE SOLAIRE

1.1. Introduction.....	23
1.2. Historique du photovoltaïque	23
1.3. Effet photovoltaïque.....	24
1.3.1. Jonction PN	24
1.3.1.1. Semiconducteur intrinsèque	24
1.3.1.2. Semiconducteur extrinsèque	25
1.3.1.3. Homojonction	26
1.3.1.4. Hétérojonction	27
1.3.2. Interaction rayonnement-matière	29
1.3.3. Zone utile du spectre solaire	30
1.3.4. Transitions directes et indirectes	30
1.4. Recombinaison de porteurs en excès.....	31
1.4.1. Mécanismes de recombinaison	31
1.5. Principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque conventionnelle.....	32
1.6. Calcul de photo-courant	34
1.6.1. Photo-courant du front (émetteur)	34
1.6.2. Photo-courant de la base	35
1.6.3. Photo-courant de la zone de charge espace (courant de génération) ...	35
1.7. Courant d'obscurité	36
1.8. Modèle électrique d'une cellule photovoltaïque	37
1.8.1. Caractéristique I(V) d'une cellule photovoltaïque et ses paramètres caractéristiques.....	38
1.9. Générations de cellules solaires photovoltaïques.....	40
1.9.1. Première génération.....	40
1.9.2. Deuxième génération	40
1.9.3. Troisième génération.....	41
1.10. Influence des pertes physiques et technologiques sur le rendement de la cellule photovoltaïque	42
1.10.1. Pertes physiques.....	43
1.10.2. Pertes technologiques.....	43
1.14. Conclusion.....	44

CHAPITRE 2 : GENERALITES SUR LES NANOSTRUCTURES DE BASSE DIMENSIONALITE

2.1. Introduction.....	45
2.2. Propriétés de base des nanostructures à basse dimensionnalité	45
2.2.1. Propriétés électroniques.....	45
2.2.2. Propriétés optiques.....	53
2.3. Croissance auto-organisée des BQs.....	55
2.3.1. Mode de croissance	55
2.3.2. Contrainte dans les boîtes quantiques.....	58
2.4. Choix de matériau semiconducteur boîte quantique.....	61
2.5. Techniques de fabrication et la croissance des BQs.....	68
2.5.1. Epitaxie par jets moléculaire MBE.....	68
2.5.2. Epitaxie en phase vapeur de composés organométalliques MOCVD	70
2.5.3. Epitaxie par jets chimiques CVD.....	71
2.6. Conclusion.....	72

CHAPITRE 3 : MODELISATION ET SIMULATION DES CELLULES SOLAIRES A NANOSTRUCTURES QUANTIQUES : BQs, PQs ET NFs

3.1. Introduction	73
3.2. Présentation du logiciel SILVACO	73
3.3. Cellules solaires à nanostructures quantiques simulées.....	78
3.3.1. Cellule solaire à BQs GaSb/GaAs	78
3.3.1.1. Résultats et discussion.....	78
3.3.2. Cellule solaire à BQs InSb/GaAs	81
3.3.2.1. Résultats et discussion.....	82
3.3.3. Cellule solaire à BQs InAsP/GaAs.....	92
3.3.3.1. Résultats et discussion	93
3.3.4. Cellule solaire à BQs InAsP/Si	96
3.3.4.1. Résultats et discussion	97
3.3.5. Cellule solaire à BQs InGaN/GaN :.....	103
3.3.5.1. Résultats et discussion	105
3.3.6. Cellule solaire à PQs SiGe/Si	109

3.3.6.1. Résultats et discussion	110
3.3.7. Cellule solaire à PQs InGaN/GaN	115
3.3.7.1. Résultats et discussion	116
3.3.8. Cellule solaire à PQs InAsP/GaAs	123
3.3.8.1. Résultats et discussion	125
3.3.9. Cellule solaire à nanofils NFs cœur/coquille de Si /SiGe.....	127
3.3.9.1. Résultats et discussion.....	128
3.4. Comparaison entre les différentes cellules solaires nanostructures quantiques étudiés.....	134
3.5. Conclusion.....	135

CHAPITRE 4 : REALISATION ET METALLISATION DES NANOFILS CŒUR/COQUILLE Si/SiO₂

4.1. Introduction.....	137
4.2. Méthodes expérimentales.....	137
4.2.1. Faisceau d'ions focalisé (FIB)	137
4.2.2. Microscopie électronique à balayage MEB	141
4.2.3. Microscopie à force atomique (AFM).....	144
4.2.4. Oxydation Thermique Rapids (RTO).....	145
4.2.5. Lithographie laser.....	146
4.3. Procédés de fabrications des nanofils cœur/coquille Si/SiO ₂	147
4.3.1. Préparation des substrats : Nettoyage de l'échantillon	147
4.3.2. Fabrication des nanofils cœur/coquille Si/SiO ₂ : utilisation du «Faisceau d'ions focalisé» (FIB)	148
4.3.2.1. Calibrage de l'équipement	148
4.3.2.2. Gravure des nanofils à diamètres variables par les ions de Au+	153
4.3.3. Mise des contacts métalliques	156
4.4. Conclusion.....	158
CONCLUSION GENERALE.....	159

LISTE DES ILLUSTRATIONS, GRAPHIQUES ET DES TABLEAUX

Figure 1.1	Diagramme énergétique d'une jonction PN à l'équilibre thermodynamique.	27
Figure 1.2	Types de l'hétérojonction : (a) Type I ; (b) Type II-décalé ; (c) Type II-désaligné ; (d) Type III.....	28
Figure 1.3	Structure électronique d'un semiconducteur de Silicium.....	29
Figure 1.4	Principales pertes intrinsèque pour une cellule solaire en silicium. (I) pertes des photons de grandes longueurs d'onde (20%), (II) pertes dues à l'énergie excédentaire des photons (32%), (III) les photons absorbés (48%) [20].....	30
Figure 1.5	Transitions électroniques inter bandes dans les semi.conducteurs. a) correspond à un semi.conducteur à gap direct .b) semi.conducteur à gap indirect.....	31
Figure 1.6	Mécanismes de recombinaison a) recombinaison SRH, b) recombinaison Auger, c) recombinaison radiative.....	32
Figure 1.7	Structure d'une simple cellule solaire.	33
Figure 1.8	Schéma général d'une cellule photovoltaïque.....	34
Figure 1.9	Modèle électrique réel d'une cellule photovoltaïque.....	37
Figure 1.10	Caractéristique I(V) d'une cellule photovoltaïque.....	38
Figure 1.11	Structure d'une cellule à base du silicium cristallin.....	41
Figure 1.12	Structure d'une cellule photovoltaïque à base des matériaux CIGS.....	41
Figure 1.13	Structure des cellules photovoltaïques multijonctions.....	42
Figure 2.1	(a) structure d'un semiconducteur massif, (b) évolution de la densité d'états en fonction de l'énergie dans un semiconducteur massif.....	46
Figure 2.2	(a) structure d'un puits quantique, (b) le potentiel infinie dans la structure à puits quantique, (c) évolution de la densité d'états en fonction de l'énergie dans un puits quantique. (d) diagramme d'énergie d'une structure à puits quantique.....	49
Figure 2.3	(a) structure d'un fil quantique, (b) évolution de la densité d'états en fonction de l'énergie dans un fil quantique, (c) potentiel infinie dans la structure à fil quantique.....	51
Figure 2.4	(a) structure d'une boîte quantique, (b) évolution de la densité d'états en fonction de l'énergie dans une boîte quantique, (c) potentiel infinie dans la structure à boîte quantique.....	53
Figure 2.5	Spectre de photoluminescence d'une structure à boîte quantique InAs/InP à la température ambiante.....	54
Figure 2.6	Diagramme de bande d'une boîte quantique semiconductrice d'un gap E_{gBQ} mit entre deux semiconducteurs barrières de grand gap E_{gB} . Les valeurs indiquées dans le schéma sont : les énergies de discontinuité pour les électrons et trous ΔE_c et ΔE_v , respectivement, la largeur de la boîte quantique L , les énergies de confinement quantique pour les électrons et trous E_e et E_h , l'énergie de transition optique $h\nu$	54
Figure 2.7	(a) mode de croissance Volmer-Weber (VW : formation des îlots), (b) mode de croissance Frank-van der Merwe (FM : couche par couche), (c) mode de croissance Stranski-Krastanov (SK : couche+îlots).....	56
Figure 2.8	(a) étapes de la méthode de croissance Stranski-Krastanov, (b) image AFM d'une structure à boîtes quantiques de Ge/Si, (c) image AFM d'une structure à boîtes quantiques d'InGaAs/GaAs.....	57
Figure 2.9	Types de la contrainte : (a) contrainte extensive, (b) contrainte compressive.....	59
Figure 2.10	Technique de compensation de la contrainte : (a) structure InAs/GaAs sans couches de compensation, (b) structure InAs/GaAs avec les couches de	

	compensation.....	60
Figure 2.11	Image de TEM of 10 empilements de boîtes quantiques d'InAs/GaAs : (a) sans et (b) avec couche de compensation de la contrainte GaP.....	60
Figure 2.12	Eléments du groupe III, IV et V du tableau périodique.....	61
Figure 2.13	Structure zinc-blende.....	62
Figure 2.14	Structure de bande de GaAs et InAs. Pour le GaAs $E_g=1.42$ eV, $E_L=1.71$ eV et $E_x=1.9$ eV et $E_g=0.35$ eV, $E_L=1.08$ eV et $E_x=1.37$ eV pour le InAs à $T=300$ K.....	63
Figure 2.15	Energie de gap en fonction du paramètre de maille de plusieurs semiconducteurs III-V à $T=0$ K.....	64
Figure 2.16	Discontinuité de la bande de conduction (cercle remplie) et la bande de valence (cercle vide) de quelques semiconducteurs III-V en fonction de paramètre de maille.....	66
Figure 2.17	Evolution de l'énergie de la bande interdite de quelques semiconducteurs BQs III-V et II-VI en fonction de ses tailles.....	67
Figure 2.18	Schéma représentatif de la chambre de croissance de système de croissance MBE.....	69
Figure 2.19	Images de RHEED pendant la croissance des BQs d'InAs sur substrat GaAs.....	70
Figure 2.20	Montage expérimental du système de croissance MOCVD.....	70
Figure 2.21	Montage expérimental du système de croissance CBE.....	71
Figure 3.1	Diagramme de SILVACO TCAD et les entrées-sorties d'ATLAS.....	75
Figure 3.2	Commandes du simulateur ATLAS.....	76
Figure 3.3	Structure de la cellule solaire p-i-n à base de GaAs.....	79
Figure 3.4	Partie agrandie de la région intrinsèque de la cellule solaire à BQs de GaSb/GaAs.....	79
Figure 3.5	EQE de la cellule solaire sans et avec un nombre variable de couches de GaSb/GaAs.....	80
Figure 3.6	Caractéristique J-V de la cellule solaire sans et avec un nombre variable de couches de BQs GaSb/GaAs.....	81
Figure 3.7	Structure de la cellule solaire à 10 couches de BQ d'InSb/GaAs.....	82
Figure 3.8	Diagramme de bandes d'énergies de la cellule solaire à BQ d'InSb/GaAs.....	83
Figure 3.9	EQE de la cellule solaire p-i-n et à BQ d'InSb/GaAs pour un nombre variable de couches de BQs.....	84
Figure 3.10	Coefficient d'absorption de la cellule solaire p-i-n et à BQ d'InSb/GaAs pour un nombre de couches de BQs différent.....	85
Figure 3.11	Spectre de PL calculé de la cellule solaire à BQs d'InSb/GaAs à une température de 77 K.....	85
Figure 3.12	Spectre de PL calculé de la cellule solaire p-i-n à une température de 77 K.....	86
Figure 3.13	Caractéristique J-V de la cellule solaire p-i-n et à BQs d'InSb/GaAs avec un nombre variable de couche de BQs insérés.....	87
Figure 3.14	Comparaison d'EQE de la cellule solaire à 30 couches de BQs d'InSb/GaAs simulé et d'InAs/GaAs mesuré à une température ambiante... ..	88
Figure 3.15	Comparaison de J-V de la cellule solaire à 30 couches de BQs d'InSb/GaAs simulé et d'InAs/GaAs mesuré à une température ambiante... ..	89
Figure 3.16	Comparaison de PL de la cellule solaire à 30 couches de BQs d'InSb/GaAs simulée et celle mesurée à deux température différentes.....	89
Figure 3.17	EQE de la cellule solaire à 10 couches de BQs d'InSb/GaAs pour différentes épaisseurs de BQs.....	90

Figure 3.18	Spectre de PL de la cellule solaire à 10 couches de BQs d'InSb/GaAs à 77 K pour différentes épaisseurs de BQs.....	91
Figure 3.19	Caractéristique J-V de la cellule solaire à 10 couches de BQs d'InSb/GaAs pour différentes épaisseurs de BQs.....	92
Figure 3.20	Structure d'InAsP/GaAs avec cinq couches de BQs insérés dans la région intrinsèque.....	93
Figure 3.21	Evolution de l'énergie du gap et la contrainte de la structure InAs _x P _{1-x} /GaAs en fonction de la fraction molaire x.....	94
Figure 3.22	EQE de la cellule solaire p-i-n et à BQ d'InAs _{0,35} P _{0,65} /GaAs pour un nombre variable de couches de BQs.....	95
Figure 3.23	Caractéristique J-V de la cellule solaire p-i-n et à BQ d'InAs _{0,35} P _{0,65} /GaAs pour un nombre variable de couches de BQs.....	95
Figure 3.24	Caractéristique P-V de la cellule solaire p-i-n et à BQ d'InAs _{0,35} P _{0,65} /GaAs pour un nombre variable de couches de BQs.....	96
Figure 3.25	Structure de la cellule solaire à 10 couches de BQ d'InAsP/Si.....	97
Figure 3.26	Evolution de l'énergie du gap et la contrainte de la structure InAs _x P _{1-x} /Si en fonction de la fraction molaire x.....	98
Figure 3.27	Evolution de la courbe d'EQE de 20 couches de BQs InAs _x P _{1-x} /Si en fonction de la fraction molaire x.....	99
Figure 3.28	Caractéristique J-V de 20 couches de BQs InAs _x P _{1-x} /Si pour une fraction molaire x variable.....	99
Figure 3.29	EQE de la cellule solaire p-i-n et à BQs d'InAs _{0,6} P _{0,4} /Si pour un nombre variable de couches de BQs.....	100
Figure 3.30	Coefficient d'absorption de la cellule solaire p-i-n et à 30 couches de BQs d'InAs _{0,6} P _{0,4} /Si.....	101
Figure 3.31	Caractéristique J-V de la cellule solaire p-i-n et à BQs d'InAs _{0,6} P _{0,4} /Si pour un nombre variable de couches de BQs.....	102
Figure 3.32	Caractéristique P-V de la cellule solaire p-i-n et à BQs d'InAs _{0,6} P _{0,4} /Si pour un nombre variable de couches de BQs.....	102
Figure 3.33	Structure de la cellule solaire à 3 couches de BQs d'In _{0,25} Ga _{0,75} N/GaN.....	104
Figure 3.34	Diagramme de bandes d'énergies de la cellule solaire à cinq couches de BQs d'In _{0,25} Ga _{0,75} N/GaN.....	104
Figure 3.35	Caractéristique J-V de la cellule solaire p-i-n et à BQs d'In _{0,25} Ga _{0,75} N/GaN pour un nombre variable de couches de BQs.....	106
Figure 3.36	Variation de courant de court-circuit et le rendement de conversion en fonction de la fraction molaire d'Indium x.....	107
Figure 3.37	Variation de la tension de circuit ouvert en fonction de la fraction molaire d'Indium x.....	107
Figure 3.38	(a) caractéristique J-V d'une cellule solaire à 10 couches de BQs d'In _{0,25} Ga _{0,75} N/GaN pour une température variable. (b) évolution du rendement de conversion et la tension de circuit ouvert en fonction de la température.....	108
Figure 3.39	Structure de la cellule solaire p-i-n à base de Si.....	109
Figure 3.40	Diagramme de bande d'énergie de la cellule solaire à PQs de SiGe/Si....	110
Figure 3.41	Coefficient d'absorption de Si et SiGe.....	111
Figure 3.42	Caractéristique J-V de la cellule solaire p-i-n à base de Si.....	112

Figure 3.43	Caractéristique P-V de la cellule solaire p-i-n à base de Si.....	112
Figure 3.44	Caractéristique J-V de la cellule solaire sans et avec un nombre variable de périodes de $\text{Si}_{0,8}\text{Ge}_{0,2}/\text{Si}$	113
Figure 3.45	Caractéristique P-V de la cellule solaire sans et avec un nombre variable de périodes de $\text{Si}_{0,8}\text{Ge}_{0,2}/\text{Si}$	113
Figure 3.46	EQE de la cellule solaire à PQs $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ pour une composition chimique variable 20%, 50 % et 90%.....	114
Figure 3.47	Caractéristique J-V de la cellule solaire à PQs $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ pour une composition chimique variable 20%, 50 % et 90%.....	115
Figure 3.48	Structure de la cellule solaire p-GaN/i-InGaN/n-GaN.....	116
Figure 3.49	Caractéristique J-V de la cellule solaire sans et avec un nombre variable de périodes de $\text{In}_{0,35}\text{Ga}_{0,65}\text{N}/\text{GaN}$	117
Figure 3.50	Caractéristique J-V simulée et mesurée de la cellule solaire à 5 périodes d' $\text{In}_{0,35}\text{Ga}_{0,65}\text{N}/\text{GaN}$	119
Figure 3.51	EQE simulée et mesurée de la cellule solaire à 5 périodes d' $\text{In}_{0,35}\text{Ga}_{0,65}\text{N}/\text{GaN}$	119
Figure 3.52	Caractéristique J-V de la cellule solaire à 5 périodes d' $\text{In}_{0,35}\text{Ga}_{0,65}\text{N}/\text{GaN}$ pour deux épaisseurs différentes de PQs, L_w : 3 nm et 16 nm.....	120
Figure 3.53	Profil du champ électrique de la cellule solaire à 5 périodes d' $\text{In}_{0,35}\text{Ga}_{0,65}\text{N}/\text{GaN}$ pour trois tension de sortie V_{out} : 0 V, 0.8 V et 1.6 V....	121
Figure 3.54	Profil du champ électrique de la cellule solaire à 7 périodes d' $\text{In}_{0,35}\text{Ga}_{0,65}\text{N}/\text{GaN}$ pour trois tension de sortie V_{out} : 0 V, 0.8 V et 1.6 V....	121
Figure 3.55	Taux de recombinaison de la cellule solaire à 5 périodes d' $\text{In}_{0,35}\text{Ga}_{0,65}\text{N}/\text{GaN}$ pour trois tension de sortie V_{out} : 0 V, 0.8 V et 1.6 V....	122
Figure 3.56	Taux de recombinaison de la cellule solaire à 7 périodes d' $\text{In}_{0,35}\text{Ga}_{0,65}\text{N}/\text{GaN}$ pour trois tension de sortie V_{out} : 0 V, 0.8 V et 1.6 V....	123
Figure 3.57	Photogénération de la cellule solaire p-i-n et à 2 et 5 périodes d' $\text{In}_{0,35}\text{Ga}_{0,65}\text{N}/\text{GaN}$ dans la condition de court-circuit.....	123
Figure 3.58	Structure de la cellule solaire p-i-n à base de GaAs.....	124
Figure 3.59	Partie agrandie de la région intrinsèque de la cellule solaire à PQs d' InAsP/GaAs	124
Figure 3.60	Coefficient d'absorption de la cellule solaire p-i-n à base de GaAs et à PQs d' InAsP/GaAs	125
Figure 3.61	EQE de la cellule solaire sans et avec un nombre variable de périodes de $\text{InAs}_{0,35}\text{P}_{0,65}/\text{GaAs}$	126
Figure 3.62	Caractéristique J-V de la cellule solaire sans et avec un nombre variable de périodes de $\text{InAs}_{0,35}\text{P}_{0,65}/\text{GaAs}$	127
Figure 3.63	Structure 3D de la cellule solaire p-i-n à NFs cœur/coquille Si/SiGe, (b) face avant de la structure.....	129
Figure 3.64	Caractéristique J-V de la cellule solaire p-i-n à NFs cœur/coquille de Si et Si/ $\text{Si}_{0,2}\text{Ge}_{0,8}$ pour plusieurs longueurs et un rayon fixe de $r=0.19 \mu\text{m}$	130
Figure 3.65	EQE de la cellule solaire p-i-n à NFs cœur/coquille de Si et Si/ $\text{Si}_{0,2}\text{Ge}_{0,8}$ pour plusieurs longueurs et un rayon fixe de $r=0.19 \mu\text{m}$	131
Figure 3.66	Distribution spatiale de la densité du courant totale de la cellule solaire p-i-n à NFs cœur/coquille de Si/ $\text{Si}_{0,2}\text{Ge}_{0,8}$ obtenu pour des concentrations de dopage $N_D=5 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ et $N_A=4 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$ de $\text{Si}_{0,2}\text{Ge}_{0,8}$ et Si, respectivement. La structure simulé a un rayon de $0.19 \mu\text{m}$ and une longueur de $10 \mu\text{m}$. (a) la densité du courant totale dans le contact en avant, (b) dans le milieu et (c) dans le contact en arrière.....	132
Figure 3.67	Caractéristique J-V de la cellule solaire p-i-n à NFs cœur/coquille de	

	Si/Si _{0,2} Ge _{0,8} pour plusieurs rayons et une longueur optimale fixe $L=10\ \mu\text{m}$...	133
Figure 3.68	EQE de la cellule solaire p-i-n à NFs cœur/coquille de Si/Si _{0,2} Ge _{0,8} pour plusieurs rayons et une longueur optimale fixe $L=10\ \mu\text{m}$	134
Figure 4.1	(a) photographie de la colonne TESCAN Lyra1 XMU de l'équipe NSE possédant à la fois un faisceau électrons et un faisceau d'ions filtré en masse [4] ; (b) Représentation schématique des principaux composants d'une colonne ionique avec une filtre de masse.....	138
Figure 4.2	Images SEM d'une source Ga (a) et d'une source Au-Si (b).....	139
Figure 4.3	Schéma montrant la méthode de séparation des ions en fonction de la masse des ions en utilisant un filtre de masse.....	139
Figure 4.4	Schéma d'injection de gaz GIS de l'équipe NSE. (a) Colonne de GIS à l'intérieur de la chambre à vide de FIB ; (b) réservoir du GIS à l'extérieur de la chambre.	141
Figure 4.5	Irradiations émises lors de l'interaction entre le faisceau d'électrons et l'échantillon.....	142
Figure 4.6	Schéma synoptique d'un microscope électronique à balayage.....	143
Figure 4.7	Microscopie à force atomique (AFM) de type XE-100 PSIA de l'équipe NSE.....	145
Figure 4.8	Schéma de fonctionnement d'un microscope à force atomique.....	145
Figure 4.9	Partie intérieure et extérieure de la machine RTO de type Jiplec Jetfirst..	146
Figure 4.10	Image de l'appareil Dilase 250 (a) avec son logiciel DilaseSoft 250 (b)...	147
Figure 4.11	Etapas de préparation de l'échantillon pour la gravure des nanofils par FIB..	148
Figure 4.12	Etapas de la gravure des nanofils cœur/coquille Si/SiO ₂ par FIB.....	149
Figure 4.13	Différentes paramètres utilisées dans les gravures introduites dans le logiciel de FIB.....	149
Figure 4.14	Images MEB des différents motifs de tests réalisés au sein de NSE de l'institut IM2NP	151
Figure 4.15	Images AFM des différents motifs de tests réalisés au sein de NSE de l'institut IM2NP	152
Figure 4.16	Images MEB de nanofils de Si gravé par les ions de Au ⁺ pour différentes diamètres obtenus au sein de NSE de l'institut IM2NP	153
Figure 4.17	Images AFM de nanofils de Si gravé par les ions de Au ⁺ pour différentes diamètres au sein de NSE de l'institut IM2NP.....	154
Figure 4.18	Profils de AFM de nanofils de Si gravé par les ions de Au ⁺ pour différentes diamètres.	154
Figure 4.19	Structure finale envisagée.....	156
Figure 4.20	Procédés de gravure en lithographie Laser.....	157
Figure 4.21	Image de microscope optique des NFs cœur/coquille contactés par des pads d'Aluminium.....	157
Tableau 2.1	Propriétés de quelques semiconducteurs III-V utilisés dans ce travail à $T=300\ \text{K}$	64
Tableau 3.1	Paramètres caractéristiques d'une cellule solaire p-i-n et BQs GaSb/GaAs pour un nombre de couches variable.....	81
Tableau 3.2	Paramètres des régions de la structure à BQs d'InSb/GaAs.....	83
Tableau 3.3	Paramètres caractéristiques de la cellule solaire sans et avec un nombre variable de couches de BQs d'InSb/GaAs.....	86
Tableau 3.4	Paramètres caractéristiques de la cellule solaire à 10 couches de BQs d'InSb/GaAs pour différentes épaisseurs de BQs.....	91
Tableau 3.5	Paramètres caractéristiques de la cellule solaire sans et avec un nombre variable de couches de BQs d'InAs _{0,35} P _{0,65} /GaAs.....	96
Tableau 3.6	Paramètres électriques de la cellule solaire 20 couches de BQs InAs _x P _{1-x} pour une fraction molaire x variable.....	100
Tableau 3.7	Paramètres caractéristiques de la cellule solaire sans et avec un nombre	

	variable de couches de BQs d' $\text{InAs}_{0.6}\text{P}_{0.4}/\text{Si}$	103
Tableau 3.8	Paramètres caractéristiques de la cellule solaire sans et avec un nombre variable de couches de BQs d' $\text{In}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}/\text{GaN}$	105
Tableau 3.9	Paramètres caractéristiques d'une cellule solaire p-i-n et à puits quantiques $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}/\text{Si}$ pour un nombre de périodes variable.....	114
Tableau 3.10	Paramètres caractéristiques d'une cellule solaire p-i-n et à puits quantiques $\text{In}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{N}/\text{GaN}$ pour un nombre de périodes variable.....	117
Tableau 3.11	Paramètres caractéristiques d'une cellule solaire à puits quantiques $\text{In}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{N}/\text{GaN}$ pour deux épaisseurs de PQs, L_w : 3 nm et 16 nm.....	120
Tableau 3.12	Paramètres caractéristiques d'une cellule solaire p-i-n et à puits quantiques $\text{InAs}_{0.35}\text{P}_{0.65}/\text{GaAs}$ pour un nombre de périodes variable.....	127
Tableau 3.13	Paramètres caractéristiques d'une cellule solaire p-i-n à NFs cœur/coquille de Si et $\text{Si}/\text{Si}_{0.2}\text{Ge}_{0.8}$ pour plusieurs longueurs et un rayon fixe de $r=0.19 \mu\text{m}$	130
Tableau 3.14	Paramètres caractéristiques d'une cellule solaire p-i-n à NFs cœur/coquille de $\text{Si}/\text{Si}_{0.2}\text{Ge}_{0.8}$ pour plusieurs rayons et une longueur optimale fixe $L=10 \mu\text{m}$	133
Tableau 4.1	Procédure de nettoyage chimique employée pour les substrats de SOI (001).	147
Tableau 4.2	Valeurs des paramètres FIB utilisés pour chaque motif de tests.....	150
Tableau 4.3	Comparaison entre les paramètres FIB et AFM du motif A.....	153
Tableau 4.4	Valeurs des paramètres FIB utilisés lors la gravure de nanofils de Si par Au^+	155

LISTE DES SYMBOLES ET ABREVIATIONS

ABREVIATIONS

SRH	: Shockley Read Hall.
ZCE	: Zone de Charge Espace.
FF	: Facteur de Forme.
EQI	: Efficacité Quantique Interne.
EQE	: Efficacité Quantique Externe.
MPP	: Maximum Power Point.
BSF	: Back Surface Field.
BQs	: Boites Quantiques.
PQs	: Puits Quantiques.
FQs	: Fils Quantiques.
NFs	: Nanofils.
WL	: Wetting Layer.
SK	: Stranski Krastanov.
CM	: Couche de Mouillage.
MC	: Mono Couche.
MBE	: Molecular Beam Epitaxy.
MOCVD	: Metalorganic Chemical Vapor Deposition.
CBE	: Chemical Beam Epitaxy.
AFM	: Atomic Force Microscopy.
MEB	: Microscope Electronique à Balayage.
TEM	: Transmission Electron microscopy.
UHV	: Ultra High Vacuum.
RHEED	: Reflection High Energy Electron Diffraction.
PL	: Photoluminescence.
EBL	: Electrons Blocking Layer.
AM1.5G	: Air Mass Global.
SOI	: Silicon On Insulator.
3J	: Triple Junctions.
TPV	: Thermo Photovoltaïque.
NSE	: Nanostructures Semi-conductrices Epitaxiées.
FIB	: Focused Ion Beam.
GIS	: Gas Injection System.
LMIS	: Liquid Metal Ion Source.
SEM	: Scanning Electron Microscopy.
RTO	: Rapid Thermal Oxidation.
FM	: Frank Van der Merwe.
VW	: Volmer Weber.

SYMBOLES

λ	: longueur d'onde de la lumière incidente.
I_r	: irradiance solaire spectral.
n	: facteur d'idéalité.
N_D	: densité des atomes donneurs.
N_A	: densité des atomes accepteurs.
n_0	: densité des électrons à l'équilibre thermodynamique.
p_0	: densité des trous à l'équilibre thermodynamique.
n	: densité des électrons hors équilibre.
p	: densité des trous hors équilibre.
D_n	: coefficient de diffusion des électrons.
D_p	: coefficient de diffusion des trous.
τ_n	: durée de vie des électrons.
τ_p	: durée de vie des trous.
L_p	: longueur de diffusion des trous.
L_n	: longueur de diffusion des électrons.
α	: coefficient d'absorption.
G	: taux de génération optique.
R	: coefficient de réflexion.
ϕ_0	: flux de photons incidents.
S_n	: vitesse de recombinaison des électrons.
S_p	: vitesse de recombinaison des trous.
I_{obs}	: courant d'obscurité.
I_{ph}	: photo courant.
J_e	: densité de photo courant de l'émetteur.
J_b	: densité de photo courant de la base.
J_{ZCE}	: densité de photo courant de la ZCE.
x_j	: profondeur de jonction.
W	: largeur de la ZCE.
H'	: largeur de la base.
H	: épaisseur de la cellule photovoltaïque
n_i	: concentration intrinsèque.
I_0	: courant de saturation de la diode.
A_c	: surface de la cellule photovoltaïque.
R_s	: résistance série.
R_p	: résistance de shunt.
$n_{1,2}$: facteur d'idéalité de la diode D_1 et D_2 , respectivement.
J_{cc}	: densité de courant de court circuit.
V_{co}	: tension de circuit ouvert.
FF	: facteur de forme.

η	: rendement ou l'efficacité de conversion d'une cellule solaire.
P	: puissance délivrée par une cellule.
E_{ph}	: énergie des photons incidents.
h	: constante de Planck.
\hbar	: constante de Planck réduite.
E	: énergie de l'électron.
m_e^*	: masse effective de l'électron.
m_h^*	: masse effective du trou.
λ_B	: longueur d'onde de de Broglie.
λ_{Bth}	: longueur d'onde de de Broglie thermique
$\rho(E)$: densité d'états d'énergie.
E_g	: énergie de la bande interdite.
θ	: fonction de heavyside.
E_{n_i}	: énergie des niveaux discrets n suivant la direction i avec $i=x$ ou y ou z .
$V(r)$: potential spatial.
$\psi(r)$: fonction d'onde qui décrit le comportement de l'électron (trou).
L_i	: épaisseur de nanostructure suivant la direction i avec $i=x,y,z$.
k_i	: vecteur d'onde du l'électron (trou) suivant la direction i avec $i=x,y,z$.
n_i	: nombre quantique principale suivant la direction i avec $i=x,y,z$.
$N_{empilement}$: nombre d'empilement.
$\langle \varepsilon_{\perp} \rangle$: contrainte moyenne perpendiculaire aux couches.
e	: épaisseur des couches d'espacement entre les différents plans de BQs.
$\varepsilon_{//}$: contrainte parallèle aux couches.
$a_{ie\perp}$: paramètre de maille perpendiculaire de l'ième couche épitaxiale.
$a_{ie//}$: paramètre de maille parallèle de l'ième couche épitaxiale
a_s	: paramètre de maille du substrat.
E_g^B	: énergie de gap du matériau barrière non modifié.
ΔE_v	: discontinuité de la bande de valence.
ΔE_c	: discontinuité de la bande de conduction.
E_c	: bande de conduction.
E_v	: bande de valence.
V_s	: potentiel de la contrainte localisé dans la bande de valence.
C_{ACD}	: paramètre de la courbure de bandes du composé ACD.
x	: fraction molaire d'un élément chimique dans un composé.
k_B	: constante de Boltzmann.
T	: température.
L_w	: épaisseur de puits.
V_{out}	: tension de la sortie.
r	: rayon d'un nanofil.
J_{obse}	: densité du courant d'obscurité de l'émetteur.
J_{obsb}	: densité du courant d'obscurité de la base.
L	: longueur d'un nanofil.
E	: champ électrique.
B	: champ magnétique.
E_F	: énergie de niveau de Fermi.

N_c	: densité effective des électrons.
N_v	: densité effective des trous.
E_{c1}	: énergie de la bande de conduction du matériau barrière.
E_{v1}	: énergie de la bande de valence du matériau barrière.
E_{v2}	: énergie de la bande de valence du matériau nanostructure.
E_{c2}	: énergie de la bande de conduction du matériau nanostructure.
V_d	: tension de diffusion.
th_e	: transition thermique des électrons.
th_t	: transition thermique des trous.
ν	: fréquence de photon.
I	: courant total de la cellule solaire.
I_m	: courant maximale.
V_m	: tension maximale.
P_m	: puissance maximale.
I_{cc}	: courant de court-circuit.
$S_{m\acute{e}tal}$: surface des contacts métalliques.
η_{col}	: rendement de collection.
η_α	: rendement optique.
$N(\lambda)$: flux monochromatique incident.
c	: vitesse de la lumière.
I_{01}	: courant de saturation de la diode D_1 .
I_{02}	: courant de saturation de la diode D_2 .
p_{n0}	: densité des trous minoritaires dans l'émetteur à l'équilibre thermodynamique.
p_n	: densité des trous minoritaires dans l'émetteur après l'éclairement.
n_{p0}	: densité des électrons minoritaires dans la base à l'équilibre thermodynamique.
n_p	: densité des électrons minoritaires dans la base après l'éclairement.
H	: épaisseur de la base de la cellule photovoltaïque.
ΔE_i^e	: séparation inter-niveaux dans la bande de conduction.
ΔE_i^h	: séparation inter-niveaux dans la bande de valence.
E_g^{BQ}	: énergie de gap du matériau boîte quantique.
E_{gB}	: énergie de gap du matériau barrière.
$V^{2,3}(y,z)$: potentiel spatial selon les directions y et z.
$V^1(x)$: potentiel spatial selon la direction x.
$\psi^{2,3}(y,z)$: fonction d'onde selon les directions y et z.
$\psi^1(x)$: fonction d'onde selon la direction x.
$E^1(x)$: énergie de l'électron selon la direction x.
$E^{2,3}(y,z)$: énergie de l'électron selon les directions y et z.
$E_{ptotale}$: densité d'énergie élastique totale.
A	: fonction de constants élastiques.
C_{11}, C_{12}	: constants élastiques.
m_0	: masse d'électron.
E_X	: énergie du point X.
E_L	: énergie du point L.
E_Γ	: énergie du point Γ .
E_{so}	: énergie du spin-orbit.

INTRODUCTION GENERALE

Avec l'épuisement progressif des sources d'énergies fossiles (pétrole, gaz, charbon) et des besoins énergétiques toujours croissants, les énergies renouvelables joueront à l'avenir un rôle de plus en plus important dans nos sociétés.

La plus forte croissance parmi les énergies renouvelables (hydraulique, biomasse, géothermie profonde, etc.), 30% en moyenne par an sur les dix dernières années, est le fait de l'énergie solaire photovoltaïque. La conversion directe du rayonnement solaire en électricité est son principal avantage. Le principal inconvénient de l'énergie solaire photovoltaïque est son coût élevé et le rendement de conversion faible. Actuellement, cette industrie est soutenue par des politiques internationales comme Allemagne, la Chine, le Japon, et USA qui permettent aux pays de réduire leur dépendance énergétique et de respecter leurs engagements concernant les émissions de gaz à effet de serre.

La conversion photovoltaïque utilise le principe de la conversion directe de l'énergie solaire en une énergie électrique, les cellules solaires sont les dispositifs conçus d'effectuer cette transformation. Le matériau principal des cellules photovoltaïques est le silicium. Il est abondant dans la nature, combiné à l'oxygène sous forme d'oxydes (silice, silicates). La réduction de la silice (minerais de quartz) par le carbone (bois, charbon, houille, pétrole) produit un silicium bon marché (20 \$/kg à la fin de 2012 [1]) mais de faible pureté (99%). Les cellules solaires conventionnelles à base de silicium qui sont mises sur marché donnent un rendement qui avoisine le 17%, qui est relativement épuisé par rapport à la grande quantité de l'énergie solaire incidente.

L'importance de l'énergie photovoltaïque a mené le développement de cinq technologies de la cellule solaire qui sont classifiées en trois générations : les cellules solaires de première, deuxième, et troisième génération. Les cellules solaires de première génération sont basées sur le silicium massif avec un rendement de conversion variant entre 26.7 % et 22.3 % [2] selon le type de silicium utilisé (monocristallin ou bien multicristallin), et des coûts de production plus élevés. Les cellules solaires de deuxième génération sont basées sur le silicium amorphe et sur les technologies CIGS et CdTe avec un rendement de conversion actuel variant entre 21.7 % et 21.0 % [2]. Cependant, ces technologies permettent de réduire les coûts de la fabrication mais restent limités dans le terme de miniaturisation par la loi de Moore. Les cellules solaires de troisième génération

sont basés sur les cellules multijonctions et les nanostructures avec un rendement de conversion maximal de 46.2 et 42.0 %, respectivement [2][3][4] sous un spectre solaire concentré. Dans ce dernier type de génération une meilleure miniaturisation pour l'intégration des dispositifs a été atteinte grâce aux nanostructures de basse dimensionnalité telles que les puits quantiques (PQs), les fils quantiques (FQs), les boîtes quantiques (BQs), et les nanofils (NFs). Les propriétés physiques et optiques remarquables de ces configurations qui résultent de la quantification des états d'énergie et le confinement des porteurs de charge ont imposé un grand intérêt dans le plan technologique.

La formation d'une nanostructure de basse dimensionnalité consiste à insérer un matériau de petit gap dans une matrice d'un matériau de grand gap. Les nanostructures permettent le confinement des porteurs de charge dans des puits de potentiel, et selon le degré de confinement, ils sont classés en trois types : PQs, FQs et BQs. Dans les BQs, le degré de confinement est plus élevé, et les porteurs de charge occupent des états énergétiques discrets, ce qui veut dire qu'ils sont confinés dans les trois directions de l'espace. Les premières boîtes quantiques élaborées par épitaxie ont été énoncées dans le début des années 1990 [5][6]. Expérimentalement, les boîtes quantiques sont employés pour la création des bandes intermédiaires dans la cellule solaire conventionnelle afin de gagner un photocourant supplémentaire par deux étapes d'absorption des photons moins énergétiques et par conséquent l'amélioration du rendement de conversion [7][8][9]. Ceci est grâce à la bande interdite variable de BQ par le control de sa taille. Avec ces supériorités mentionnées, les BQs sont des bons choix pour les applications aux sources laser, détecteurs infrarouges et cellules solaires. Actuellement, la plupart des recherches dans ce domaine ont été réalisés sur les matériaux III-V et ses alliages comme le GaAs, InAs, GaSb, InSb, InGaAs, InGaN, etc, qui sont caractérisés par un gap direct et une mobilité électronique importante. Cependant, ils existent d'autres recherches sur le silicium et les matériaux IV comme par exemple SiGe dans le but d'améliorer les performances des cellules solaires à base de silicium.

La technique la plus encourageante pour la fabrication des BQs s'appelle l'autoassemblage selon le mode de croissance Stranski-Krastanov (SK) [10]. Ce mode de croissance est le cas intermédiaire entre la croissance bidimensionnelle (2D) nommé Frank-Van der Merwe (FM) et la croissance tridimensionnelle (3D) nommé Volmer-Weber (VW). Ces modes de croissance consistent à faire croître des couches minces par épitaxie sur un substrat. La différence entre ces modes de croissance résulte de la bataille entre l'énergie cinétique des adatoms et l'énergie libre de la surface du substrat. Dans le mode de

croissance Frank-Van der Merwe, l'énergie libre de la couche épitaxiale et l'interface est plus faible que celle du substrat et par conséquent des couches 2D complètes et lisses sont apparus. Par contre dans le mode de croissance Volmer-Weber, l'énergie libre de la couche épitaxiale est plus élevée que celle de la surface du substrat. Expérimentalement, plusieurs techniques de croissance de BQs utilisent le mode SK comme par exemple l'épitaxie en phase vapeur aux organométalliques (MOCVD metalorganic vapor phase epitaxy), l'épitaxie par jets moléculaires (MBE molecular beam epitaxy), ou par l'épitaxie par jets chimique (CBE chemical beam epitaxy). De plus, pour la caractérisation et la détermination des propriétés optiques et physiques de ces objets, on a besoin d'utiliser des équipements de haute technologie comme le faisceau d'ions concentrés (FIB focused ion beam), microscope à force atomique (AFM atomic force microscopy), microscope électronique à balayage (SEM scanning electron microscopy), la photoluminescence (PL).etc.

L'objectif principal de ce présent travail porte essentiellement sur la modélisation et simulation des cellules solaires à PQs, BQs et NFs à base de nouveaux matériaux semi-conducteurs III-V. On cherche d'une part de trouver des nouveaux matériaux III-V binaire, ternaires et même des matériaux IV susceptibles à être employés comme des nanostructures de basse dimensionnalité, et d'autre part analyser leur influence sur les caractéristiques électriques et optiques d'une cellule solaire conventionnelle avec un matériau substrat GaAs, GaN, ou bien Si.

Cette thèse comporte quatre chapitres. Le premier chapitre est consacré à la physique de la cellule photovoltaïque par l'étude de la jonction PN et l'interaction du rayonnement/semi-conducteur. Ensuite, nous présentons le principe de fonctionnement et les modèles électriques idéals et réels d'une cellule solaire. Ainsi, nous décrivons les caractéristiques électriques principales d'une cellule photovoltaïque et les pertes physiques et technologiques qui limitent leur rendement.

Le deuxième chapitre porte sur l'état de l'art des nanostructures de basse dimensionnalité, on concentre plus sur les boîtes quantiques BQs pour les applications photovoltaïques. Les propriétés de BQs ainsi le mode de croissance seront détaillés dans ce chapitre. Les différents matériaux semi-conducteurs III-V et IV susceptibles d'être employés pour la conception des cellules solaires à boîtes quantique seront par la suite présentés. En plus les techniques de croissances qu'ils existent seront finalement décrites.

Le troisième chapitre est consacré aux résultats de simulation qui ont été menées dans ce travail. Plusieurs structures de cellules solaires de nanostructures de basse

dimensionnalité ont été étudiées. On cite par exemple : la structure GaSb/GaAs, InSb/GaAs, InAsP/GaAs, InGaN/GaN, InAsP/Si à BQs ; InGaN/GaN, InAsP/GaAs, SiGe/Si à PQs, et le nanofil cœur/coquille Si/SiGe. L'influence de plusieurs paramètres comme par exemple le nombre, la taille de la boîte et le puits quantique, la température, la composition des matériaux ternaires sur les paramètres électriques, la caractéristique courant-tension J-V, l'efficacité quantique externe EQE, le spectre de photoluminescence PL, et le coefficient d'absorption a été montré et présenté. Ces travaux nous ont permis de participer à des conférences internationales et de préparer des publications scientifiques.

Le quatrième chapitre présente le travail pratique qu'on a effectué durant notre stage qui est déroulé au sein de l'équipe Nanostructures Semi-conductrices Epitaxiées (NSE) de l'institut IM2NP UMR CNRS AMU en France. On a fabriqué des paquets de nanofils cœur/coquille Si/SiO₂ dans le but de les utiliser plus tard dans les cellules solaires. On y décrit les différentes techniques utilisées comme le FIB pour la fabrication des NF, l'AFM et le MEB pour l'analyse et la caractérisation des nanostructures, et la lithographie laser pour la structuration à l'échelle micrométrique et la métallisation des nanofils réalisés.

CHAPITRE 1

LA PHYSIQUE DE LA CELLULE SOLAIRE

1.1. Introduction :

La conversion photovoltaïque est la transformation directe de l'énergie solaire (des photons) en énergie électrique exploitable. Les cellules photovoltaïques sont les dispositifs qui permettent ce processus. Ce chapitre présente les bases indispensables de la physique de cellule photovoltaïque pour comprendre son fonctionnement. Nous abordons en premier lieu quelques dates historiques sur le photovoltaïque. Ensuite, nous décrirons le principe du fonctionnement, le schéma électrique idéal et réel d'une cellule photovoltaïque et ses caractéristiques principales ainsi que les pertes physiques et technologiques qui limitent le rendement de la photopile.

1.2. Historique du photovoltaïque :

L'utilisation de système photovoltaïque est entamée depuis environ 40 années. Les applications ont commencés avec le programme spatial pour la transmission des signaux radio par les satellites, ensuite avec les balises en mer et l'équipement des sites isolés à travers certains pays du monde.

Voici quelques dates charnières du développement de ce domaine :

1839 : Le physicien français Edmond Becquerel découvre l'effet photovoltaïque [11].

1875 : Werner Von Siemens expose devant l'académie des sciences de Berlin un article sur l'effet photovoltaïque dans les semiconducteurs, mais le phénomène reste encore jusqu'à la seconde guerre mondiale, une découverte anecdotique.

1954 : Trois chercheurs américains, Chaplin, Pearson et Prince mettent au point une cellule photovoltaïque à haut rendement au moment où l'industrie spatiale naissante cherche des solutions nouvelles pour alimenter ses satellites [12].

1958 : Une cellule avec un rendement de 9% est mise au point. Les premiers satellites alimentés par des cellules solaires sont alors envoyés dans l'espace.

1973 : La première maison alimentée par des cellules solaires photovoltaïques est construite pour alimenter l'université de Delaware aux États-Unis.

1995 : Des programmes de toits photovoltaïques raccordés aux réseaux ont été lancés au Japon et en Allemagne et qui se sont ainsi généralisés depuis 2001 [13].

1.3. Effet Photovoltaïque :

Comme il a été défini plus haut, la conversion photovoltaïque est la transformation de l'énergie des photons provenant du soleil en énergie électrique grâce au processus d'absorption de la lumière par la matière semiconductrice. Lorsqu'un photon est absorbé, il éjecte un électron d'un niveau d'énergie inférieure vers un niveau d'énergie supérieure, créant ainsi une paire électron-trou. Généralement, cette paire électron-trou revient à l'équilibre (état initial) en transformant son énergie électrique en énergie thermique, alors le matériau chauffe.

Récupérer toute ou une portion de cette énergie sous forme électrique est justement l'objectif de la conversion photovoltaïque. Comment en faire ? Tout simplement en séparant ces paires électron-trou et en les forçant à passer dans un circuit extérieur. Cela est possible grâce au champ électrique qui présente dans les jonctions pn, réalisées en associant un semiconducteur de type n avec un semiconducteur de type p. Pour bien comprendre le principe de fonctionnement des cellules photovoltaïques, il est indispensable de définir d'abord la jonction pn ainsi que des notions sur l'interaction rayonnement-matière (semiconducteur).

1.3.1. Jonction pn :

1.3.1.1. Semiconducteur intrinsèque :

Un semiconducteur intrinsèque est un matériau idéal ne possédant ni défaut physique ni défaut chimique, c-à-d, un matériau dépourvu de toute impureté susceptible de modifier la densité des porteurs. Les électrons de la bande de conduction ne peuvent résulter que par l'excitation thermique des électrons de la bande de valence. Les électrons et les trous existent nécessairement par paires ($n = p = n_i$). La densité intrinsèque des porteurs et le niveau de Fermi intrinsèque sont donnés par les expressions suivantes [14]:

$$n_i = (N_c N_v)^{1/2} \exp\left(\frac{-E_g}{2k_B T}\right) \quad (1.1)$$

$$E_F = \frac{1}{2}(E_c + E_v) + \frac{3}{4}k_B T \cdot \log\left(\frac{m_h^*}{m_e^*}\right) \quad (1.2)$$

Avec :

N_c : densité effective d'état des électrons.

N_v : densité effective d'état des trous.

E_c : énergie de la bande de conduction.

E_v : énergie de la bande de valence.

E_g : énergie de la bande interdite (le gap).

m_e^* , m_h^* : masses effectives respectives des électrons et des trous.

k_B : constante de Boltzmann.

T : température en K.

1.3.1.2. Semiconducteur extrinsèque :

Les semiconducteurs intrinsèques ne sont pas d'une grande utilité en tant que tels ; ils servent de base aux semiconducteurs dopés : on y rajoute des impuretés (dopants) pour changer leurs comportements, particulièrement leurs propriétés électriques. Il existe deux types de semiconducteurs extrinsèques [15] :

a. Semiconducteur dopé de type n :

Un semiconducteur dopé de type n est un semiconducteur dont la densité des électrons est supérieure à celle des trous. On y introduit généralement du phosphore, de l'arsenic ou de l'antimoine. Prenons l'exemple de silicium (4 électrons dans la couche extérieure) dans lequel on introduit l'arsenic (5 électrons dans la couche externe). L'intérêt est que pour des températures supérieures à 0 K, les atomes d'arsenic sont ionisés, ce qui revient de faire passer l'électron de niveau donneur vers la bande de conduction. Donc, cet élément joue le rôle d'un générateur d'électrons, et la densité des porteurs libres du semiconducteur lorsque tous les donneurs sont ionisés, devient alors:

$$n = n_0 + N_D \quad (1.3)$$

Avec :

N_D : concentration des atomes donneurs.

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

b. Semiconducteur dopé de type p :

Un semiconducteur dopé de type p est un semiconducteur dont la densité des trous est supérieure à celle des électrons. On y introduit généralement du bore, de l'aluminium ou du gallium. Prenons l'exemple de silicium (4 électrons dans la couche extérieure) dans lequel on introduit le bore (3 électrons dans la couche externe). L'intérêt est que pour des températures supérieures à 0 K, les atomes de bore sont ionisés ce qui revient de faire passer l'électron de la bande de valence vers le niveau accepteur. Donc, le bore joue le rôle d'un générateur de trous, et la densité des porteurs libres du semiconducteur devient lorsque tous les atomes accepteurs sont ionisés:

$$p = p_0 + N_A \quad (1.4)$$

N_A : concentrations des atomes accepteurs.

p_0 : densité intrinsèque des trous à l'équilibre thermodynamique.

Le plan qui sépare deux matériaux semiconducteurs en contact et de dopages différents s'appelle une jonction pn. Si le gap de ces deux matériaux est le même, la jonction est dite homojonction, si c'est le cas contraire, la jonction est dite hétérojonction.

1.3.1.3. Homojonction :

Avant le contact, un semiconducteur de type n est caractérisé par des électrons majoritaires (dopé par le phosphore "P" par exemple) et un semiconducteur de type p de même énergie du gap est caractérisé par des trous majoritaires (dopé par le bore "B" par exemple). Mettre en contact ces deux matériaux, provoque la diffusion des électrons du semiconducteur de type n vers celui du type p créant derrière eux des atomes donneurs ionisés positivement N_D^+ . Quant à la diffusion des trous du semiconducteur de type p vers le type n, ils laissent derrière eux des atomes accepteurs ionisés négativement N_A^- . Ce processus se poursuit jusqu'à l'alignement final des niveaux de Fermi des deux types de semiconducteurs. La diffusion des porteurs des charges dans les deux sens va donc créer une zone dépeuplée à côté de la jonction, c'est la Zone de Charge d'Espace (ZCE) qui est constituée d'ions positifs

d'une part et d'ions négatifs d'autre part. Par conséquent, il apparaît finalement un champ électrique dans cette zone dirigée de la zone de charge positive vers celle de charge négative et qui est lié à la tension de diffusion V_d par la relation de type gradient.

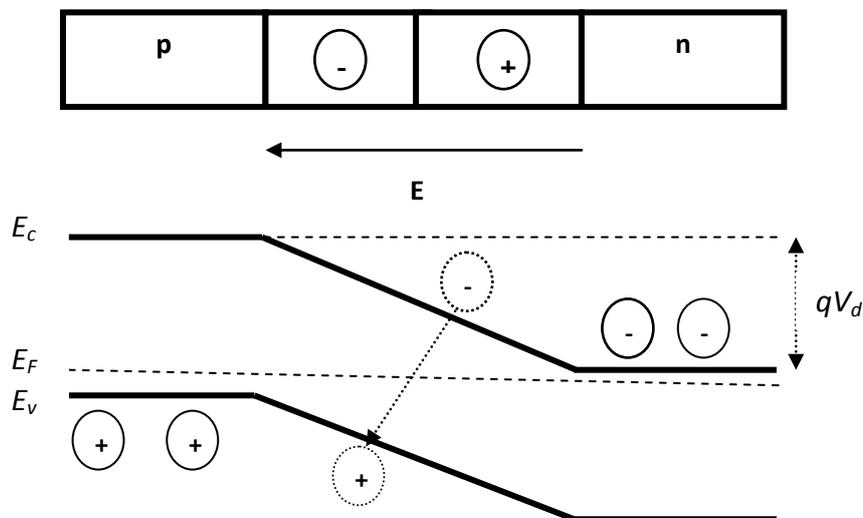


Figure 1.1 : Diagramme énergétique d'une jonction pn à l'équilibre thermodynamique [16].

1.3.1.4. Hétérojonction :

Comme on a dit précédemment, une hétérojonction consiste à placer deux semiconducteurs d'énergie de gap différente en contact. On peut obtenir une énergie de gap différente soit par le changement du type de semiconducteur, par exemple un semiconducteur de type III-V avec un semiconducteur de type II-VI ; soit par la variation de la composition de même semiconducteur : semiconducteurs ternaires et quaternaires comme le $\text{InAs}_x\text{P}_{1-x}$, $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y}$. L'avantage d'une hétérojonction est la facilité de contrôler le transport de porteurs de charges et la barrière de potentiel qV_d indépendamment ce qui donne un degré de liberté supplémentaire dans le système. Ainsi, le profil de potentiel proche de l'hétérojonction présente des discontinuités ce qui favorise le confinement des porteurs de charges. Selon l'alignement de bandes qui produit la discontinuité, le type de l'hétérojonction est classé en trois types : type I, type II et type III [17].

a. Type I:

Dans ce type d'hétérostructure, la bande interdite d'un matériau se chevauche entièrement avec la bande interdite de l'autre matériau comme montre la figure (1.2.a) et la discontinuité de la bande de conduction ΔE_c et de la bande de valence peut être exprimée comme suit :

$$\Delta E_c = E_{c1} - E_{c2} \quad (1.5)$$

$$\Delta E_v = E_{v1} - E_{v2} \quad (1.6)$$

b. Type II :

Dans ce type d'hétérostructure, $E_{v1} > E_{v2}$ et ΔE_c peut être supérieure ou inférieure à E_{g1} . Si $\Delta E_c < E_{g1}$ l'hétérostructure de type II est dite type II décalé (figure (1.2.b)), sinon elle s'appelle type II désaligné (figure (1.2.c)). Dans les deux classes les électrons et les trous sont confinés séparément dans les deux matériaux.

c. Type III :

L'hétérojonction de type III est formé par la combinaison d'un semi-métal avec des bandes inversés et un semiconducteur comme lev montre la figure (1.2.d). Un exemple de ce type est HgTe/ CdTe.

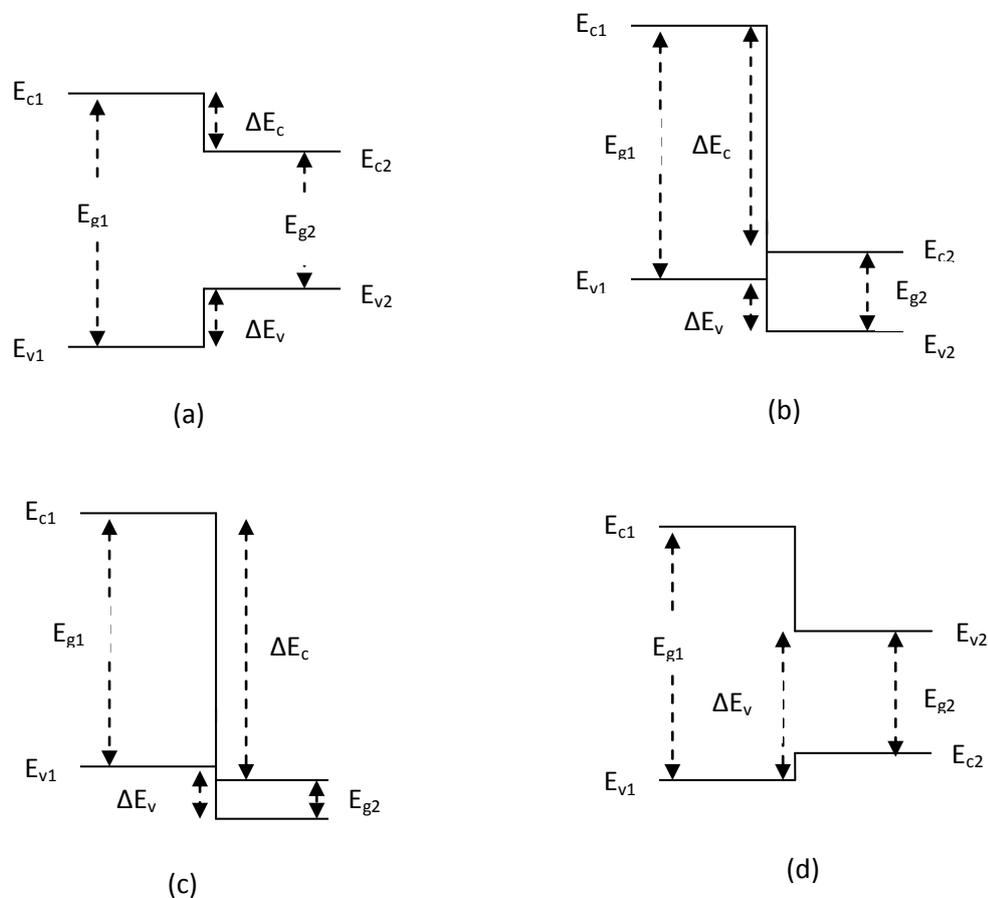


Figure 1.2 : Types de l'hétérojonction : (a) Type I ; (b) Type II-décalé ; (c) Type II- désaligné ; (d) Type III.

1.3.2. Interaction rayonnement-matière :

Lorsqu'un photon interagit avec un électron, il transfère intégralement son énergie à ce dernier, à condition que le niveau énergétique final de l'électron soit autorisé et libre. Dans les semiconducteurs, la largeur de la bande interdite est comprise d'environ 0.6 à 2 ou 3 eV, elle est de 1.12 eV pour le silicium à la température 300 K. Donc, tous les photons du spectre solaire d'énergie $E_{ph} \geq 1.12 \text{ eV}$ pourront être absorbés en fournissant de l'énergie à l'électron situé dans la bande de valence (correspond aux électrons des liaisons chimiques) pour le faire passer vers la bande de conduction comme le montre la figure 1.3. L'excès d'énergie $E_{ph} - E_g$ est perdu immédiatement sous forme de chaleur (transition th_e). Si la transition électronique concerne un électron de l'intérieur de la bande de valence la thermalisation aura lieu pour les deux types de porteurs th_e et th_t . Contrairement à ce qui se passe dans le métal, les électrons et les trous peuvent participer au courant électrique avant de disparaître par le processus de recombinaison. Ceci est dû au fait que, avant de se recombiner, les porteurs ont une certaine durée de vie dans les bandes permises (de conduction et de valence). Il est donc possible de dissocier ces paires électrons-trous pour utiliser l'énergie restante. On constate bien que seuls les semiconducteurs possèdent la structure électronique permettant de générer, à partir du rayonnement solaire des paires électron-trou utilisables dans le processus électrique.

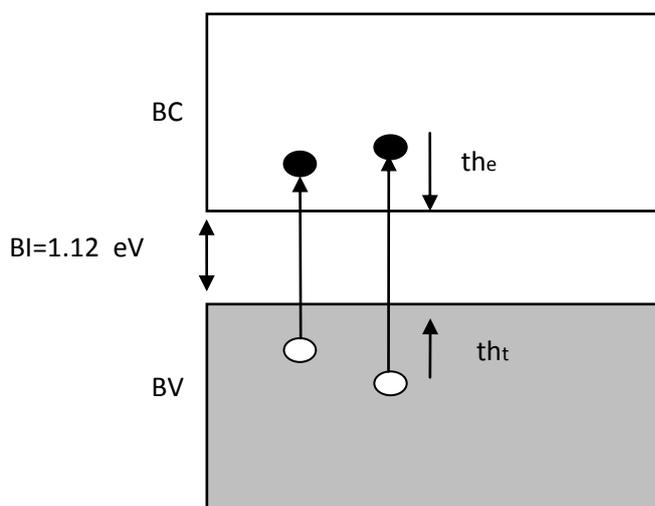


Figure 1.3: Structure électronique d'un semiconducteur de silicium.

1.3.3. Zone utile du spectre solaire :

Les photons du spectre solaire ne vont pas être tous utilisables pour la génération des paires électron-trou. Les photons qui ont une énergie inférieure au gap d'un semiconducteur comme celui du silicium $E_{ph} < E_g$ ne seront pas absorbés, qui est donc transparent pour ces photons. Si $E_{ph} > E_g$, le photon est absorbé, mais une partie de l'énergie va disparaître par le phénomène de la thermalisation. La figure (1.4) résume ceci sur le spectre solaire de référence (AM1.5 Global) sous formes d'aires, le type du semiconducteur étant ici le silicium.

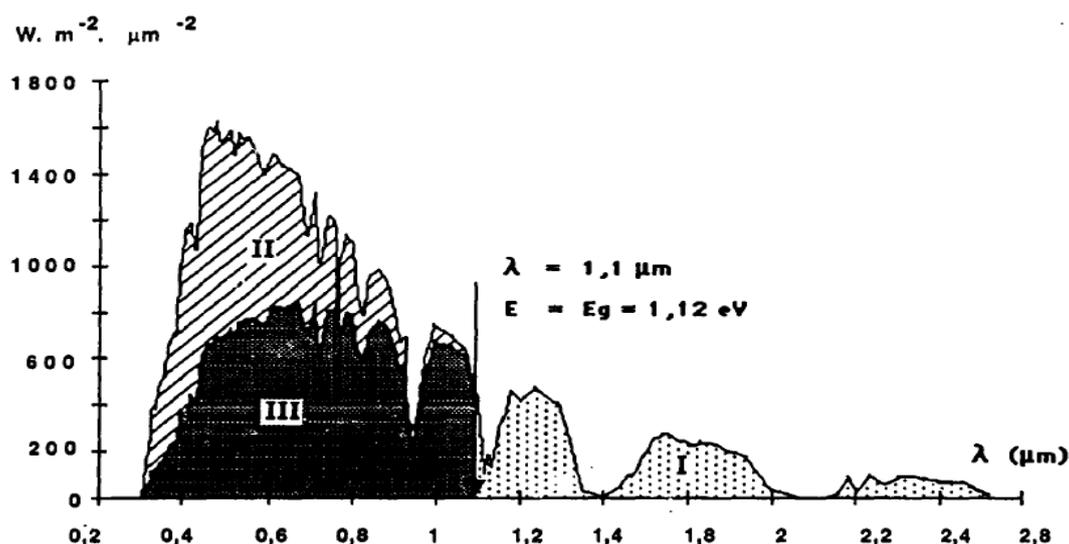


Figure 1.4: Principales pertes intrinsèques pour une cellule solaire en silicium. (I) pertes des photons de grandes longueurs d'onde (20%), (II) pertes dues à l'énergie excédentaire des photons (32%), (III) les photons absorbés (48%) [18].

A partir de cette figure, on constate que la zone utile du spectre solaire pour silicium est la zone III. Ainsi, la cellule photovoltaïque au silicium industriel ne répond donc que dans un intervalle limité du spectre solaire de 0.3 à 1.1 μm en soustrayant la thermalisation.

1.3.4. Transitions directes et indirectes :

Si le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction de semiconducteur se trouvent dans le même espace des k , il s'agit d'un gap direct. Les transitions inter bandes s'effectuent verticalement et sont radiatives, un exemple pour ce cas : le semiconducteur GaAs utilisé surtout dans l'optoélectronique. En revanche, si le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction ne se trouvent pas dans le même espace des k , il s'agit alors d'un gap indirect comme silicium. Les transitions électroniques entre les extrema des bandes sont obliques, donc non-radiatives parce qu'elles

impliquent un changement du vecteur d'onde de l'électron. Les électrons du maximum de la bande de valence peuvent toute fois être excités vers le minimum relatif central de la bande de conduction par l'absorption d'un photon de haute énergie. Pour que la transition s'effectue dans le gap indirect, il faut qu'un phonon soit absorbé ou émis par l'électron afin que le vecteur d'onde de ce dernier correspond au minimum de la bande de valence pour absorber un photon (figure (1.5)).

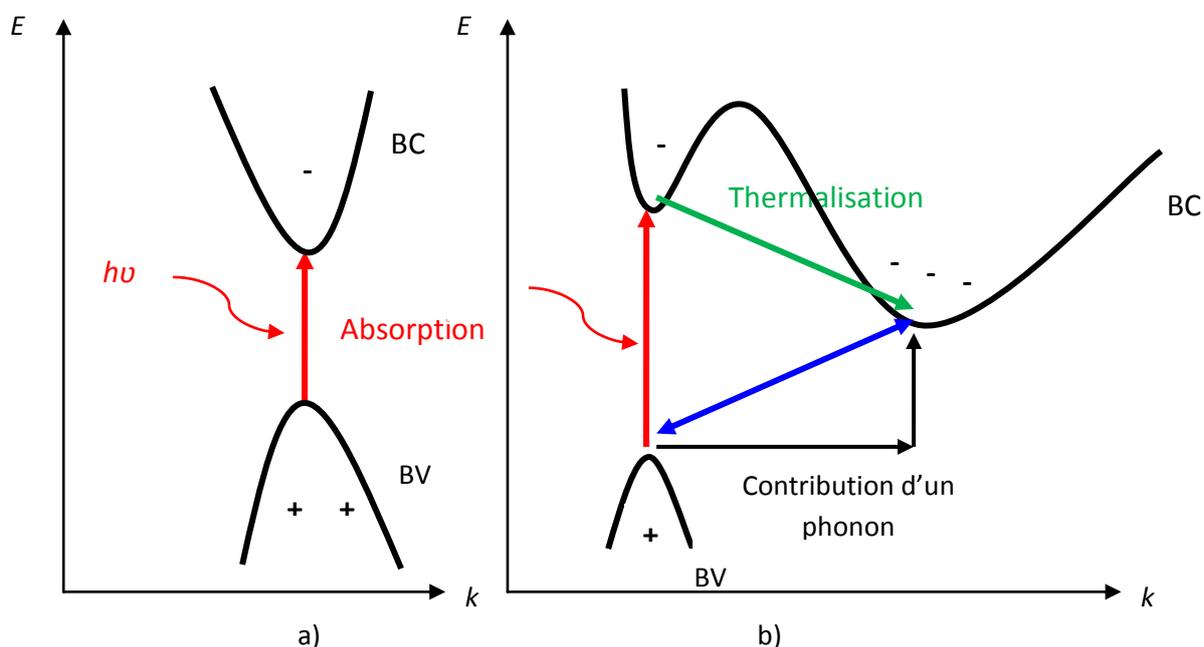


Figure 1.5 : Transitions électroniques inter bandes dans les semi.conducteurs. a) correspond à un semi.conducteur à gap direct .b) semi.conducteur à gap indirect [19].

1.4. Recombinaison de porteurs en excès :

Les porteurs minoritaires (électrons dans un matériau type p et trous dans un matériau type n) n'existeront en moyenne que pour un temps égal à la durée de vie qui correspond au temps moyen entre la création d'une paire électron-trou et sa recombinaison.

1.4.1. Mécanismes de recombinaison :

Dans les semiconducteurs, les porteurs de charge libre se recombinent par des mécanismes principaux, tels que la recombinaison SRH : SHOCKLEY-READ-HALL [14] introduite par les défauts cristallin dus aux atomes d'impuretés (piège pour les électrons), la recombinaison radiative des photons et enfin la recombinaison d'Auger ou l'excès d'énergie peut être transféré à un électron ou un trou (figure (1.6)).

1.4.1.1. Recombinaison SRH :

L'apparition des états électroniques dans le gap (défauts) par la présence d'impuretés et d'imperfections cristallines dans les semiconducteurs, conduit au piégeage des électrons ou

des trous pour les transférer ensuite vers la bande de conduction ou de valence [20], ce qui influe sur la conductivité des semiconducteurs. Ces défauts peuvent être des centres de recombinaisons des paires électron-trou par la capture d'un électron de la bande de conduction et un trou de la bande de valence provoquant ensuite leur recombinaison.

1.4.1.2. Recombinaison Auger :

Aux niveaux de dopage ou d'injection élevés, la recombinaison d'Auger peut être effectuée, [21], c'est une recombinaison à trois particules où l'énergie libérée lors de la recombinaison d'un électron de la bande de conduction avec un trou de la bande de valence est transférée à un autre électron ou un autre trou [22]. Le processus de recombinaison d'Auger est non radiatif, il est spécifique aux semiconducteurs à gap indirect.

1.4.1.3. Recombinaison radiative :

Les recombinaisons radiatives à la température ambiante dans le silicium sont directes, ou bande-à-bande [23], impliquant un électron de la bande de conduction et un trou de la bande de valence, l'excès d'énergie est libéré sous forme d'un photon d'énergie proche du gap. L'émission de photons résulte de la recombinaison radiative de porteurs, ainsi le taux global d'émission de photons correspond au taux de recombinaisons radiatives de porteurs.

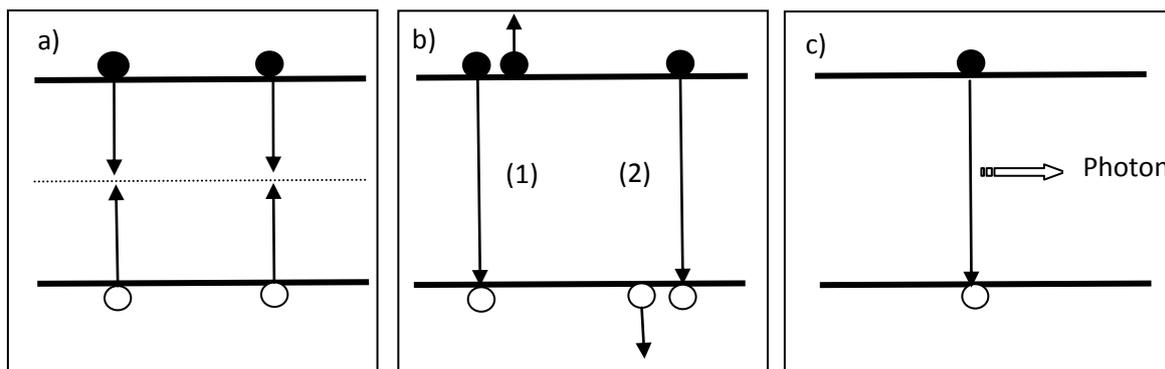


Figure 1.6: Mécanismes de recombinaison a) recombinaison SRH, b) recombinaison Auger, c) recombinaison radiative.

1.5. Principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque conventionnelle :

La cellule photovoltaïque est composée par une jonction pn qui permet de séparer spatialement les électrons et les trous photogénérés grâce à la variation du potentiel électrochimique au sein de cette structure. Les paires électron-trou photogénérés dans la zone de charge espace sont dissociés grâce au champ électrique interne: les trous sont accélérés vers la zone p et les électrons sont accélérés vers la zone n, créant ainsi un courant de

génération. Dans les zones n ou p, les photosporteurs minoritaires générés diffusent et ceux qui atteignent la ZCE (dépendent de la longueur de diffusion L_D), sont propulsés par le champ électrique vers les zones où elles sont majoritaires et ils peuvent être collectés par les contacts ohmiques, créant d'un courant de diffusion. Ces deux contributions du courant s'ajoutent pour donner un photocourant résultant I_{ph} . Le courant qui s'oppose au courant de la diode s'appelle courant d'obscurité I_{obs} , résulte de la polarisation directe de la cellule. Le courant total I est :

$$I = I_{obs} - I_{ph} \quad (1.7)$$

Avec :

$$I_{obs} = I_0 \cdot \left(\exp\left(\frac{qV}{nk_B T}\right) - 1 \right) \quad (1.8)$$

Avec :

V : potentiel aux bornes de la jonction.

I_0 : courant de saturation inverse de la diode, il dépend de la concentration intrinsèque.

q : charge des électrons ($q = 1.6 \times 10^{-19} C$).

k_B : constante de Boltzmann ($k = 1.38 \times 10^{-23} J \cdot K^{-1}$).

T : température (K).

n : facteur d'idéalité de la diode (égale à 1 si la diode est idéale et égale à 2 si la diode est entièrement gouvernée par le phénomène de la génération/recombinaison).

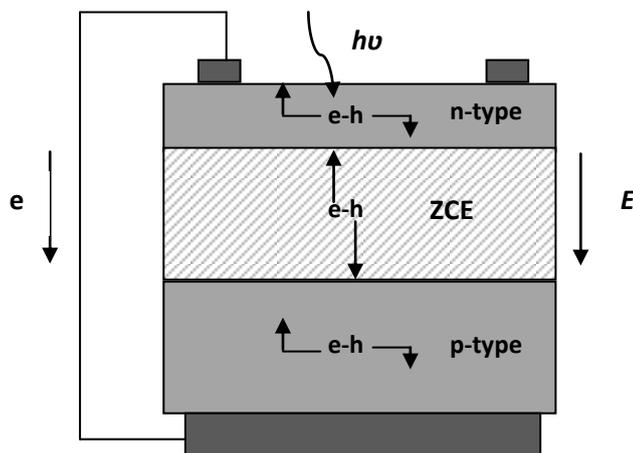


Figure 1.7 : Structure d'une simple cellule solaire [24].

1.6. Calcul de photocourant :

Soient les dimensions de la cellule photovoltaïque suivante :

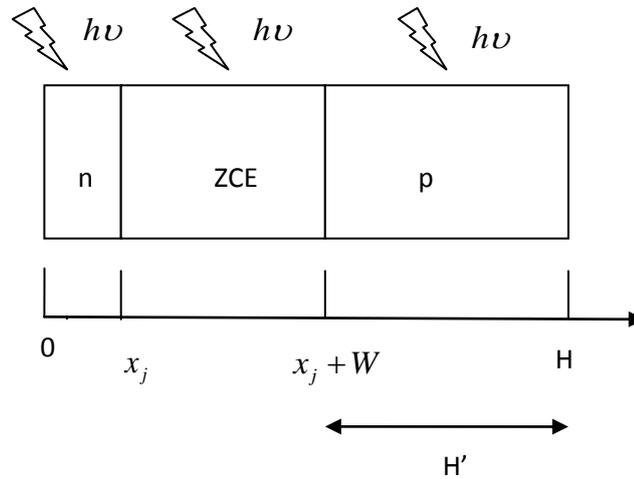


Figure 1.8 : Schéma général d'une cellule photovoltaïque.

1.6.1. Photocourant du front (émetteur) :

On suppose qu'on est dans le cas de la faible injection, et que le champ électrique extérieur E est nul et qu'on est dans le régime stationnaire ; L'équation de continuité s'écrit alors sous la forme:

$$D_p \frac{d^2}{dx^2} (p_n - p_{n_0}) + G - \frac{(p_n - p_{n_0})}{\tau_p} = 0 \quad (1.9)$$

Avec G , le taux de génération des photosporteurs, il est donné par la relation suivante:

$$G(\lambda, x) = \alpha(\lambda) \cdot \phi_0(\lambda) \cdot (1 - R(\lambda)) \cdot \exp(-\alpha(\lambda) \cdot x) \quad (1.10)$$

Dans cette équation, $\phi_0(\lambda)$ est le nombre de photons incidents par unité de temps et par unité de surface, et $R(\lambda)$ est le coefficient de réflexion.

Après la résolution de l'équation (1.9) et supposant que la densité de courant de porteurs minoritaires (trous) provient seulement de la diffusion, on trouve la relation de la densité du photocourant de l'émetteur (type n) :

$$J_e(\lambda) = \frac{q\alpha\phi_0(1-R)L_p}{\alpha^2 L_p^2 - 1} \left\{ -\alpha L_p \exp(-\alpha x_j) + \frac{\left(\frac{S_p L_p}{D_p} + \alpha L_p \right) - \exp(-\alpha x_j) \cdot \left[\frac{S_p L_p}{D_p} \cdot \text{Ch}\left(\frac{x_j}{L_p}\right) + \text{sh}\left(\frac{x_j}{L_p}\right) \right]}{\frac{S_p L_p}{D_p} \cdot \text{sh}\left(\frac{x_j}{L_p}\right) + \text{ch}\left(\frac{x_j}{L_p}\right)} \right\} \quad (1.11)$$

1.6.2. Photocourant de la base :

Pour la base de type p l'équation de continuité s'écrit sous la forme :

$$D_n \frac{d^2}{dx^2} (n_p - n_{p_0}) + G - \frac{(n_p - n_{p_0})}{\tau_n} = 0 \quad (1.12)$$

Après la résolution de l'équation (1.12) et supposant que la densité de courant de porteurs minoritaires (électrons) provient seulement de la diffusion, on trouve la relation de la densité du photocourant de la base (type p) :

$$J_b(\lambda) = \frac{q\phi_0(1-R)L_n\alpha}{\alpha^2 L_n^2 - 1} \cdot \exp(-\alpha(x_j + W)) \cdot \left\{ \alpha L_n - \frac{\left(\frac{S_n L_n}{D_n} \right) \cdot \left[ch\left(\frac{H'}{L_n}\right) - \exp(-\alpha H') \right] + \alpha L_n \exp(-\alpha H') + sh\left(\frac{H'}{L_n}\right)}{\frac{S_n L_n}{D_n} \cdot sh\left(\frac{H'}{L_n}\right) + ch\left(\frac{H'}{L_n}\right)} \right\} \quad (1.13)$$

1.6.3. Photocourant de la zone de charge espace (courant de génération) :

La densité du photocourant résulte de la dissociation des paires électron-trou dans la zone de charge d'espace par le champ intense est donné par la relation suivante :

$$J_{ZCE}(\lambda) = q\phi_0(1-R)(1 - \exp(-\alpha W)) \cdot \exp(-\alpha x_j) \quad (1.14)$$

Sachant que les conditions aux limites dans les trois régions de la cellule sont :

$$\begin{aligned} \text{À } x=0 & \quad D_p \cdot \frac{d}{dx} (p_n - p_{n_0}) = S_p (p_n - p_{n_0}) \\ \text{À } x=x_j & \quad p_n = p_{n_0} \\ \text{À } x=x_j+W & \quad n_{p_0} = n_p \cdot \\ \text{À } x=H & \quad -D_n \frac{d}{dx} (n_p - n_{p_0}) = S_n \cdot (n_p - n_{p_0}) \end{aligned}$$

Avec

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

$\phi_0(\lambda)$: flux de photons incidents non réfléchis (transmis ou absorbés).

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

D_p : coefficient de diffusion des trous minoritaires photo créés dans l'émetteur.

L_p : longueur de diffusion des trous minoritaires photo créés dans l'émetteur.

x_j : profondeur de jonction.

S_p : vitesse de recombinaison des trous minoritaires photo créés dans l'émetteur (type n).

τ_p : durée de vie des trous minoritaires photo créés dans l'émetteur (type n).

p_{n_0} : densité des trous minoritaires dans l'émetteur à l'équilibre thermodynamique.

p_n : densité des trous minoritaires dans l'émetteur après l'éclairement.

D_n : coefficient de diffusion des électrons minoritaires photo créés dans la base.

L_n : longueur de diffusion des électrons minoritaires photo créés dans la base.

S_n : vitesse de recombinaison des électrons minoritaires photo créés dans la base (type p).

τ_n : durée de vie des électrons minoritaires photo créés dans la base (type p).

n_{p_0} : densité des électrons minoritaires dans la base à l'équilibre thermodynamique.

n_p : densité des électrons minoritaires dans la base après l'éclairement.

H : épaisseur de la cellule photovoltaïque.

H' : épaisseur de la base de la cellule photovoltaïque.

W : largeur de la Zone de Charge Espace (ZCE).

La densité du photocourant total est alors la sommation des contributions de ces trois zones:

$$J_{ph}(\lambda) = J_b(\lambda) + J_e(\lambda) + J_{ZCE}(\lambda) \quad (1.15)$$

1.7. Courant d'obscurité :

Le courant d'obscurité est le courant obtenu par la polarisation de la jonction pn qui constitue la cellule photovoltaïque (c.-à-d. la cellule sans éclairage).

La densité du courant d'obscurité dans l'émetteur est :

$$J_{obse} = \frac{qD_p n_i^2}{N_D L_p} \left[\frac{\frac{D_p}{S_p L_p} th\left(\frac{x_j}{L_p}\right) + 1}{\frac{D_p}{S_p L_p} + th\left(\frac{x_j}{L_p}\right)} \right] \cdot \left(\exp\left(\frac{qV}{k_B T}\right) - 1 \right) \quad (1.16)$$

La densité du courant d'obscurité dans la base est :

$$J_{obsb} = \frac{qD_n n_i^2}{N_A L_n} \left(\frac{\frac{D_n}{S_n L_n} th\left(\frac{x_j + W}{L_n}\right) + 1}{\frac{D_n}{S_n L_n} + th\left(\frac{x_j + W}{L_n}\right)} \right) \cdot \left(\exp\left(\frac{qV}{k_B T}\right) - 1 \right) \quad (1.17)$$

Tandis que la densité du courant d'obscurité total est :

$$J_{obs} = J_{obse} + J_{obsb} = J_0 \cdot \left(\exp\left(\frac{qV}{k_B T}\right) - 1 \right) \quad (1.18)$$

Avec J_0 la densité du courant de saturation de la jonction pn.

1.8. Modèle électrique d'une cellule photovoltaïque :

Le modèle réel d'une cellule solaire comporte un générateur de courant qui modélise l'éclairement et une diode parallèle qui modélise la jonction pn, et en plus une résistance série et une résistance parallèle ainsi qu'une deuxième diode en parallèle.

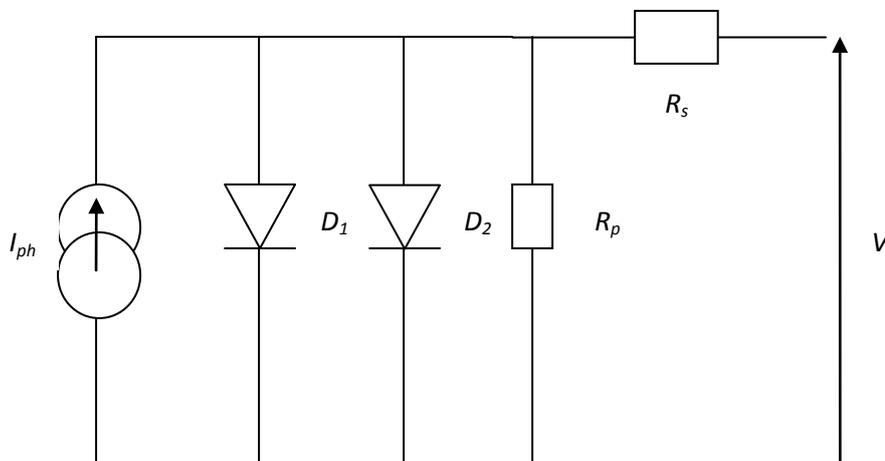


Figure 1.9 : Modèle électrique réel d'une cellule photovoltaïque [25].

La relation du courant délivré par la cellule photovoltaïque s'écrit :

$$I = I_{01} \cdot \left(\exp\left(q \cdot \frac{(V - R_s I)}{n_1 k_B T}\right) - 1 \right) + I_{02} \cdot \left(\exp\left(q \cdot \frac{(V - R_s I)}{n_2 k_B T}\right) - 1 \right) + \frac{(V - I \cdot R_s)}{R_p} - I_{ph} \quad (1.19)$$

Avec :

R_s : résistance série de la cellule photovoltaïque en (ohm), qui modélise les pertes dues aux contacts ohmiques.

R_p : résistance de perte ou de shunt de la cellule photovoltaïque en (ohm).

I_{01} : courant de saturation de 1^{ère} diode D_1 en parallèle.

I_{02} : courant de saturation de 2^{ème} diode D_2 en parallèle.

n_1 : facteur d'idealité de la diode D_1 .

n_2 : facteur d'idealité de la diode D_2 .

1.8.1. Caractéristique I(V) d'une cellule photovoltaïque et ses paramètres caractéristiques:

En reposant sur les équations précédemment décrites qui relient le courant en fonction de la tension aux bornes de la cellule photovoltaïque. La caractéristique I(V) d'une cellule photovoltaïque est schématisée sur la figure (1.10).

Les principaux paramètres qui caractérisent une cellule photovoltaïque sont :

- Courant de court circuit I_{cc} :

C'est le courant obtenu en court-circuitant les bornes de la cellule photovoltaïque ($V=0$), il augmente linéairement avec l'intensité d'éclairement et dépend de la surface éclairée, de la longueur d'onde de rayonnement incident, de la mobilité des porteurs et aussi de la température.

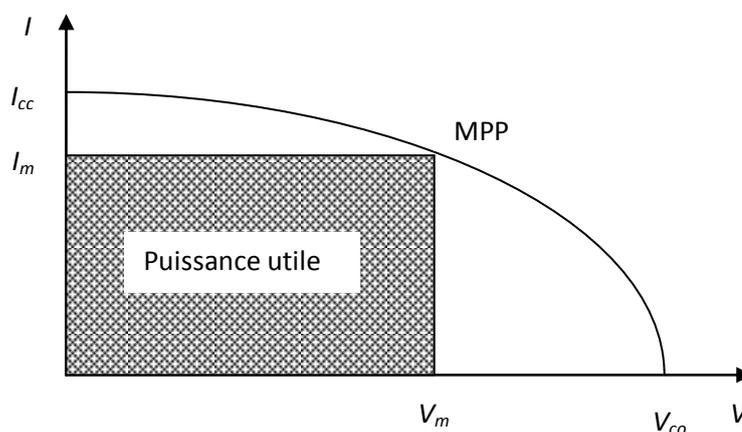


Figure 1.10 : Caractéristique I(V) d'une cellule photovoltaïque [26].

- Tension de circuit ouvert V_{co} :

C'est la tension obtenue quand le courant qui circule dans la cellule est nul. Il dépend surtout de la résistance de shunt et décroît avec la température. À la même température sa relation pour une cellule idéale est donnée par :

$$V_{co} = \frac{k_B T}{q} \ln \left(\frac{I_{cc}}{I_0} + 1 \right) \quad (1.20)$$

- Facteur de forme (FF) :

La puissance délivrée par la cellule photovoltaïque sous éclairage dépend de la résistance de charge (résistance placée aux bornes de la cellule) :

$$P = V \cdot I = \left(I_{ph} - I_0 \cdot \left(\exp \left(\frac{qV}{k_B T} \right) - 1 \right) \right) \cdot I \quad (1.21)$$

Cette puissance est maximale, noté P_{\max} , pour un point de fonctionnement nommé MPP : (Maximum Power Point), $P_{\max}(I_m, V_m)$ de la courbe de la caractéristique $I(V)$ de la cellule photovoltaïque. Elle définit le point optimum de la cellule et est calculée analytiquement par la relation suivante :

$$\frac{dP}{dV} = 0 = I_{ph} - I_0 \left(\exp \left(\frac{qV_m}{k_B T} \right) - 1 \right) - \frac{V_m}{k_B T} I_0 \exp \left(\frac{qV_m}{k_B T} \right) \quad (1.22)$$

Le facteur de forme de la cellule est le rapport entre la puissance maximale et le produit $I_{cc} \cdot V_{co}$. Indiquant dans quelle mesure le dernier produit est de la puissance délivrée par la cellule photovoltaïque.

$$FF = \frac{P_{\max}}{V_{co} \cdot I_{cc}} = \frac{V_m \cdot I_m}{V_{co} \cdot I_{cc}} \quad (1.23)$$

- Rendement de conversion :

C'est le rapport entre la puissance maximale délivrée par la cellule photovoltaïque et la puissance lumineuse incidente.

$$\eta = \frac{V_m \cdot I_m}{I_r \cdot A_c} = FF \frac{V_{co} \cdot I_{cc}}{I_r \cdot A_c} \quad (1.24)$$

Avec :

I_r : irradiance total du spectre de photons incidents en (W/cm^2) .

A_c : surface de la cellule (en cm^2).

L'efficacité quantique est une autre caractéristique importante de la cellule photovoltaïque. Elle représente le nombre d'électrons produits dans un circuit extérieur par la cellule pour tout photon incident du spectre solaire. Il y a deux types de l'efficacité quantique : l'une extérieure et l'autre intérieure.

Dans le cas d'efficacité quantique intérieure, seul le rayonnement absorbé est pris en considération, en revanche dans le cas d'efficacité quantique extérieure, elle est déterminée par rapport au rayonnement incident. Les équations respectives de l'efficacité quantique intérieure et extérieure sont :

$$EQI = \frac{J_{cc}(\lambda)}{q\phi_0(1-R)} \quad (1.25)$$

$$EQE = \frac{J_{cc}(\lambda)}{q\phi_0} \quad (1.26)$$

Plusieurs paramètres diminuent l'efficacité quantique comme : la recombinaison en surface et en volume, la réflexion sur la face avant où les longueurs de diffusion des porteurs photoscrésés sont faibles.

1.9. Générations photovoltaïques :

1.9.1. Première génération (cellules cristallines) :

Ces cellules sont généralement en silicium cristallin. Les cellules au silicium sont à la base actuellement de près de 98% de la production industrielle photovoltaïque. Les cellules peuvent être faites à partir de plaquettes de Silicium cristallisé dans deux catégories distinctes. Le silicium monocristallin (mc-Si) et le Silicium polycristallin (pc-Si). Le monocristallin est plus cher que le polycristallin car il nécessite une pureté plus poussée dans sa fabrication, mais il présente un rendement très intéressant, avec près de 24.5% contre 19% du rendement record sur les cellules polycritallines en laboratoire. Ces deux filières dominent le marché de vente avec environ 91% avec des modules photovoltaïques présentant des rendements de 12-14% [13] pour le silicium polycristallin et 15-20 % [13] pour le silicium monocristallin.

1.9.2. Deuxième génération (couches minces) :

Dans ce type de génération, le semiconducteur est déposé directement par la vaporisation sur un matériau support (verre par exemple). Deux filières se sont imposées progressivement pour ce type de génération. L'une basée sur le Tellurure de Cadmium noté CdTe et l'autre sur les alliages Cu(In,Ga)Se₂ (Cuivre Indium/Gallium Sélénium) notés CIGS. Des rendements records de 16.5% pour CdTe et de près de 20% pour le CIGS [13]. Ces

filères sont les mieux adaptées pour une utilisation en couches minces tout en délivrant de hauts rendements, parce qu'elles présentent des propriétés thermo-physiques et des caractéristiques chimiques permettent de déposer facilement les couches actives avec des épaisseurs petites.

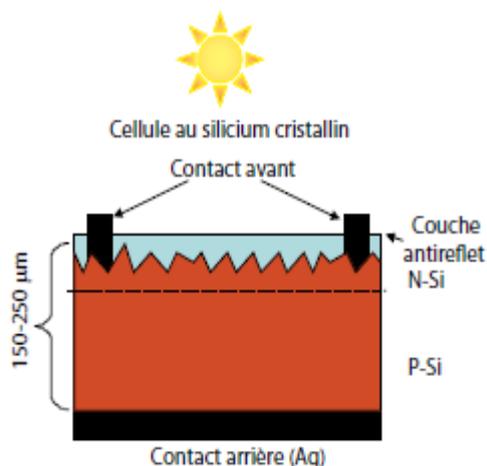


Figure 11 : Structure d'une cellule à base du silicium cristallin [13].

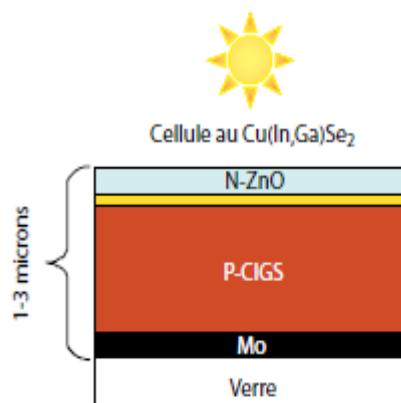


Figure 1.12 : Structure d'une cellule photovoltaïque à base des matériaux CIGS [13].

1.9.2. Troisième génération (pérovskites, multijonction, nanostructures.....) :

Actuellement il existe plusieurs technologies émergentes pour améliorer le rendement de la cellule dont notamment :

- Les cellules pérovskites qui sont des cellules composées d'un élément hybride organique-inorganique ayant une structure de pérovskite. Depuis 2016 le rendement de ces configurations est passé à 22.1 % ce qui les rend comme des alternatives attirantes.

- Dans une simple jonction PN, les photons qui présentent des énergies inférieures au gap du matériau semiconducteur, ne sont pas absorbés et par conséquent ne peuvent pas créer des paires électron-trou, la réponse spectrale de la cellule est ainsi limitée. Seule la portion du spectre solaire dont l'énergie des photons est supérieure au gap est utile. Une première réponse à ce problème est d'utiliser des systèmes à plusieurs niveaux constitués de simples jonctions possédant des gaps décroissants. Ainsi, il est possible d'exploiter la quasi-totalité du spectre solaire avec des hauts rendements de conversion.
- Les cellules solaires à nanostructures permettent d'exploiter les photons moins énergétiques qui ne sont habituellement pas absorbés par la cellule.

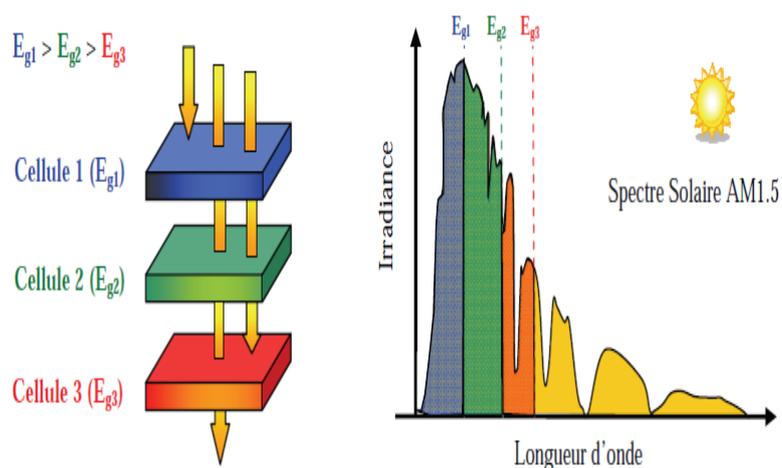


Figure 1.13 : Structure des cellules photovoltaïques multijonctions.

1.10. Influence des pertes physiques et technologiques sur le rendement de la cellule photovoltaïque :

Le rendement d'une cellule photovoltaïque peut être exprimé en tenant en compte sur les pertes sous la forme suivante [27] :

$$\eta = \frac{\int_{\lambda_g}^{\infty} N(\lambda) d\lambda}{\int_0^{\infty} N(\lambda) d\lambda} \cdot \frac{\int_0^{\lambda_g} \left(\frac{hc}{\lambda} - E_g \right) N(\lambda) d\lambda}{\int_0^{\lambda_g} N(\lambda) \frac{hc}{\lambda} d\lambda} \cdot \frac{qV_{co}}{E_g} \cdot FF \cdot (1-R) \cdot \frac{A_c - S_{metal}}{A_c} \cdot \eta_{\alpha} \cdot \eta_{COL} \quad (1.27)$$

Ces différentes pertes sont dues soit aux restrictions purement physiques liées au matériau, soit aux limitations technologiques liées au processus de fabrication.

1.10.1. Pertes physiques :

- Pertes dues aux photons de grande longueur d'onde : tout les photons incidents qui possédant une longueur d'onde supérieure à celle associée au gap du semiconducteur ($\lambda \geq \lambda_s$) ne peuvent pas générer de paires électron-trou et seront donc perdus. Les mécanismes d'absorption assistées par phonons permettent néanmoins de repousser la limite inférieure de l'énergie correspondant au gap du semiconducteur (1.052 eV au lieu 1.124 eV dans le cas du silicium). Sous l'irradiance AM1.5G, ces pertes sont évaluées à peu près de 23.5% pour le cas du silicium [28].
- Pertes dues à l'énergie excédentaire des photons : tout photon absorbé peut créer une seule paire électron-trou. L'excès d'énergie supérieure au gap du semiconducteur est principalement dissipé sous forme de chaleur (thermalisation). Sous AM1.5G, ces pertes sont évaluées à environ 33% dans le cas du silicium [28].
- Le facteur de tension : c'est le rapport de la tension maximale développée par la cellule V_{co} par la tension du gap $\frac{E_g}{q}$. La tension aux bornes de la cellule V_{co} est qu'une portion de la tension du gap à cause de la chute de tension aux niveaux des contacts. La meilleure tension de circuit ouvert d'une cellule à haute rendement est de l'ordre de 700 mV.
- Facteur de forme (FF) : l'équation de courant-tension est sous forme exponentielle du type $\left(\exp\left(\frac{qV}{k_B T}\right) \right)$ donc elle ne peut jamais être rectangulaire, même dans le cas d'une cellule idéale, le facteur de forme ne va pas au-delà de 0.89. Ce facteur dépend fortement des paramètres technologiques modélisés par les résistances séries et de shunts.

1.10.2. Pertes technologiques :

- La réflectivité : une partie de l'énergie lumineuse incidente sur la surface (non métallique) de la cellule va être réfléchi. Le coefficient de réflexion est

optimisé par les techniques de traitements de la surface et par les couches antireflets.

- Le taux d'ombrage : les contacts métalliques (d'une surface S métallique) qui présentent sur la face avant de la cellule photovoltaïque entraînent des pertes de puissance, puisque elles couvrent une partie de la surface A_c de la cellule.
- Rendement d'absorption : à cause de l'épaisseur limitée de la cellule, un nombre considérable des photons qui ont une énergie requise, traverse l'épaisseur de la cellule sans être absorbé. Des techniques de réflexion sur la face arrière (pour les cellules à base de silicium cristallin (n+/p)) sont réalisées pour absorber le maximum de ces photons, pour augmenter le rendement.
- Rendement de collecte : c'est le rapport entre le nombre des porteurs collectés et le nombre des porteurs photogénérés. Certains porteurs photogénérés peuvent se recombiner dans le volume de la cellule et à la surface, tout dépend de la durée de vie des porteurs τ .

1.11. Conclusion :

Dans ce chapitre nous avons présenté les points importants de la physique de la cellule photovoltaïque pour la compréhension du sujet. Nous avons rappelé le principe de fonctionnement d'une cellule solaire et nous avons calculé le photocourant fournis par la cellule en premier temps, ensuite nous avons montré les modèles électriques idéals et réelles de la photopile, ainsi leurs paramètres caractéristiques principaux. Par la suite, nous avons rappelé les types actuels des cellules photovoltaïques.

CHAPITRE 2

GENERALITES SUR LES NANOSTRUCTURES DE BASSE DIMENSIONNALITÉ

2.1. Introduction :

Dans ce chapitre on va présenter des généralités sur les nanostructures de basse dimensionnalité, on s'intéresse particulièrement sur les propriétés et les méthodes de fabrication des boites quantiques. Dans la première partie, on présentera les propriétés électroniques et optiques des différentes nanostructures de basse dimensionnalité (puits quantiques PQs, boites quantiques BQs, et les fils quantiques FQs). Ensuite les matériaux semiconducteurs éligibles d'être boites quantiques seront exposés. L'intérêt des boites quantiques pour surmonter les limites d'une cellule solaire conventionnelle sera aussi détaillé. Finalement, la méthode et les techniques expérimentales de la fabrication des BQs seront présentées. .

2.2. Propriétés des nanostructures de basse dimensionnalité :

2.2.1. Propriétés électroniques :

Dans un semiconducteur massif, les électrons et les trous sont libres de se déplacer selon les trois directions de l'espace. Pour les matériaux dont leurs dimensions sont inférieures à la longueur d'onde de de Broglie, les propriétés du matériau changent complètement grâce au confinement des porteurs de charge qui se traduit par une quantification des états énergétiques de ces porteurs. Le type de nanostructure varie selon le degré de confinement des porteurs. La longueur d'onde de de Broglie est donnée par :

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

Avec \hbar est la constante de Planck, m^* la masse effective de l'électron (trou) dans le matériau semiconducteur, E l'énergie de l'électron (trou). Pour que le confinement quantique y aura lieu, il faut que l'énergie de l'électron (trou) E , soit supérieur à l'énergie thermique $k_B T$ dont la longueur d'onde associée s'appelle la longueur d'onde de de Broglie thermique [29] :

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

La densité d'états qui est définie comme étant le nombre des états disponibles pour un électron (trou) dans une gamme d'énergie, elle dépend du degré de confinement des porteurs de charge dans le système donné [30]. Dans un semi-conducteur massif 3D où il n'y a pas un confinement des porteurs, on voit clairement que la densité d'états prend une forme continue comme le montre la figure (2.1.b) [31] :

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

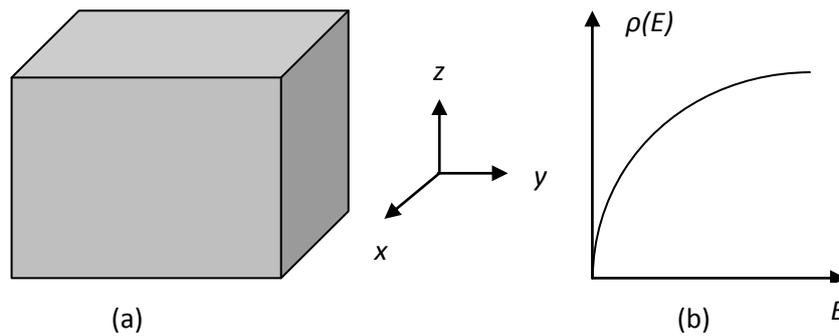


Figure 2.1 : (a) structure d'un semiconducteur massif, (b) évolution de la densité d'états en fonction d'énergie dans un semiconducteur massif [32][33].

On peut former un puits quantique PQ en insérant un matériau semiconducteur "A" de petit gap E_{gA} entre deux matériaux semi-conducteurs "B" de grand gap E_{gB} , à condition que le matériau "A" soit suffisamment mince comme le montre la figure (2.2.a).

Dans un puits quantique 2D, les porteurs de charges peuvent se déplacer en deux dimensions et par conséquent ils seront confinés dans une couche 2D. L'énergie sera quantifiée selon la direction de confinement (disons la direction y). La densité d'états est montrée dans la figure (2.2.c) et elle prend la forme d'escalier [31] :

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

Dans cette équation, θ est la fonction de heavyside, E_{n_y} est l'énergie des niveaux discrets n suivant y.

La structure de puits quantique peut être gravée par photolithographie, par lithographie par un faisceau électronique ou bien par un faisceau d'ions concentré selon l'axe de la croissance qui est dans ce cas l'axe z , pour laisser une partie de puits quantique libre. La structure obtenu est appelée le fil quantique FQ.

Dans un fil quantique 1D, les porteurs de charges peuvent se déplacer en une direction et ils seront confinés selon les deux directions de l'espace. L'énergie sera quantifiée selon les deux directions de confinement (disons la direction y et z). La densité d'états est représentée dans la figure (2.3.b) et elle prend dans ce cas la forme suivante [31] :

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

La même structure de puits quantique peut être gravée pour former cette fois des piliers et comme le montre la figure (2.4.a). La nouvelle structure formée est appelée une boîte quantique BQ.

Dans une boîte quantique 0D, les porteurs sont confinés dans les trois directions de l'espace. Cela conduit à des niveaux d'énergie discrets similaires aux orbitales atomiques dans un cristal. La densité d'états pour une BQ carrée est montrée dans la figure (2.4.b) et elle correspond à une série de fonctions de Dirac [31]:

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

Puisque les dimensions spatiales de ces nanostructures s'approchent à l'échelle atomique, il est nécessaire d'utiliser la mécanique quantique représentée par l'équation de Schrödinger pour étudier et analyser les propriétés de ces nanostructures :

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

Avec m^* est la masse effective de l'électron (trou), $V(r)$ est le potentiel spatial, et $\psi(r)$ est la fonction d'onde qui décrit le comportement de l'électron (trou) dans le système.

Dans un puits quantique (structure 2D), les porteurs sont confinés dans une plaque ultra mince d'une épaisseur L_y le long de l'axe y par une barrière de potentiel V_0 représente la discontinuité de la bande de conduction comme le montre la figure (2.2.b).

Ces porteurs de charge ne peuvent pas surmonter la barrière de potentiel $E < V_0$ et restent à l'intérieur de puits $0 \leq y \leq L_y$ et ne perdent aucune énergie lors la collision avec les parois de puits quantique. Le puits de potentiel est donné pour ce cas par :

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

L'équation de Schrödinger est donnée dans la direction de confinement y par :

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

Dans le puits quantique où $V(y) = 0$, l'équation de Schrödinger simplifiée et devient :

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

La solution possible de l'équation de Schrödinger dans ce cas est [33][34] :

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

Avec A et B sont des constantes dépendent de la largeur de puits L_y à déterminer aux conditions de limites, et k_y est une fonction de l'énergie E selon la direction de confinement y :

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

Avec n_y est le nombre quantique principal selon la direction y .

Au dehors de puits quantique, la solution de l'équation de Schrödinger s'écrit [34] :

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

Avec :

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

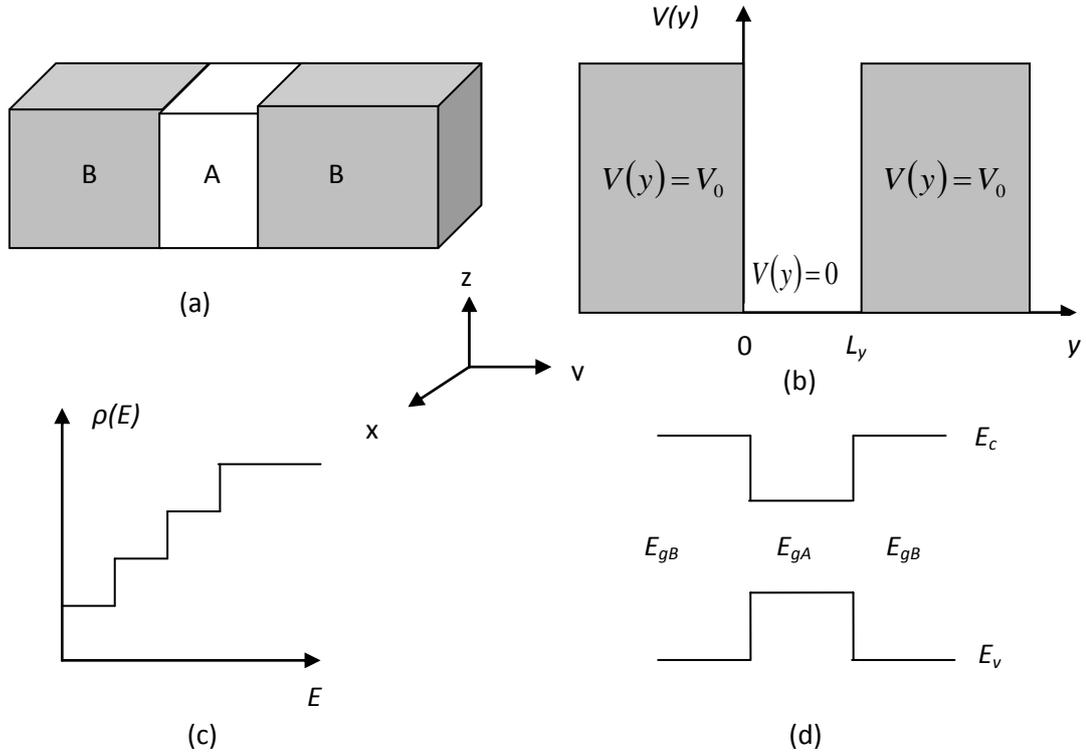


Figure 2.2 : (a) structure d'un puits quantique, (b) potentiel fini dans la structure à puits quantique, (c) évolution de la densité d'états en fonction d'énergie dans un puits quantique. (d) diagramme d'énergie d'une structure à puits quantique [32][33].

Dans un fil quantique (structure 1D), le potentiel $V(r)$ est la somme du potentiel de confinement dans le plan (yz) et du potentiel dans l'axe de mouvement des porteurs x [34].

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

La fonction d'onde ψ est le produit des deux composants et est donnée comme suit [34] :

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

On pose ces deux équations dans l'équation (2.7) de Schrödinger, cette dernière devient :

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

Par comparaison, on peut extraire deux équations à partir l'équation (2.17) :

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

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

La solution de l'équation (2.18) est une onde plane sous la forme suivante :

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

Avec k_x le momentum du l'électron (trou) le long de l'axe x .

Par conséquent l'énergie associée est donnée par la relation de dispersion qui donne les niveaux d'énergie dans la direction x , dans la quelle l'électron (trou) est libre de se déplacer :

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

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

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

Dans le rectangle, la fonction d'onde s'écrit par :

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

La fonction d'onde dans cette équation peut être découpée sous la forme suivante [33] :

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

Par la méthode de séparation de variables, l'énergie superpose et devient [33] :

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

On pose l'équation (2.24) et (2.25) dans l'équation (2.23), on peut obtenir deux équations découplées suivantes :

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

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

Comme pour les puits quantiques, les fonctions d'onde de quantifications pour ce cas dans les directions de confinement y et z sont donnés respectivement, par :

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

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

Avec :

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

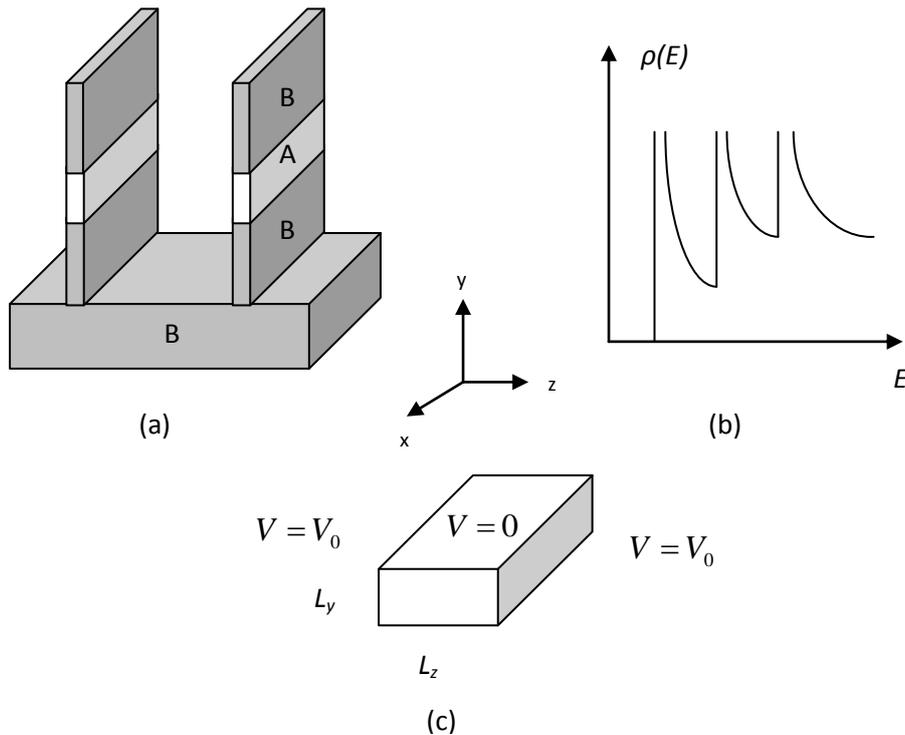


Figure 2.3 : (a) structure d'un fil quantique, (b) évolution de la densité d'états en fonction d'énergie dans un fil quantique, (c) potentiel fini dans la structure à fil quantique [32][33].

Dans une boîte quantique BQ (structure 0D), le confinement de porteurs est dans les trois directions de l'espace et donc le potentiel est donné par :

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0, & (0 < y < L_y) \cap (0 < z < L_z) \cap (0 < x < L_x) \\ V_0, & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (2.31)$$

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

$$\left\{ \frac{-\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \right\} \cdot \psi(x, y, z) = E \cdot \psi(x, y, z) \quad (2.32)$$

Les fonctions d'onde de quantifications pour ce cas dans les directions de confinement x , y et z peut être découpée comme suit :

$$\psi(x, y, z) = \psi(x) \cdot \psi(y) \cdot \psi(z) \quad (2.33)$$

Avec

$$\psi(x) = T \sin(k_x x) + P \cos(k_x x) \quad (2.34)$$

$$\psi(y) = A \sin(k_y y) + B \cos(k_y y) \quad (2.35)$$

$$\psi(z) = C \sin(k_z z) + D \cos(k_z z) \quad (2.36)$$

Et :

$$k_z = \frac{\sqrt{2m^* E_{n_x}}}{\hbar} \quad (2.37)$$

Les constantes T et P , A et B , C et D dépendent de largeur de la boîte dans les trois directions de confinement ; dans ce cas L_x , L_y et L_z , respectivement.

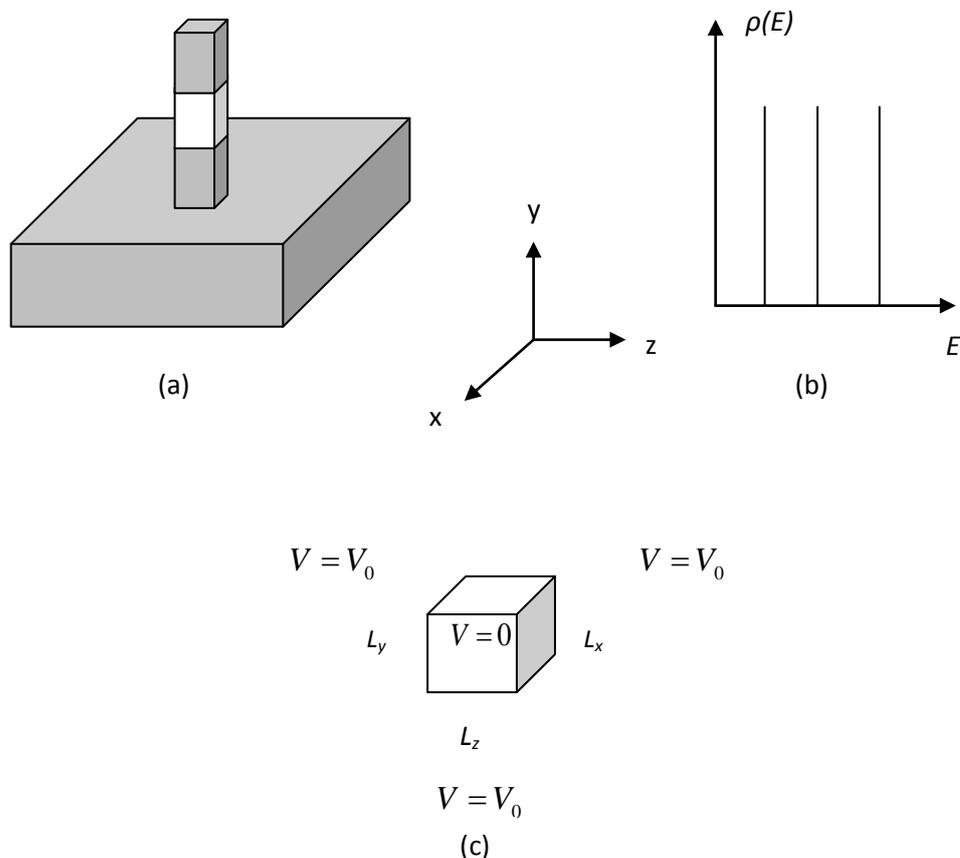


Figure 2.4 : (a) structure d'une boîte quantique, (b) évolution de la densité d'états en fonction de l'énergie dans une boîte quantique, (c) potentiel fini dans la structure à boîte quantique [32][33].

2.2.2. Propriétés optiques :

L'absorption des photons ayant une énergie supérieure à l'énergie de gap d'un semiconducteur crée des électrons (trous) en excès dans la bande de conduction et de valence de ce dernier. Après un temps très court, ces porteurs se redistribuent dans ces bandes d'énergies par l'effet thermique tout à d'abord généré par l'interaction (porteur-porteur) puis par l'effet de refroidissement créé par l'interaction (porteur-phonon). Le retour à l'équilibre thermodynamique se fait par deux types de recombinaison (radiative et non radiative). La photoluminescence PL est une technique de caractérisation optique du matériau, elle consiste à mesurer l'intensité de la lumière générée par la recombinaison radiative de l'électron (trou) excité dans un semiconducteur en fonction de l'énergie de photons. La PL fournit plusieurs informations sur les BQs. A titre d'exemple, la position des raies d'émission de la PL nous permet de calculer l'énergie de la bande interdite du semiconducteur analysé (BQ) et leurs dimensions. La largeur de ces raies dépend de la composition et distribution en taille des BQs. Les intensités de ces raies dépendent de la température, et les paramètres de transport des BQs. Par ailleurs, l'observation des bandes d'émission dans le spectre de PL nous permet

d'estimer les séparations inter-niveaux (ΔE_i^e , ΔE_i^h) entre les différents états excités d'une BQ [35][36].

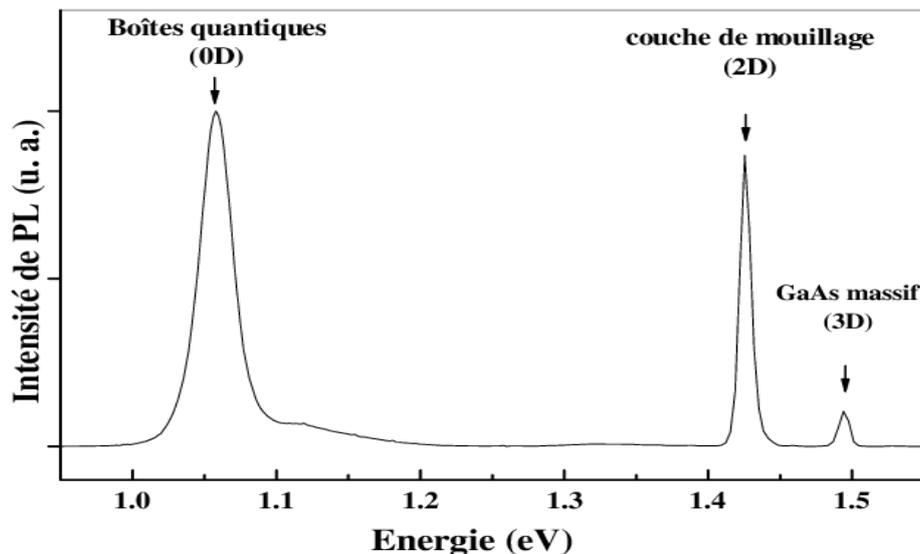


Figure 2.5 : Spectre de photoluminescence d'une structure à boîte quantique InAs/GaAs à la température ambiante [37].

La figure (2.5) représente le spectre de photoluminescence des BQs de InAs insérés dans une matrice de GaAs. On distingue trois raies d'émissions correspondantes à la recombinaison des porteurs dans les BQs d'InAs, dans la couche de mouillage d'InAs (en anglais wetting layer WL) sur laquelle les boîtes quantiques d'InAs se forment, et dans le volume de GaAs. On voit clairement que la raie relative aux BQs est plus intense par rapport aux autres régions.

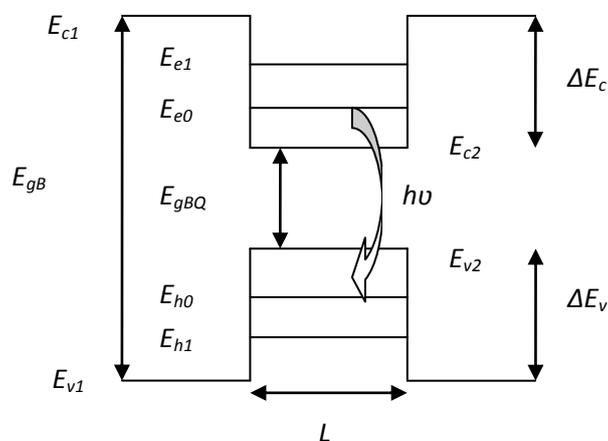


Figure 2.6 : Diagramme de bande d'une boîte quantique semiconductrice d'un gap E_{gBQ} mit entre deux semiconducteurs barrières de grand gap E_{gB} . Les valeurs indiquées dans le schéma sont : les énergies de discontinuité pour les électrons et trous ΔE_c et ΔE_v , respectivement, la largeur de la boîte quantique L , les énergies de confinement quantique pour les électrons et trous E_e et E_h , l'énergie de transition optique $h\nu$ [33].

2.3. Croissance auto-organisée des BQs :

2.3.1. Modes de croissance:

Actuellement, le mode le plus employé pour la croissance des boîtes quantiques est le mode de croissance Stranski-Krastanov (SK). Il est proposé par I.N. STRANSKI et L. KRASTANOV [38] en 1939, et mise en application en 1985 [39]. Ce mode de croissance est parmi les trois modes de croissance connues : le mode de croissance Volmer-Weber (VW) et le mode Frank-Van der Merwe (FM) comme indique la figure (2.7). Ces trois modes consistent de croître une couche mince d'un matériau par épitaxie sur un substrat. Cette croissance par épitaxie dépend essentiellement de l'interaction entre les adatoms et la surface du substrat. Dans le mode de croissance VW, les interactions adatoms-adatoms sont forts que ceux de adatoms et la surface, ce qui provoque la formation des îlots tridimensionnelle 3D [40]. Le grossissement des ces îlots entraîne la croissance de multicouches rugueuses sur la surface du substrat. Cependant, dans le mode de croissance FM, les adatoms s'attachent aux sites de la surface, ce qui entraîne la croissance des couches complètes et lisses [40][41]. Le mode SK est le cas intermédiaire caractérisé par la croissance d'une couche 2D et des îlots 3D. C'est un mode d'évolution de la morphologie de la surface des couches contraintes intéressante. Cette méthode consiste à faire croître une couche épitaxiale mince d'un matériau en désaccord de maille par rapport au substrat. En début de processus, les atomes de la couche épitaxiale s'adaptent au paramètre de maille de substrat ce qui entraîne une contrainte élastique et le résultat une couche 2D que l'on appelle couche de mouillage (CM) commence à apparaître. Après certaine épaisseur appelée épaisseur critique, l'énergie élastique accumulée devient suffisante pour l'apparition de petits îlots tridimensionnels 3D dans la couche CM. Par exemple, après la déposition de 3 monocouches MC de Ge sur Si (001), des îlots quantiques 3D commencent à former comme montre la figure (2.8.a). Pour le système d'InAs/GaAs l'apparition des îlots 3D s'effectue après le dépôt de 1.5-1.7 MC d'InAs [31]. Ces îlots sont ensuite recouverts par un matériau barrière, cette étape est appelée l'encapsulation et a un rôle privilégié pour l'obtention d'une véritable boîte quantique dans le coté de la forme et de la composition [42]. Si les couches barrières sont plus minces, on aura un couplage de la contrainte par la formation d'un empilement vertical des couches de BQs comme il est clair dans la figure (2.8.a). Généralement, les îlots formés sont caractérisés par une hauteur de 2 à 5 nm et un diamètre de quelques dizaines de nanomètres. La taille, la forme et la densité de ces îlots dépendent du paramètre de maille, la quantité de matière déposée, et de la longueur de diffusion des adatoms. Les systèmes les plus étudiés et réalisés

sont In(Ga)As/GaAs et Ge/Si par épitaxie par jets moléculaire (MBE molecular beam epitaxy) et épitaxie en phase vapeur aux organométalliques (MOCVD metalorganic vapor phase epitaxy) qui utilisent le mode de croissance SK. Les figures (2.8.b) et (2.8.c) représentent des images prises par microscopie à force atomique (AFM atomic force microscopy) des structures à boîtes quantiques Ge/Si et InGaAs/GaAs, respectivement.

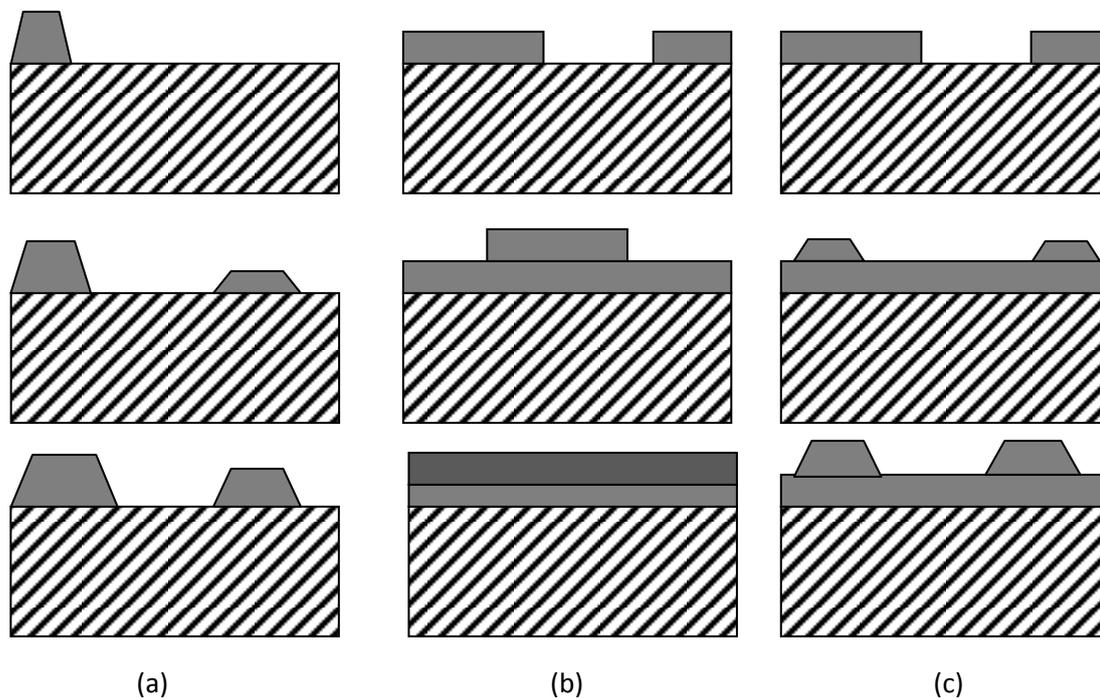
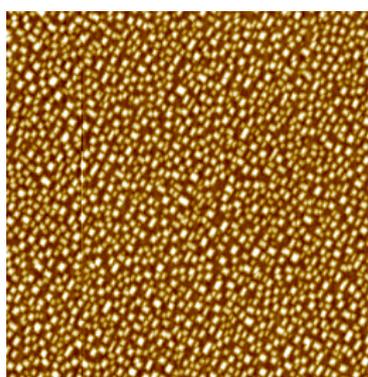
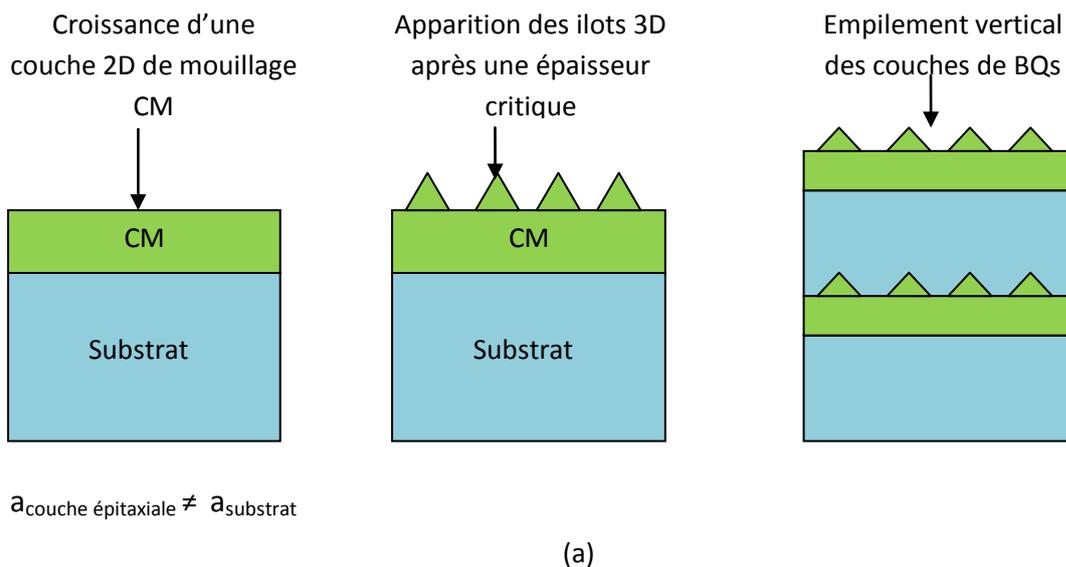
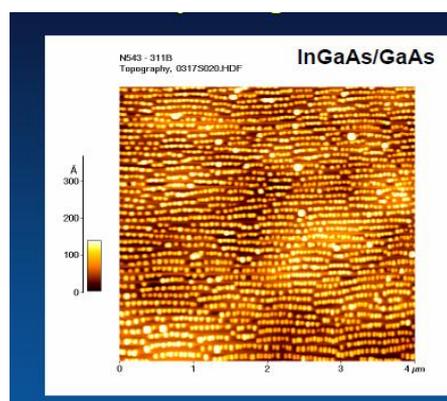


Figure 2.7 : (a) mode de croissance Volmer-Weber (VW : formation des ilots), (b) mode de croissance Frank-van der Merwe (FM : couche par couche), (c) mode de croissance Stranski-Krastanov (SK : couche+ilots).



(b)



(c)

Figure 2.8 : (a) étapes de la méthode de croissance Stranski-Krastanov, (b) image AFM d'une structure à boîtes quantiques de Ge/Si, (c) image AFM d'une structure à boîtes quantiques d'InGaAs/GaAs [43].

2.3.2. Contrainte dans les boîtes quantiques :

Comme on a dit précédemment, l'empilement vertical des plans de BQs provoque l'accumulation de la contrainte à l'intérieur de la structure, et après un certain nombre de ces plans de BQs, cette contrainte relaxe plastiquement ce qui crée des dislocations et des défauts. Afin d'éviter ce phénomène, la densité d'énergie élastique totale dans la structure ne doit pas dépasser une certaine valeur critique. Cette dernière est donnée par la relation suivante [44] :

$$E_{p\text{ totale}} = N_{\text{empilement}} \cdot \langle \varepsilon_{\perp} \rangle^2 \cdot e \cdot A \quad \text{en (erg.cm}^{-2}\text{)} \quad (2.38)$$

Avec $N_{\text{empilement}}$ est le nombre d'empilement, $\langle \varepsilon_{\perp} \rangle$ est la contrainte moyenne perpendiculaire aux couches de BQs, e est l'épaisseur des couches d'espacement entre les

différents plans de BQs, et A est une fonction de constantes élastiques de chaque couche, et elle est donné par [44] :

$$A = C_{11} + C_{12} - 2 \frac{C_{12}^2}{C_{11}} \quad (2.39)$$

Avec C_{11} et C_{12} sont les constants élastiques en (GPa).

Mentionnant qu'il existe deux types de contrainte : contrainte compressive et contrainte extensive, ça dépend du signe de la différence entre le paramètre de maille de la couche épitaxiale et celui du substrat comme le montre la figure (2.9).

La contrainte de l' $i^{\text{ème}}$ couche dans un empilement des plans de BQs est formée par deux composantes qui sont la contrainte parallèle $\varepsilon_{//i}$ et la contrainte perpendiculaire $\varepsilon_{\perp i}$ et sont donnés par les relations suivantes, respectivement [45] :

$$\varepsilon_{//i} = \frac{a_{ie//} - a_s}{a_s} \quad (2.40)$$

$$\varepsilon_{\perp i} = \frac{a_{ie\perp} - a_s}{a_s} \quad (2.41)$$

Avec $a_{ie//}$ et $a_{ie\perp}$ sont les paramètres de maille parallèles et perpendiculaires de la $i^{\text{ème}}$ couche épitaxiale, respectivement, et a_s est le paramètre de maille du substrat.

Puisque il y a un empilement vertical de plans de BQs dans notre cas, donc on a besoin seulement de la contrainte perpendiculaire ε_{\perp} .

Par conséquent, la contrainte perpendiculaire moyenne est calculée comme suit :

$$\langle \varepsilon_{\perp} \rangle = \frac{\sum_i (\varepsilon_{\perp})_i \cdot e_i}{\sum_i e_i} \quad (2.42)$$

Parmi les techniques utilisées à l'heure actuelle pour réduire l'accumulation de la contrainte dans les structures à boîtes quantiques est l'utilisation des couches de compensation de contrainte. Cette technique consiste à introduire des couches d'espacement entre les différents plans de BQs ayant un paramètre de maille adapté par rapport à ce du substrat. Par exemple dans le système InAs/GaAs où la contrainte est compressive, l'insertion des couches

de compensation de la contrainte de GaNAs ou GaP dans les couches d'espacement de GaAs [46][47] peut réduire la contrainte accumulée dans un tel système comme le montre la figure (2.10).

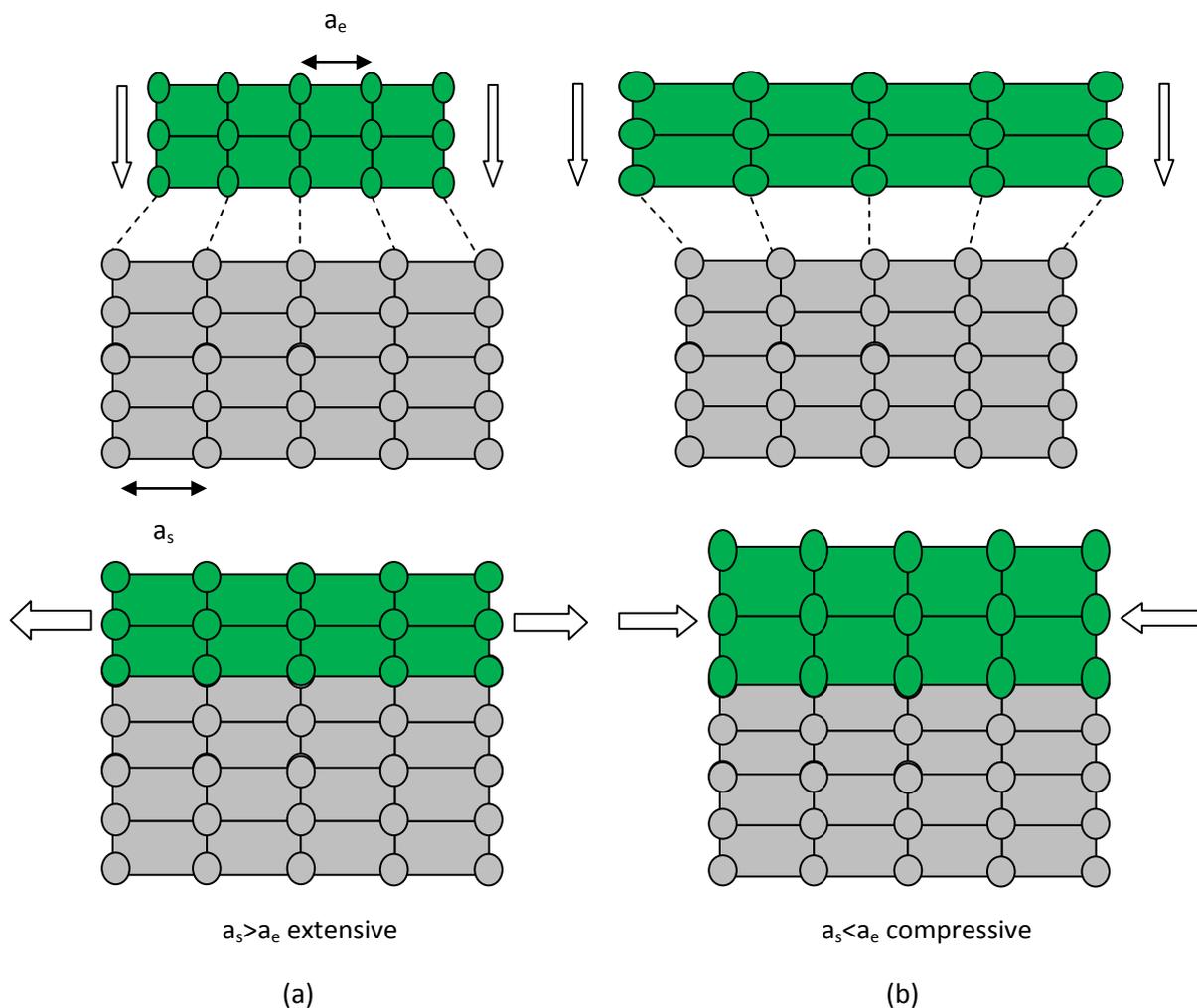


Figure 2.9 : Types de la contrainte : (a) contrainte extensive, (b) contrainte compressive [45].

La figure (2.11) montre une image prise par microscope électronique par effet tunnel TEM d'une structure contient 10 empilements de boites quantiques d'InAs/GaAs sans et avec couche de compensation de la contrainte GaP. On voit clairement que la contrainte interne compressive augmente avec l'insertion des plans de boites quantiques, ce qui produit les défauts et les déformations dans la structure. En plus, cette accumulation de la contrainte influe négativement sur la densité et la taille de BQs comme le montre la figure (2.11.a). L'introduction des couches de compensation de la contrainte GaP qui possède un paramètre de maille (5.450 \AA) inférieur à ce de GaAs (5.653 \AA), crée une compensation extensive ce qui compense la contrainte compressive accumulé et améliore la qualité des BQs d'InAs comme il est clair dans la figure (2.11.b).

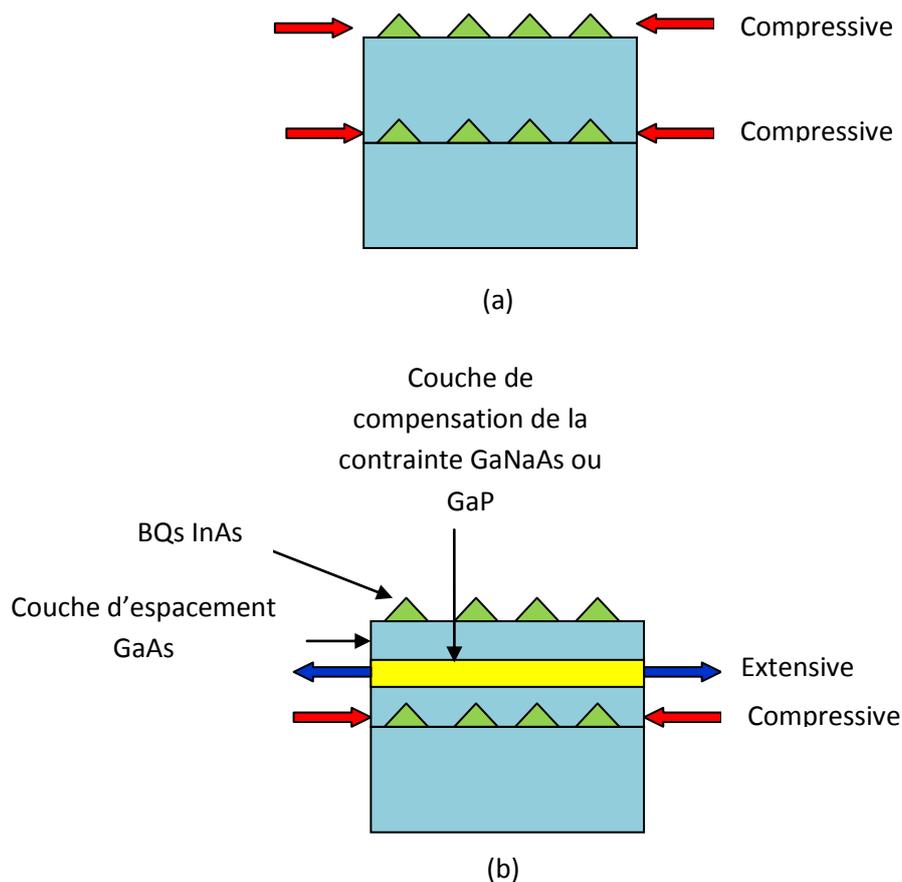


Figure 2.10 : Technique de compensation de la contrainte : (a) structure InAs/GaAs sans couches de compensation, (b) structure InAs/GaAs avec les couches de compensation [46].

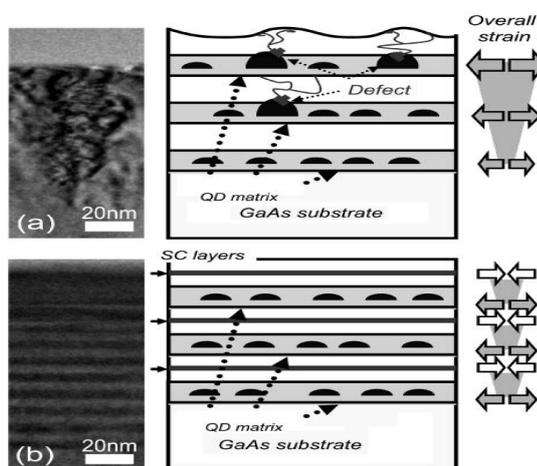


Figure 2.11 : Image de TEM of 10 empilements de boites quantiques d'InAs/GaAs : (a) sans et (b) avec couche de compensation de la contrainte GaP [48].

2.4. Choix de matériau semiconducteur boîte quantique :

Les principaux types de semiconducteurs qui peuvent être employés comme des BQs sont :

- Les semiconducteurs III-V et leurs alliages : la combinaison des éléments du groupe III (B, Al, Ga, In....) avec du groupe V (N, P, As, Sb, Bi.....) de tableau périodique comme le montre la figure (2.12), par exemples: GaAs, InAs, GaSb, InN, GaN.....etc. Cependant on distingue des alliages ternaires et quaternaires pour ce type de semi-conducteurs comme : InAsSb, GaAsN, InGaAs, InGaAsN, InGaAsSb.....etc.
- Les semiconducteurs II-VI et ses alliages : la combinaison des éléments de sous groupe II (Zn, Cd.....) et les éléments du groupe VI (O, Se, Te.....), comme : CdTe, ZnO, CdSe. De même, pour ce type de semiconducteurs on distingue des alliages ternaires et quaternaires comme CdSeTe, CdZnTe, CdZnSeS, CdZnSeTe.
- Les composés IV : sont composés par des éléments de la colonne IV du tableau périodique comme $Si_{1-x}Ge_x$ pour améliorer la cellule solaire à base de Si.

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

Figure 2.12 : Eléments du groupe III, IV et V du tableau périodique.

Dans ce travail, on s'intéresse seulement aux nanostructures à base de semiconducteurs III-V. La majorité de semiconducteurs III-V se cristallisent sous la structure zinc-blende qui est représentée dans la figure (2.13). Comme on a vu précédemment, la structure à boîte quantique est une hétérostructure dont ses couches ont cru par épitaxie avec MBE ou bien MOCVD.

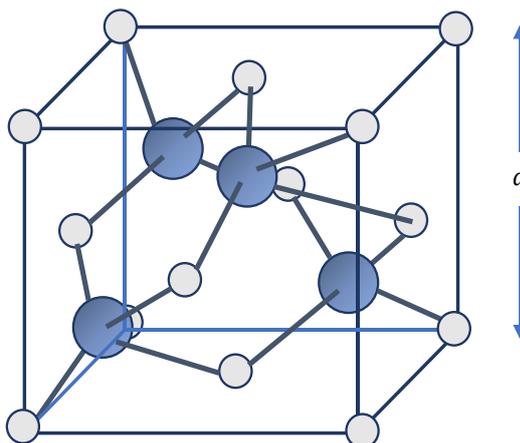


Figure 2.13 : Structure zinc-blende [49].

Le plus important paramètre dans l'épitaxie c'est le désaccord de maille entre les deux matériaux. Un grand désaccord de maille conduit à une contrainte interne élevée dans l'hétérostructure à boîte quantique. Par conséquent, seuls certains matériaux peuvent être crûs par épitaxie. Par exemple dans la structure à boîte quantique InAs/GaAs qui est le système le plus étudié théoriquement et expérimentalement, le désaccord de maille est égale à 7%, donc seulement une très mince couche d'InAs peut croître sur le substrat GaAs.

Un autre paramètre important qui caractérise un matériau semiconducteur pour la conception des BQs est l'énergie de la bande interdite E_g qui définit la différence énergétique entre le minimum de la bande de conduction BC et le maximum de la bande de valence BV. Pour le système InAs/GaAs, ces extrema sont situés dans le même vecteur d'onde $k=0$ (Γ point) comme il est clair dans la figure (2.14), et comme on a vu dans le chapitre (1), InAs et GaAs sont des semiconducteurs à bande directe. Ces types de semiconducteurs permettent une transition bande à bande des excitons (électrons et trous) ce qui améliore et facilite l'émission et l'absorption des photons. Dans les nanostructures quantiques, le gap est calculé comme la différence entre la bande de conduction et la bande des trous lourds [50].

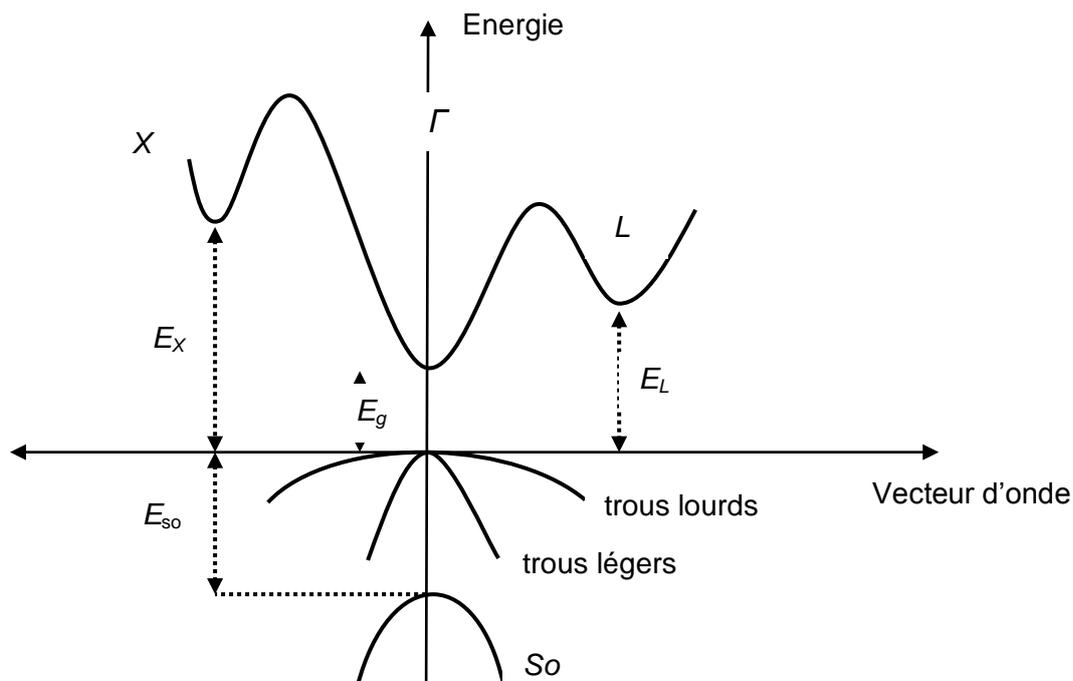


Figure 2.14 : Structure de bande de GaAs et InAs. Pour le GaAs $E_g=1.42$ eV, $E_L=1.71$ eV et $E_x=1.9$ eV et $E_g=0.35$ eV, $E_L=1.08$ eV et $E_x=1.37$ eV pour le InAs à $T=300$ K [51].

La figure (2.15) montre l'évolution de l'énergie de la bande interdite en fonction du paramètre de maille à la température $T=0$ K des principaux semiconducteurs III-V et ses alliages possibles. A partir de cette figure, on observe que le paramètre de maille des semiconducteurs à bande interdite étroite est grand par rapport aux semiconducteurs à bande interdite large. C'est pour ça la majorité de BQs utilisés dans les expériences produisent une contrainte compressive. Le tableau (2.1) rassemble les propriétés des semiconducteurs III-V binaires sélectionnés pour ce travail.

On a vu dans les parties précédentes qu'une structure à boîtes quantiques ou puits quantiques c'est une hétérostructure qui est composé par deux semiconducteurs de même structure cristalline et d'énergies de bande interdite différentes déposés l'un sur l'autre. Une telle configuration crée une discontinuité dans la structure de bandes ; discontinuité de la bande de conduction ΔE_c et une discontinuité de la bande de valence ΔE_v . Cette discontinuité donne une information sur le degré de confinement d'une nanostructure (BQ par exemple), de fait plus l'énergie de la discontinuité est grande, plus le puits de potentiel est profond et donc le confinement des porteurs dans la BQ est fort et vis-versa.

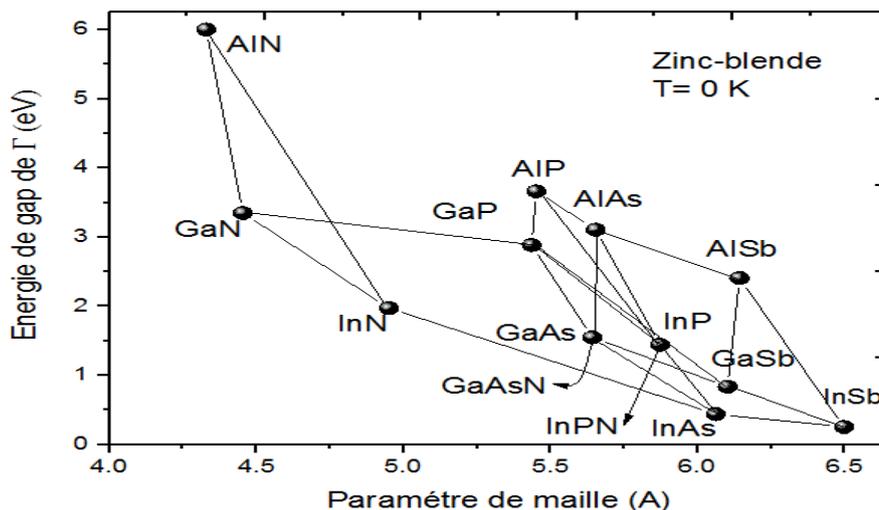


Figure 2.15 : Energie de gap en fonction du paramètre de maille de plusieurs semiconducteurs III-V à $T=0$ K [52].

Tableau 2.1 : Propriétés de quelques semiconducteurs III-V utilisés dans ce travail à $T=300$ K [51, 53].

	GaAs	InAs	GaN	InSb	InN	GaSb
Paramètre de maille (Å)	5.6533	6.0584	3.18900	6.4794	3.54500	6.0959
Energie de gap (eV)	1.42	0.354	3.42	0.174	1.89	0.7270
Pertinivité relative	13.1	14.600	8.9000	16.8000	15.3000	15.7000
Affinité électronique (eV)	4.07	4.030	4.1000	4.5900	4.7000	4.0600
Masse effective des électrons m_e^* ($\times m_0$)	0.067	0.026	0.20000	0.01350	0.12000	0.03900
Masse effective des trous m_h^* ($\times m_0$)	0.16	0.025	1.00000	0.01500	0.17000	0.05000
C_{11} (GPa)	1221	832.9	296	684.7	223	884.2
C_{12} (GPa)	566	452.6	130	373.5	115	402.6

La figure (2.16) montre les discontinuités de bandes de quelques semiconducteurs binaires en fonction du paramètre de maille. Il est reporté qu'une grande discontinuité de la bande de valence ΔE_v entre le matériau barrière et BQ supporte plusieurs niveaux d'énergie, de fait il y a une possibilité qu'ils fusionnent avec la bande de valence de matériau barrière ce qui va décroître l'énergie de gap du matériau barrière, et donc diminution du rendement de la cellule solaire à boîte quantique [54]. Donc pour une BQ uniforme et efficace, cette discontinuité doit être négligeable. La bande d'énergie modifiée du matériau barrière est donné par l'équation suivante :

$$E_g = E_g^B - (\Delta E_v + V_s) \quad (2.43)$$

Avec E_g^B est l'énergie de gap du matériau barrière non modifié, ΔE_v est la discontinuité de la bande de valence à $k=0$ et V_s est le potentiel de contrainte apparaissant à la bande de valence à $k = 0$.

La condition principale pour former une barrière de potentiel et donc des nanostructures est que les matériaux BQs doivent avoir une énergie de bande interdite plus petite que celle de matériaux barrières, limitant ainsi les matériaux BQs III-V aux semiconducteurs binaires : GaSb, InAs, InSb et ses alliages ternaires et quaternaires.

Généralement on peut faire varier la bande interdite des matériaux semiconducteurs ternaires et quaternaires par la variation de la fraction molaire x des éléments qui les constituent. Pour les BQs, la bande interdite peut être modifiée par le changement de la taille de la boîte quantique par le control de la quantité des espèces qui la constituent expérimentalement. La bande interdite d'une BQ diminue avec l'augmentation de la taille de cette dernière comme le montre la figure (2.17) ce qui favorise l'absorption des photons moins énergétique du spectre solaire et donc l'optimisation du rendement de conversion des cellules solaires conventionnelles.

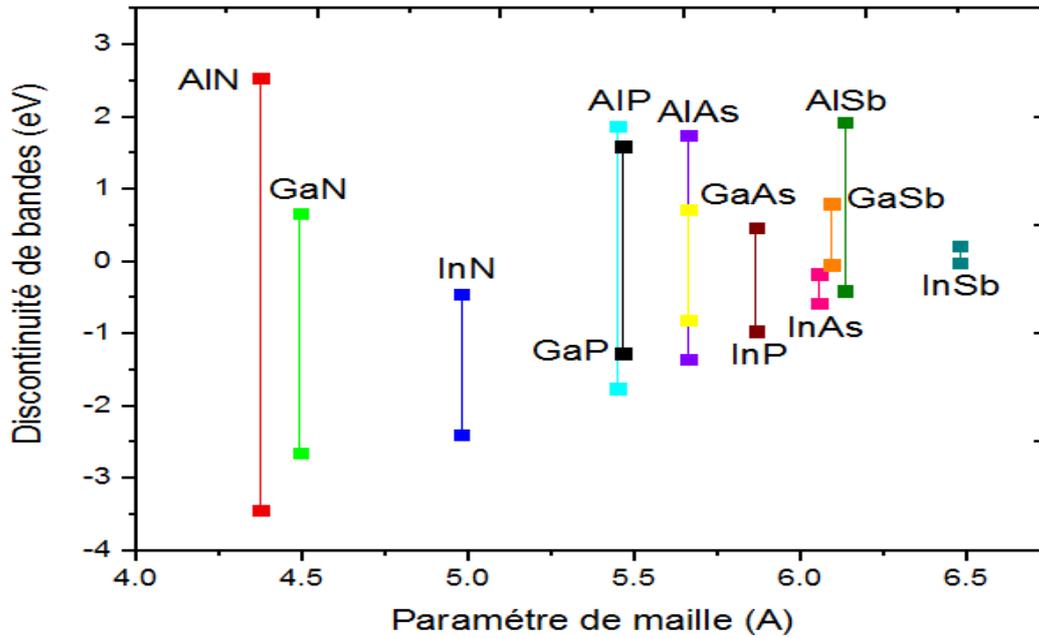


Figure 2.16 : Discontinuité de la bande de conduction et la bande de valence de quelques semiconducteurs III-V en fonction de paramètre de maille [52].

Théoriquement la bande interdite est calculée par la loi de Vegard pour les composés ternaires et quaternaires [56].

Pour un composé ternaire $A_xB_{1-x}C$ elle est donnée par :

$$E_g(A_xB_{1-x}C) = E_g(AC) \cdot x + E_g(BC) \cdot (1-x) - C_{ACD} \cdot x \cdot (1-x) \quad (2.44)$$

Avec x est la fraction molaire des éléments constituant le composé, C_{ACD} est le paramètre de la courbure de bandes, et $E_g(AC)$, $E_g(BC)$ les énergies de gap des composés binaires AC et BC, respectivement qui constituent le composé ternaire ABC.

Pour un composé quaternaire $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}$, l'énergie de gap est calculé en fonction des énergies de gap des composés ternaires qui le constituent [56]:

$$E_g(A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}) = \frac{\{x \cdot (1-x) \cdot [y \cdot E_{gABC}(x) + (1-y) \cdot E_{gABD}(x)] + y \cdot (1-y) \cdot [x \cdot E_{gACD}(y) + (1-x) \cdot E_{gBCD}(y)]\}}{(x \cdot (1-x) + y \cdot (1-y))} \quad (2.46)$$

Les mêmes relations sont utilisés pour le calcul du paramètre de maille des composés ternaires et quaternaires, sauf dans ce cas le paramètre de la courbure est nul.

Dans l'autre côté, les matériaux qui sont candidats pour être des matériaux de barrières sont : AlN, GaN, GaAs, AIP, AlAs, AlSb et ses alliages ternaires [54].

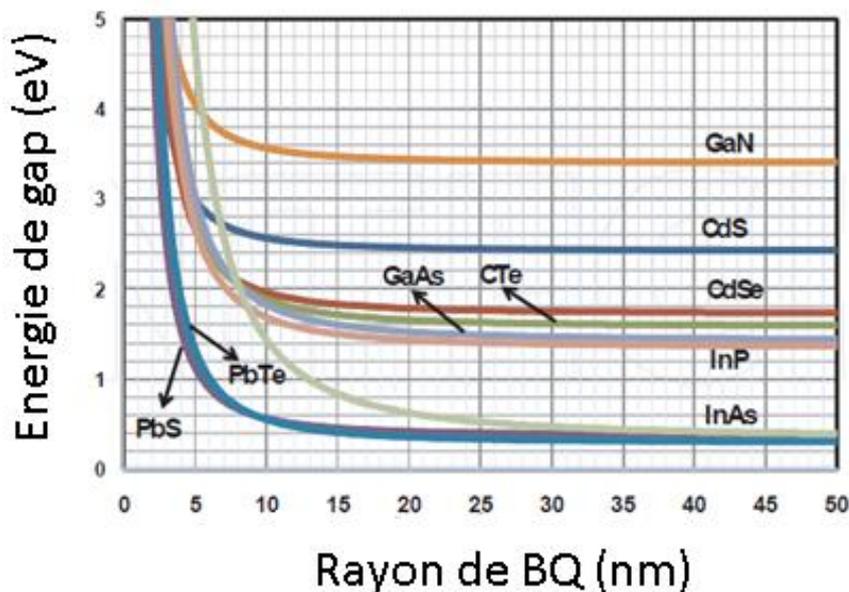


Figure 2.17 : Evolution de l'énergie de la bande interdite de quelques semiconducteurs BQs III-V et II-VI en fonction de ses tailles [57].

Actuellement, le but de la recherche dans les cellules solaires de 3^{ème} génération c'est l'exploration des BQs qui absorbent le maximum du spectre solaire c.à.d. l'élargissement du spectre d'absorption vers les longueurs d'ondes plus longues. L'une des approches pour atteindre ce but est l'utilisation des semiconducteurs BQs quaternaires. L'addition d'une petite quantité de l'azote $\leq 10\%$ dans GaAs réduit significativement l'énergie de gap, ce qui fait étendre la longueur d'onde d'absorption de GaAs. Par exemple avec une fraction molaire $x=0.02$ d'azote dans $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ l'énergie de gap diminue de 0.4 eV [58]. Par contre, si cette fraction molaire d'azote dépasse 0.1 ($0.1 < x < 0.995$), la qualité de $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ se dégrade à cause de grand désaccord de maille de GaAs et GaN ($\sim 20\%$) [59]. Pour réduire plus l'énergie de bande interdite, l'indium est incorporé dans le $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$, ce qui donne l'alliage quaternaire $\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}_{1-x}\text{N}_x$. D'ailleurs, ce matériau quaternaire est plus utilisé dans les cellules solaires triples jonctions InGaP/GaAs/Ge pour former une quatrième jonction entre le GaAs et Ge avec une énergie de gap adapté de 1 eV. Un rendement de conversion théorique de 35 % à 39% a été obtenu grâce à l'addition de ce matériau quaternaire dans la structure triple jonctions [60].

Il est rapporté que la structure à boîtes quantiques InAs/GaAs peut émettre à la longueur d'onde $\leq 1.3 \mu\text{m}$ pour des températures basses. Cependant le remplacement de l'arsenic par l'antimoine Sb dans les BQs InAs peut étendre la longueur d'émission/absorption vers $1.6 \mu\text{m}$ [61]. L'incorporation de Sb dans le matériau ternaire GaInAs diminue aussi l'énergie de gap et donc favorise l'extension de la longueur d'onde d'émission et d'absorption [62] d'une part et d'autre part réduit la contrainte plastique qui génère les dislocations et les défaut dans la

structure. Ces supériorités mentionnées au dessus rendent le GaInAsSb et GaInAsN des bons candidats pour améliorer les propriétés et les performances de BQs.

Dans notre travail on a concentré sur les boites quantique et puits quantiques à base de semiconducteurs à bande interdite étroite comme GaSb, InSb, InAs et ses alliages comme : InAsSb, InAsP, et sans oublier les composés IV comme SiGe. D'autres BQs ont été ainsi étudiés comme InGaN, InGaAs et GaAsN. Concernant les substrats et les matériaux barrières utilisés sont : GaAs grâce à ses propriétés optiques et électroniques impressionnantes avec une mobilité électronique élevée et une énergie de gap directe et aussi la facilité de la croissance des autres matériaux sur GaAs malgré le grand désaccord de maille, le silicium Si puisque est un matériau abondant et moins cher malgré la difficulté de l'intégration des semiconducteurs III-V avec lui, et aussi GaN qui a gagné une importance remarquable dans le domaine de photovoltaïque surtout pour les applications spatiales, et la structure à boite quantique InGaN/GaN est considéré comme un sujet de recherche récent dans le but d'améliorer leur rendement de conversion.

2.5. Techniques de fabrication et la croissance des BQs :

Dans cette section on présente les différentes techniques de la conception et l'analyse des structures à BQs employés dans les laboratoires [48][46]. La fabrication de ces structures commence par la croissance d'une hétérostructure. Depuis deux décennies, les techniques d'épitaxie en phase vapeur de composés organométalliques MOCVD et d'épitaxie par jets moléculaire MBE sont les plus utilisés pour la croissance par épitaxie (croissance ordonnée des couches) sur un substrat monocristallin. Cependant, il existe une autre technique de croissance épitaxiale récente qui combine la nature de jets moléculaires de MBE et l'utilisation de toutes les sources gazeuses comme dans le MOCVD, qui s'appelle l'épitaxie par jet chimique (CBE chemical beam epitaxy).

2.5.1. Epitaxie par jets moléculaire MBE :

C'est une technique de croissance épitaxiale sous ultra vide (UHV) des monocouches sur un substrat chauffé qui utilise le mode SK. Elle est caractérisée par un temps de croissance très lent et un meilleur contrôle de l'évaporation des éléments à croître. Le taux de croissance dans le MBE est très petit ~ 0.1 MC/s ce qui assure la nature de la déposition épitaxiale des couches (les éléments qui sont évaporés et déposés dans la surface du substrat prennent la nature monocristalline du ce dernier). L'ultra vide dans la chambre de MBE est de l'ordre de

10^{-7} Pa ce qui minimise significativement les contaminations qui provoquent les impuretés susceptibles de dégrader la qualité des couches déposées.

La MBE est très utilisée pour la fabrication des BQs III-V, pour cela elle consiste à envoyer sur la surface d'un substrat chauffé des jets atomiques (Al, Ga, In.....) ou bien des jets moléculaires pour le cas d'arsenic et phosphore (As_4 , P_4) qui sont produites par les cellules d'effusion sous une température de $1000\text{ }^\circ\text{C}$ à partir des sources solides comme montre la figure (2.18).

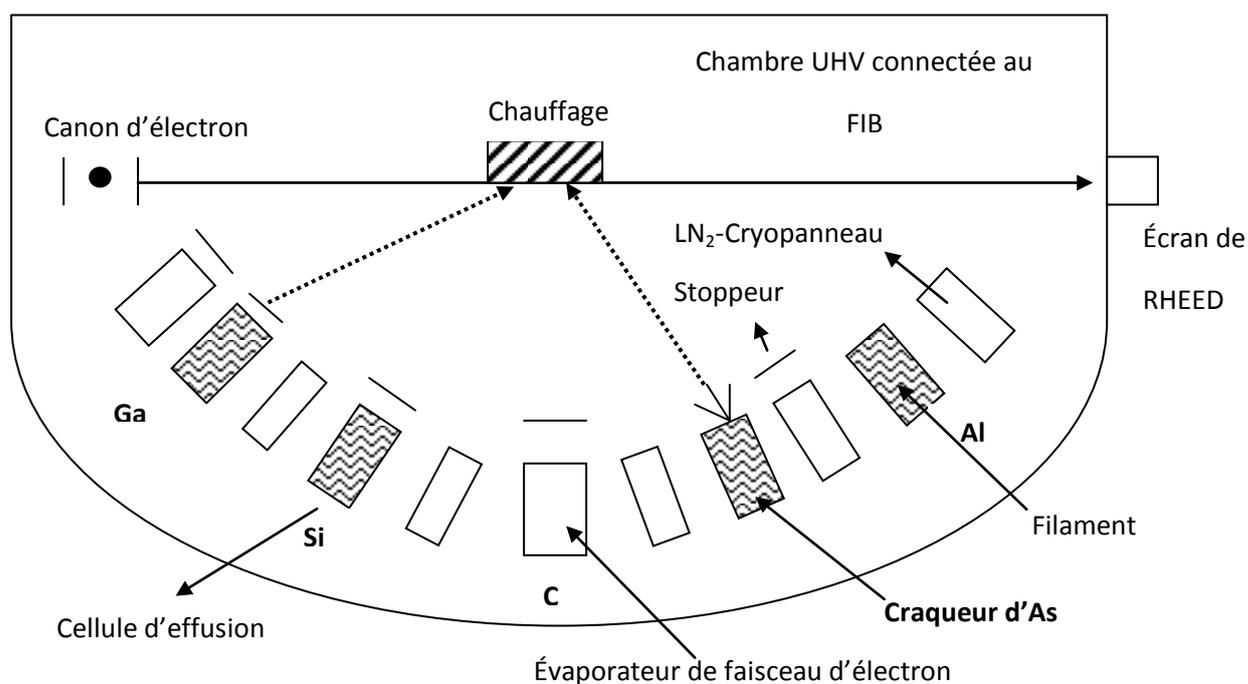


Figure 2.18 : Schéma représentatif de la chambre de croissance de système de croissance MBE [63].

Le taux de croissance dans le MBE est mesuré par l'appareil de diffraction-réflexion des électrons de haute énergie (RHEED reflection high energy electron diffraction) présenté dans la figure (2.19) qui se repose sur le principe de diffraction des électrons émises par un canaux d'électrons et accélérés par une haute tension (25 kV) sous une angle de 3° . Ces électrons diffractés à partir de la surface de l'échantillon sont captés par un écran fluorescent formant ainsi une image de la couche crue par épitaxie. L'image formée (spot spéculaire) dans l'écran oscille en intensité, et chaque période d'oscillation correspond à une couche crue.

La figure (2.19) représente la transition de l'image de RHEED pendant la croissance de boîtes quantique d'InAs sur un substrat de GaAs : (a) surface de GaAs, (b) après la déposition de la couche de mouillage 2D d'InAs sur GaAs et (c) après la formation des îlots 3D d'InAs. On voit clairement que l'intensité du spot varie d'une étape à l'autre.

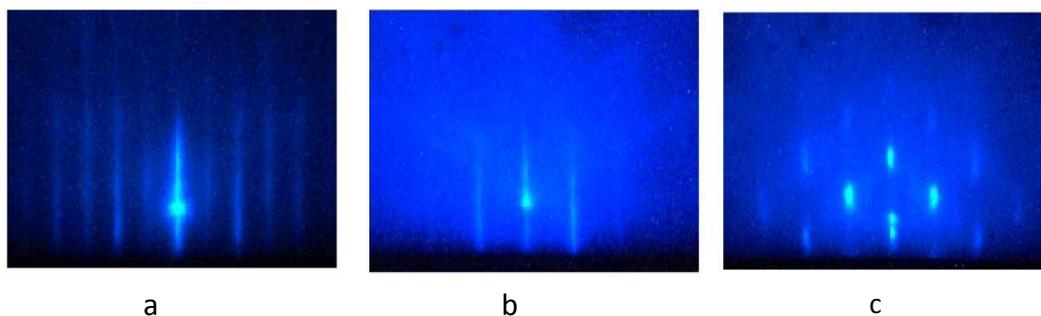


Figure 2.19 : Images de RHEED pendant la croissance des BQs d'InAs sur substrat GaAs [64].

Les inconvénients de la MBE sont : son taux de croissance faible (temps lent), leur temps de disponibilité réduit à cause le grand nombre d'entretiens exigés dans le coté de rechargement de la source et le calibrage après chaque expérience, et aussi l'utilisation élevé d'azote liquide pour le refroidissement.

2.5.2. Epitaxie en phase vapeur de composés organométalliques MOCVD :

De même que le MBE, cette technique de croissance repose sur le mode SK. Elle utilise des sources de composés chimiques au lieu des sources solides comme dans le MBE. Le transport de ces composés chimiques vers un substrat chauffé à haute température de 600 °C se fait à l'aide d'un gaz porteur sous un vide varie entre 100 et 760 Torr [42]. Elle permet d'effectuer des croissances en moins temps par rapport à le MBE et sur des grandes surfaces (comme les cellules solaires multijonctions), et par conséquent ce type de technique est moins couteuse par rapport au MBE.

Les désavantages de MOCVD sont : la grande partie perdue des molécules à la surface du substrat ce qui entraine l'augmentation du cout, le problème de sécurité lié à l'utilisation des gaz.

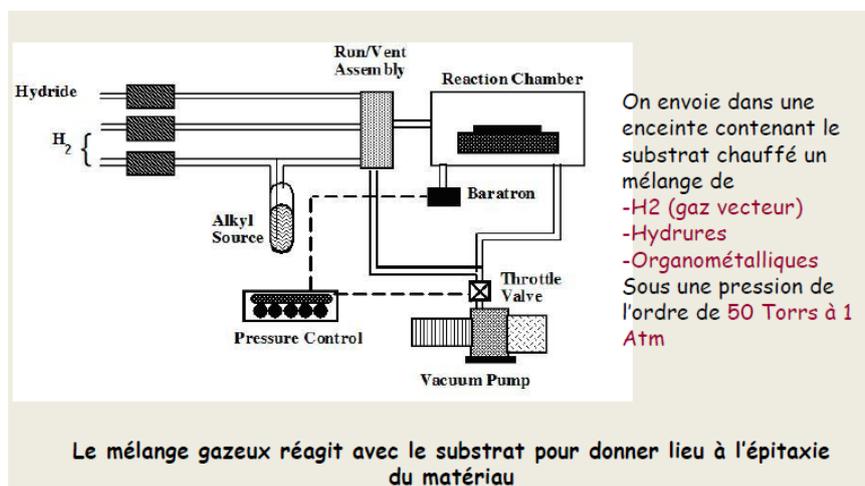


Figure 2.20 : Montage expérimental du système de croissance MOCVD [65].

2.5.3. Epitaxie par jets chimiques CBE :

Ce type de technique combine à la fois les propriétés de MBE et MOCVD. Elle utilise des cellules décomposant à haute température les gaz tel que l'arsine AsH_3 , la Phosphine PH_3 comme sources des éléments du groupe V et des composés organométalliques par exemple triéthylgallium (TEGa), triméthylindium (TMIn), triéthylaluminium (TEAl) comme des sources des éléments du groupe III. Les gaz de groupe V sont prés-décomposés dans l'injecteur à une température de $950\text{ }^\circ\text{C}$ et les molécules décomposées vont adsorber, organiser sur la surface du substrat pour former une couche 2D de bonne qualité cristalline. Par contre, les composés organométalliques ne prés-décomposent pas, mais sont envoyés directement à la surface du substrat chauffé. Si la température du substrat est assez suffisante, le composé organométallique dissocie ses trois alkyles en laissant l'atome du groupe III sur la surface du substrat. Le bâti du CBE est montré dans la figure (2.21).

La CBE est plus prometteuse pour réduire le cout de fabrication des cellules solaires à boites quantique et d'éviter les inconvénients de MBE et MOCVD.

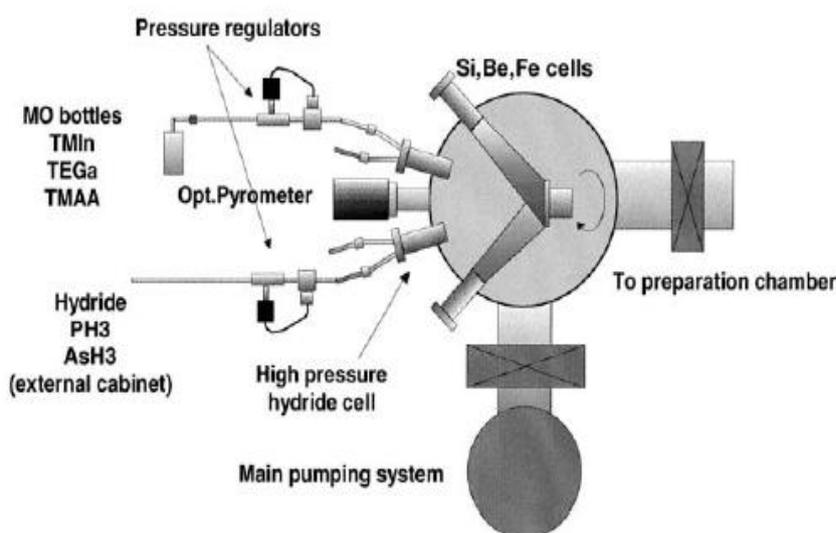


Figure 2.21 : Montage expérimental du système de croissance CBE [66].

2.6. Conclusion :

Dans ce chapitre nous avons rappelé les propriétés physiques et optiques des nanostructures quantiques en général. Par la suite, on a concentré plus sur les boîtes quantiques qui sont l'objet principale de notre étude, le mode de croissance des BQs auto-assemblés Stranski-Krastanov SK a été présenté en détail, ainsi la méthode de compensation de la contrainte a été décrite. Dans la partie suivante nous avons exposé tout d'abord les types des BQs semiconducteurs existantes, ensuite on a présenté les critères de la sélection des matériaux III-V pour les employer comme des matériaux BQs dans les applications photovoltaïques. Dans la dernière partie les techniques de la fabrication des BQs ont été décrites et on a montré les avantages et les intérêts de la technique CBE pour fabriquer des cellules solaires à haute efficacité et à bas cout par rapport à la MBE et MOCVD.

CHAPITRE 3

MODELISATION ET SIMULATION DES CELLULES SOLAIRES À NANOSTRUCTURES QUANTIQUES : BQs, PQs ET NFs

3.1. Introduction :

Dans ce chapitre nous allons faire une modélisation et simulation de différentes structures à nanostructures quantiques BQs, PQs et NFs pour les applications photovoltaïques dans le but de montrer l'avantage de l'insertion de ces nanostructures quantiques dans une cellule solaire conventionnelle sur l'amélioration de leurs performances optiques et électriques et d'autre part sélectionner les bons matériaux semiconducteurs nanostructures qui donnent meilleurs résultats. Pour cela, nous commençons en premier temps de présenter notre outil de simulation qui était SILVACO TCAD/ATLAS (Licence 2016 de l'Unité de Développement des Equipements Solaires UDES SILVACO©). Ensuite, on entame la simulation de plusieurs cellules solaires à nanostructures quantiques III-V : GaSb/GaAs, InSb/GaAs, InAsP/GaAs, InGaN/GaN, ainsi que IV-IV : SiGe/Si. Pour chaque partie de simulation, la structure de la cellule solaire à nanostructure quantique et ses paramètres sont bien définis. L'objectif visé est d'améliorer les performances électriques : la caractéristique densité de courant-tension J-V, la puissance-tension P-V et l'efficacité quantique externe EQE, ainsi que les performances optiques : la photoluminescence PL et le coefficient d'absorption α par l'étude de l'effet de certains paramètres comme le nombre de couches, la taille, la fraction molaire x des nanostructures quantiques, et aussi l'effet de la température. Finalement, on essaie de faire une comparaison entre les différentes structures étudiées afin de sélectionner les meilleurs qui donnent une bonne optimisation de la cellule conventionnelle correspondante.

3.2. Présentation du logiciel SILVACO :

La simulation est un aspect avancé très important utilisé actuellement dans presque tous les laboratoires de recherche à travers le monde. La simulation numérique d'une cellule solaire est utilisée couramment pour l'optimisation de ses caractéristiques physiques et optiques.

Dans ces travaux de recherche, nous avons utilisé SILVACO TCAD comme un outil de simulation et modélisation d'une cellule solaire. SILVACO TCAD (Technology Computer Aided Design) est un logiciel puissant de conception et de simulation de dispositifs électroniques, y compris la simulation de processus semiconducteurs et la simulation de périphériques. Ce logiciel est développé par SILVACO, Inc.

Le SILVACO TCAD contient plusieurs composants dont les outils interactifs (DeckBuild et Tonyplot), simulateur de processus ATHENA, simulateur de dispositifs ATLAS, éditeur de la structure et maillage DevEdit, etc (voir figure (3.1)). Tous ces composants sont organisés ensemble à travers l'interface graphique de SILVACO TCAD.

A partir la figure (3.1), on voit clairement que le simulateur ATLAS est le cœur de composants de SILVACO TCAD. ATLAS est un simulateur physique 2D ou 3D des dispositifs basés sur la physique de semiconducteurs. Il peut simuler plusieurs caractéristiques des dispositifs semi-conducteurs comme les caractéristiques électriques, optiques et même thermiques. Il offre un grand nombre de modèles physiques à utiliser dans la simulation.

Les simulations faites par ATLAS utilisent deux types de fichiers d'entrées qui sont le fichier de commande et le fichier de structure comme le montre la figure (3.1). Le premier fichier est un fichier script qui a effectué par le Deckbuild et il contient des commandes pour qu'ATLAS s'exécute. Le deuxième fichier définit la structure de dispositif à simuler. Concernant les fichiers de sorties de ATLAS, on peut trouver trois fichiers de sorties principales. Le premier est le fichier Runtime qui fournit la progression, et les erreurs d'avertissements durant la simulation. Le deuxième est le fichier LOG qui enregistre tout les caractéristiques calculés par ATLAS : courant, voltage, fréquence, et le temps. Le dernier est le fichier solution qui stocke les données 2D ou 3D concernant les valeurs des variables solutions dans le dispositif en un point donné. Ces trois fichiers de sortie sont traités par l'outil de visualisation Tonyplot.

Les principaux groupes de commandes d'ATLAS sont exprimés dans la figure (3.1). L'ordre de ces commandes doit être respecté sinon un message d'erreur apparaîtra lors la simulation.

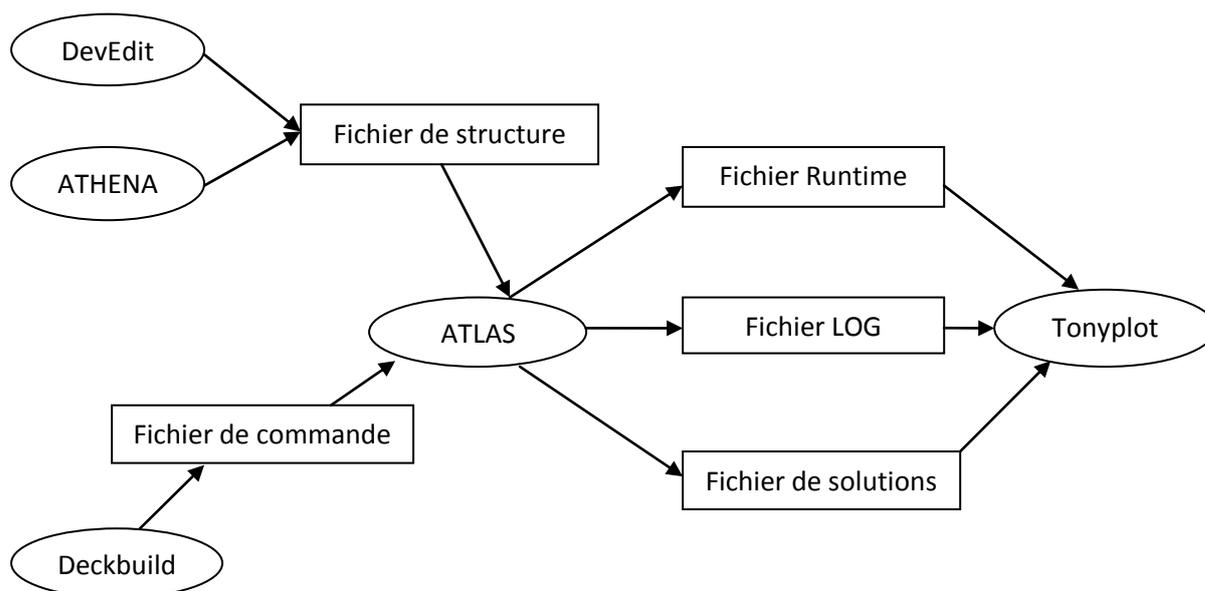


Figure 3.1: Diagramme de SILVACO TCAD et les entrées-sorties d'ATLAS [67].

1. Spécification de la structure :

Pour spécifier la structure à simulé, il faut passer par quatre étapes : définition du maillage, définition des régions, définition des électrodes et la définition des dopages.

MESH (maillage) : consiste à deviser la structure à simuler en petites cellules 2D ou 3D pour pouvoir résoudre les équations fondamentales de dispositifs semiconducteurs numériquement. Un grand maillage provoque une simulation rapide mais des résultats moins précis et vis-versa.

REGIONS : dans cette étape on définit les régions qui constituent la structure. Selon l'ordre de dimensions qu'on a 2D ou 3D, la région spécifiée est définie par ces coordonnées (x, y, z) ou bien (θ, r, z) si on a une structure cylindrique ou sphérique. Ainsi, on doit définir le nom de matériau qui constitue la région.

ELECTRODES : permet de réaliser les contacts : grille, anode et cathode.

DOPAGE : permet de spécifier le type de dopage de la région spécifiée : type n ou p, ainsi la distribution du dopage : uniforme, gaussien.....etc.

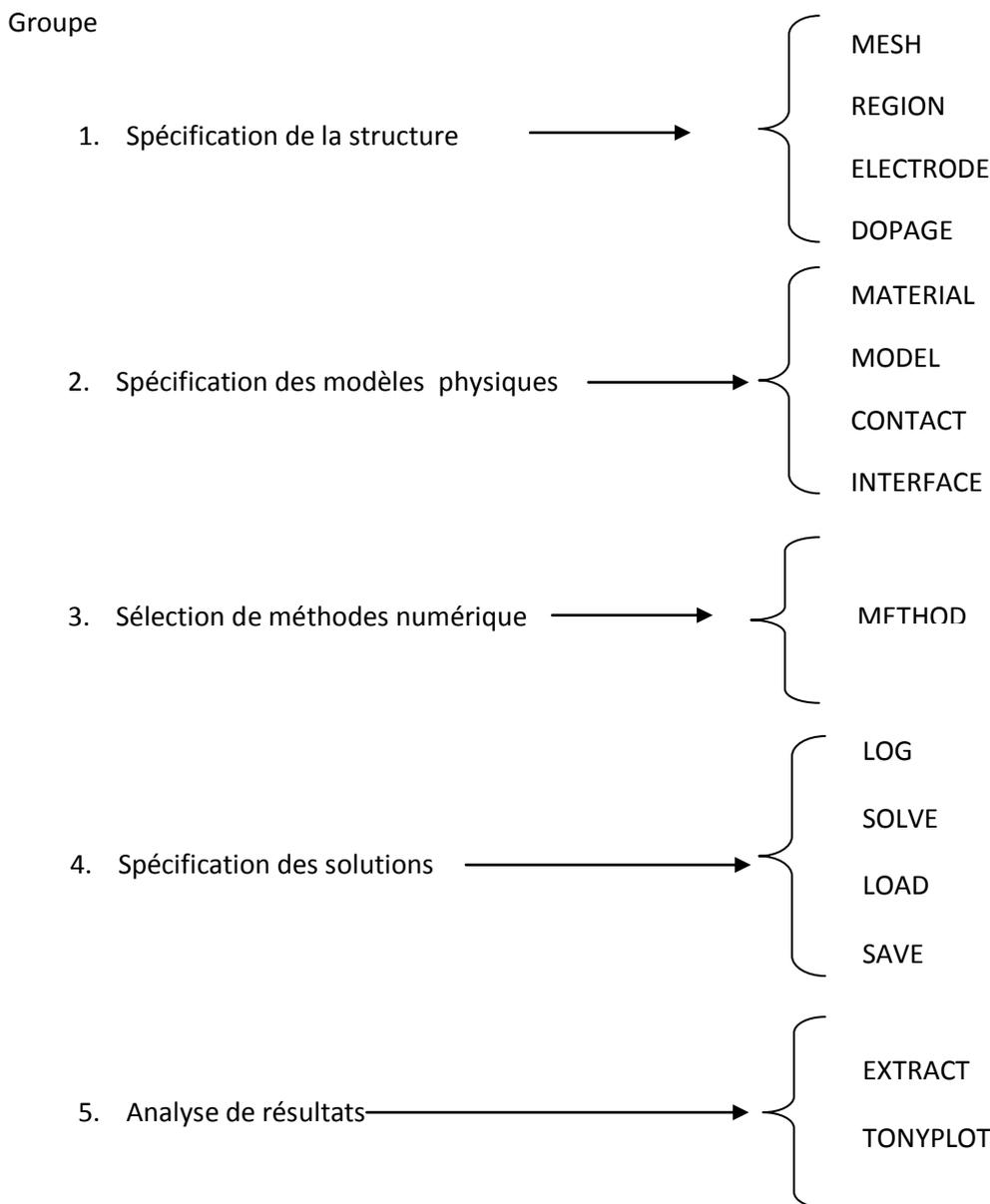


Figure 3.2 : Commandes du simulateur ATLAS [67].

2. Spécification des modèles physiques et la définition des matériaux :

Après la spécification de la structure, on doit préciser les modèles physiques à employer et de définir les matériaux.

MATERIAL: il définit tout les paramètres de matériaux nécessaires (énergie du gap, coefficient d'absorption, l'affinité de l'électron, la permittivitéetc).

MODELS : ils indiquent les inclusions de différents mécanismes physiques (recombinaison, mobilité, etc...). Le choix du modèle physique dépend de type de matériau. Dans ce travail de recherche nous sommes intéressés à l'étude des BQs et PQs, pour cela ATLAS utilise des modèles physiques qui décrivent les effets quantiques dans les semiconducteurs nanostructures, les commandes de ces modèles sont : QWELL qui permet de

résoudre l'équation de Schrödinger dans une direction de confinement 1D, ce qui veut dire qu'on a un PQ, et la commande 2DXY.SCHRO qui permet de résoudre l'équation de Schrödinger dans deux directions 2D. Si on utilise ces deux commandes à la fois dans MODELS, cela va permettre de résoudre l'équation de Schrödinger dans les trois directions de confinement par ATLAS et par cette méthode on peut simuler une BQ.

CONTACTS : il définit les paramètres d'un contact comme la résistivité, travail de sortie.....etc.

INTERFACE : il indique les paramètres d'interfaces aux frontières des régions comme la vitesse de recombinaison des porteurs à la surface.

3. Sélection des méthodes numériques :

ATLAS utilise souvent deux méthodes numériques qui sont la méthode de Newton et la méthode de Gummel. La méthode de Newton correspond à la résolution itérative d'un système regroupant les trois équations différentielles régissant le fonctionnement de la structure. La méthode de Gummel consiste à découpler en trois sous-systèmes le système global décrit précédemment : les trois équations sont résolues itérativement les unes après les autres jusqu'à atteindre la convergence globale des solutions. L'intérêt potentiel de cet algorithme par rapport à celui de Newton réside dans la réduction des dimensions des systèmes matriciels à résoudre, ce qui permet a priori de diminuer le temps de calcul.

4. Spécification des solutions:

LOG : permet à toutes les caractéristiques finales de simulation d'être stockés dans un fichier d'extension « .log ».

SOLVE : la déclaration SOLVE fait suite à la déclaration LOG. SOLVE effectue une solution pour un ou plusieurs points de polarisation.

LOAD : charge des solutions précédentes à partir de fichiers en tant que conjectures initiales à d'autres points de polarisation.

SAVE : sauve toutes les informations d'un point nœud du maillage dans un fichier de sortie (les fichiers de sortie sont de type structure). Les informations sauvées correspondent à un état électrique bien précis.

5. Analyse des résultats:

Après l'obtention des résultats de la simulation par les étapes précédentes, des valeurs de paramètres spécifiés des fichiers de la structure ou de LOG peuvent être extraire par la commande « EXTRACT » ou bien tracer sous forme de graphes par la commande « TONYPLOT ».

Il existe une autre commande importante utilisée dans le cas où on veut simuler des photodétecteurs comme les cellules solaires qui s'appelle BEAM. BEAM représente un signal d'entrée optique ou un faisceau lumineux (spectre solaire dans le cas de cellules solaires par exemple) mono ou multi-spectral. Cette commande est déclenchée en utilisant la commande SOLVE.

3.3. Cellules solaires à nanostructures quantiques simulées:

3.3.1. Cellule solaire à BQs de GaSb/GaAs :

Dans cette partie de travail nous nous sommes intéressés à la modélisation et la simulation d'une cellule solaire à BQs de GaSb/GaAs. Les BQs de GaSb sont insérés dans la région intrinsèque d'une cellule solaire p-i-n à base de GaAs tout en créant des couches de BQs de GaSb (BQ)/GaAs (barrière). La figure (3.3) montre la structure de la cellule solaire étudiée dans ce travail prise par ATLAS SILVACO. Deux couches en bleu d'InGaP en haut et en bas de type p et n, représentent la couche fenêtre et la couche de champ électrique en arrière (en anglais back surface field BSF) avec des concentrations de dopage de $2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ [68], respectivement. Ces deux couches sont utilisées afin de réduire la recombinaison en surface en avant et en arrière de la cellule solaire. Deux couches en vert de GaAs type p et n représentent l'émetteur et la base avec des concentrations de dopants de $4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ [68]. Une autre couche de GaAs au milieu représente la région intrinsèque sur laquelle les BQs de GaSb en rouge sont insérés. La figure (3.4) montre une partie agrandie de la région intrinsèque de la cellule solaire p-i-n après l'insertion des BQs de GaSb. On voit que les BQs prennent une forme rectangulaire avec une hauteur de 5 nm et largeur de 10 nm.

3.3.1.1. Résultats et discussion :

Au cours de cette partie de travail, nous avons utilisé les conditions standards de qualification des cellules solaires: un spectre solaire AM1.5G est une température de 300 K. Nous avons commencé la simulation de la cellule solaire p-i-n sans BQs. Par la suite, nous avons passé à la simulation d'une cellule solaire à BQs GaSb/GaAs pour un nombre variable de couches de BQs : 10, 20 et 40, respectivement. Pour chaque simulation, la caractéristique J-V, la courbe d'EQE et les paramètres caractéristiques importants d'une cellule solaire sont présentés et discutés.

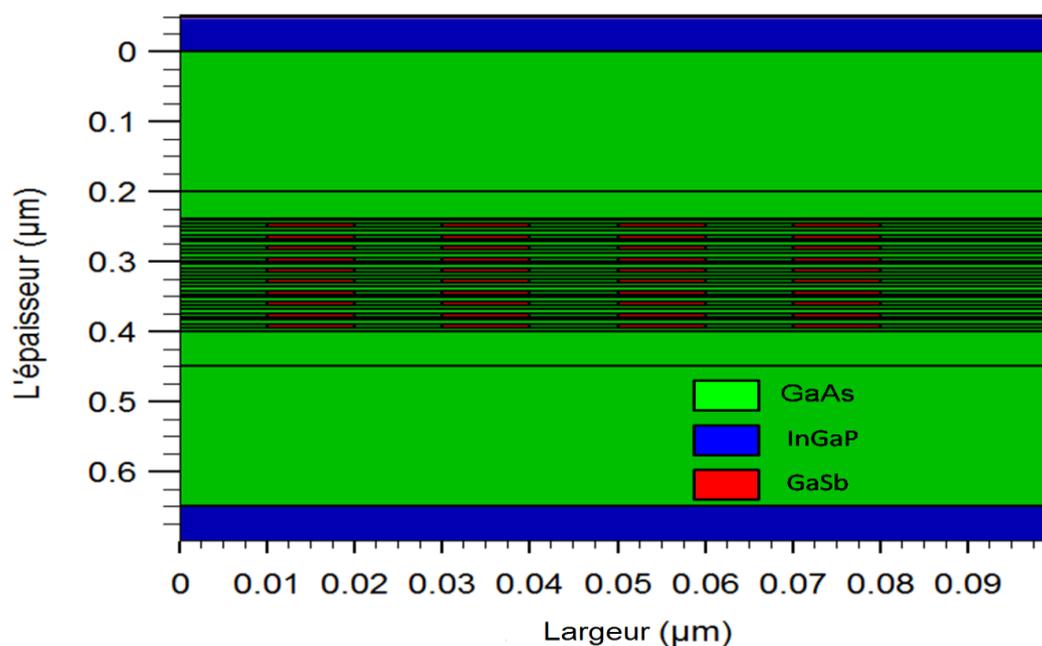


Figure 3.3 : Structure de la cellule solaire p-i-n à base de GaAs [69].

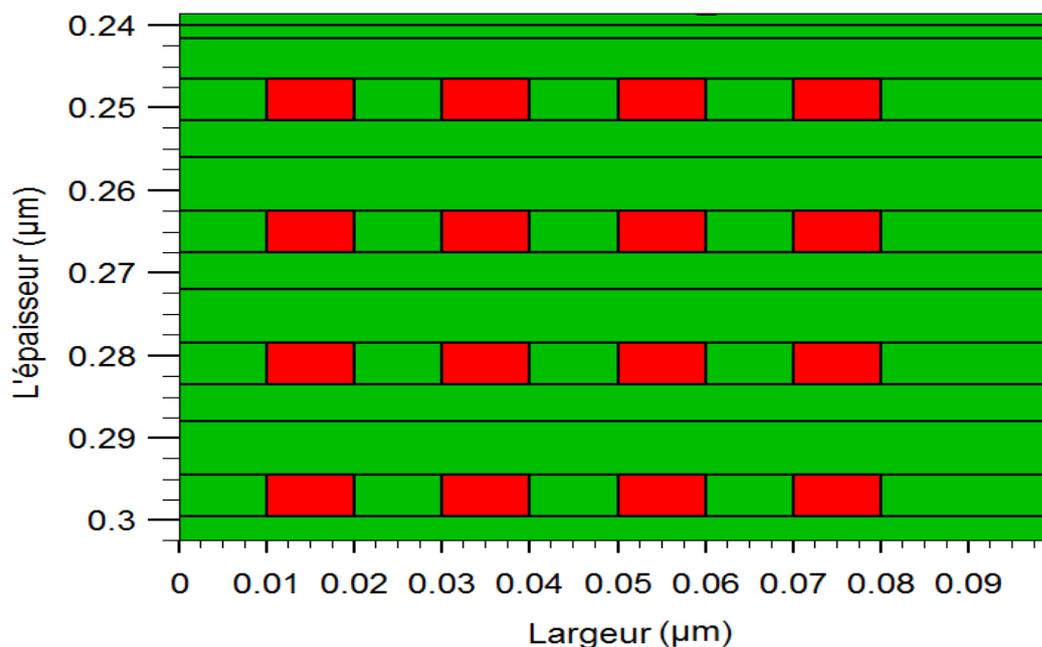


Figure 3.4 : Partie agrandie de la région intrinsèque de la cellule solaire à BQs de GaSb/GaAs [69].

La figure (3.5) représente l'efficacité quantique externe EQE prise par ATLAS SILVACO en fonction de la longueur d'onde d'une cellule solaire avec et sans BQs de GaSb pour un nombre différent de couches insérées: 10, 20 et 40, respectivement. Il est clair dans cette figure que l'EQE d'une cellule solaire standard p-i-n s'annule autour la longueur d'onde 875 nm. L'EQE dans la gamme 900 nm à 1200 nm de la cellule solaire à BQs GaSb/GaAs

avec 10 couches, 20 couches et 40 couches augmente de 6 % à 12 %, ce qui signifie que les photons moins énergétiques dans cette plage de longueurs d'onde sont effectivement absorbés et ne sont pas perdus, donc ils ont contribué à la création de paires électron-trou. En outre, il peut y avoir une autre optimisation dans la plage de longueurs d'ondes 550 nm à 900 nm. Nous pouvons expliquer ce résultat par l'élargissement de l'épaisseur de la région intrinsèque de la cellule solaire p-i-n en raison du nombre accru de couches de BQs introduites.

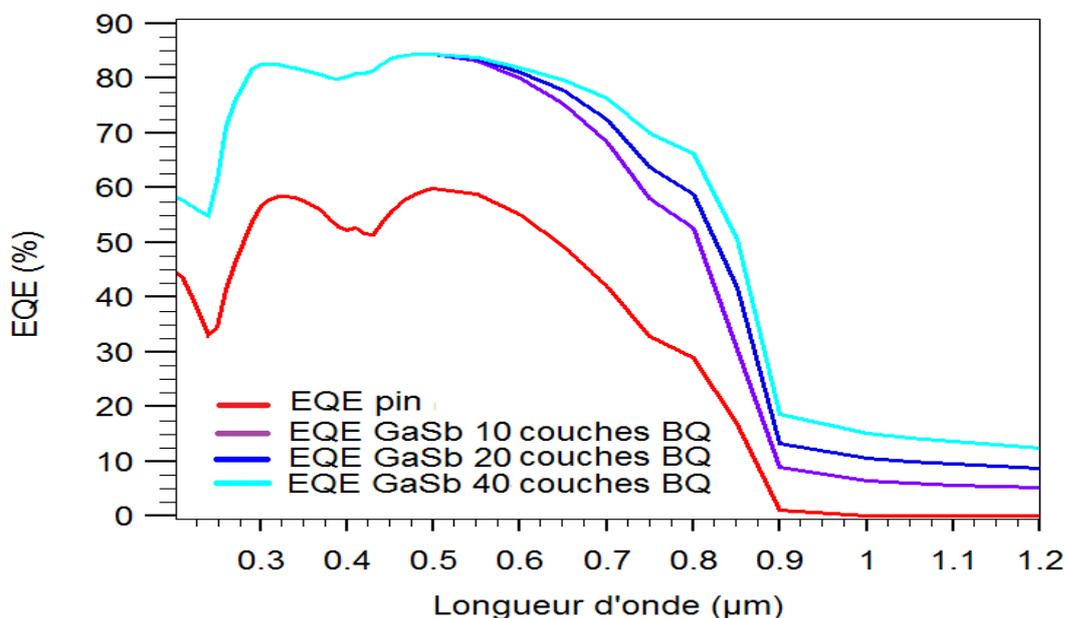


Figure 3.5 : EQE de la cellule solaire sans et avec un nombre variable de couches de GaSb/GaAs [69].

. La figure (3.6) représente la caractéristique J-V de la cellule solaire sans et avec BQs pour un nombre variable de couches de BQs GaSb/GaAs insérées: 10, 20 et 40, respectivement. Nos résultats ont montré que la cellule solaire p-i-n offre un courant de court-circuit de 21.65 mA/cm^2 , une tension de circuit ouvert de 1V et une puissance maximale de 16.48 mW/cm^2 . Le courant de court-circuit augmente avec le nombre de couches, grâce aux paires électron-trou supplémentaire photogénérés. La tension de circuit ouvert reste approximativement constante lorsque le nombre de BQs insérés augmente. Une augmentation relative de 1.8 % et 36.3 % du courant de court-circuit et du rendement de la conversion, respectivement, est obtenu lors de la comparaison d'une cellule solaire à 40 couches avec cellule solaire p-i-n. Le tableau (3.1) résume tous les paramètres caractéristiques de la cellule solaire (courant de court-circuit: J_{cc} , la tension du circuit ouvert: V_{co} , le facteur de forme: FF et le rendement quantique de conversion: η) de la cellule solaire sans et avec BQs de GaSb/GaAs avec un nombre de couches variable.

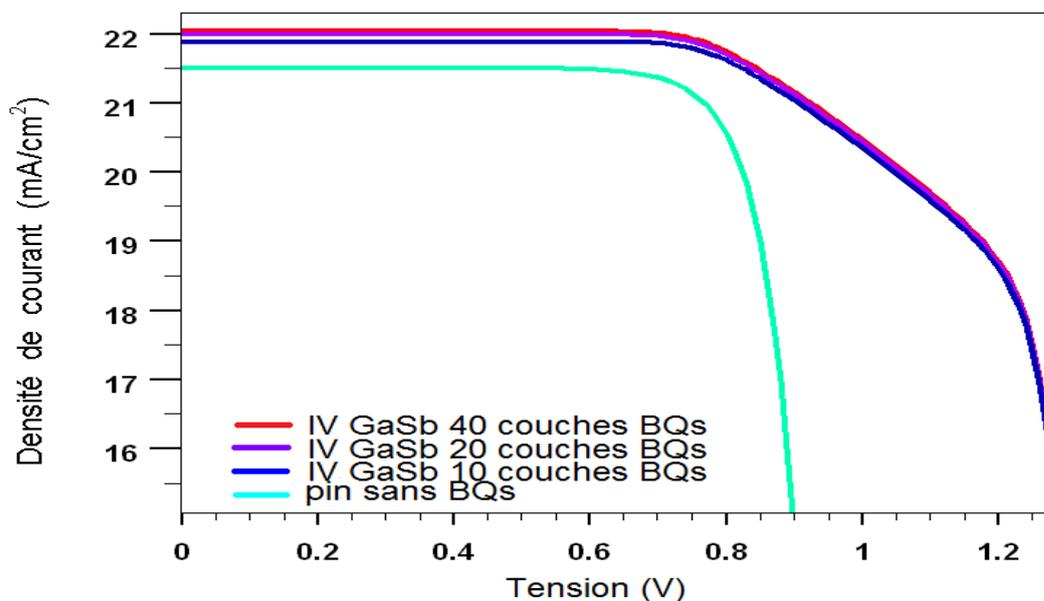


Figure 3.6 : Caractéristique J-V de la cellule solaire sans et avec un nombre variable de couches de BQs GaSb/GaAs [69].

Tableau 3.1 : Paramètres caractéristiques d'une cellule solaire p-i-n et à BQs GaSb/GaAs pour un nombre de couches variable.

Nombre de couches de BQs	J_{cc} (mA/cm ²)	V_{co} (V)	FF (%)	η (%)
0	21.65	0.98	79.76	16.48
10	21.89	1.33	76.64	22.33
20	22	1.33	76.57	22.42
40	22.04	1.33	76.54	22.46

3.3.2. Cellule solaire à BQs InSb/GaAs :

Dans cette partie d'étude on se concentre sur la simulation et l'optimisation des propriétés électriques et optiques d'une cellule solaire à BQs d'InSb/GaAs. InSb est parmi les semiconducteurs d'énergie de gap étroite (~ 0.24 eV [70]), ces semiconducteurs sont très importants dans le domaine d'optoélectronique et pour la nouvelle génération de la cellule solaire. L'influence de plusieurs paramètres comme le nombre, l'épaisseur de BQs sur la caractéristique J-V, la courbe d'EQE et le spectre PL ont été étudiés. Les caractéristiques électriques obtenues avec le nombre optimal de BQs ont été comparés avec ceux de la structure d'InAs/GaAs examiné expérimentalement dans le but de montrer la bonne structure. Le spectre de PL simulé a également été comparé avec un spectre de PL mesuré pour la validation. La structure de la cellule solaire avec 10 couches de BQs d'InSb/GaAs est

indiquée dans la figure (3.7). Deux couches de GaAs grises en haut et en bas représentent l'émetteur de type p et la base de type n avec une concentration de dopage de 10^{17} cm^{-3} pour chacune. Une autre couche de GaAs grise au milieu représente la couche intrinsèque dans laquelle on insère les BQs d'InSb avec une couleur blanche. Le tableau (3.2) rassemble tout les paramètres de la structure simulée.

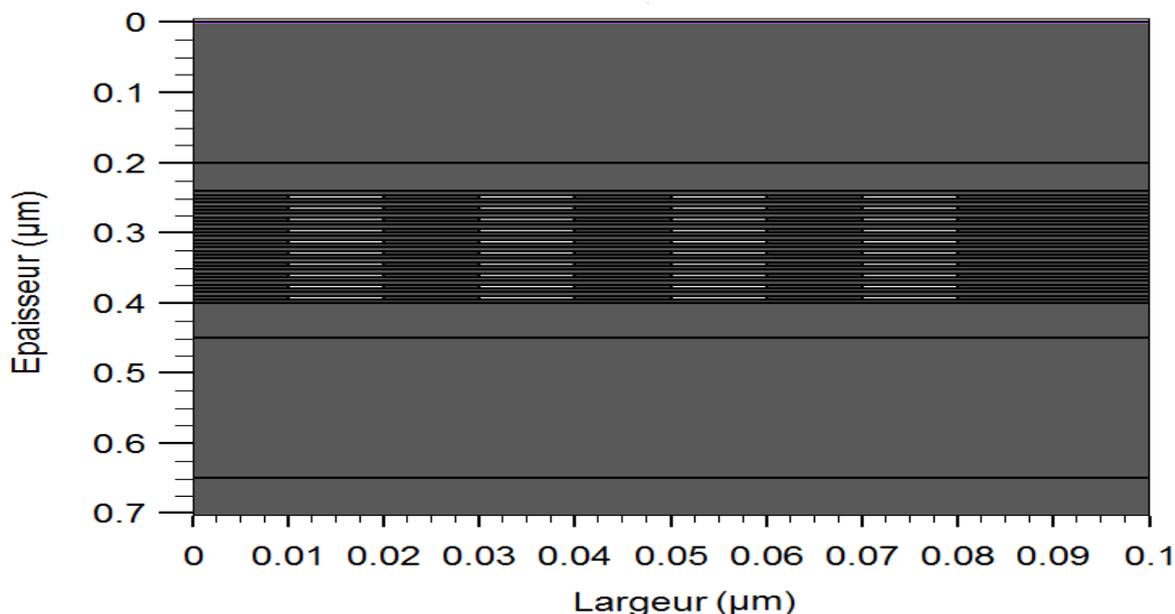


Figure 3.7 : Structure de la cellule solaire à 10 couches de BQ d'InSb/GaAs [71].

La figure (3.8) montre le diagramme de bandes d'énergies de cette structure. On voit clairement que le type d'alignement de bandes est type I, dans un tel type d'alignement les électrons (trous) se confinent soit dans le matériau BQ (InSb) ou bien dans le matériau barrière (GaAs). En plus, on voit que la discontinuité de la bande de valence prend une large partie de la discontinuité totale de bandes ce qui augmente l'énergie de localisation [72].

3.3.2.1. Résultats et discussion :

Nous avons commencé la simulation par l'étude de la variation du nombre de couches de BQs insérées. Dans cette partie, les simulations ont été effectuées à une température de 300 K et sous un spectre solaire AM1.5G. Ensuite, nous avons calculé le spectre PL à une température de 77 K pour analyser les propriétés optiques de la structure. Les résultats de la première partie de la simulation sont comparées aux résultats expérimentaux d'une autre structure à BQs InAs/GaAs [73], dans l'objectif de montrer la meilleure structure qui donne de bonnes améliorations. Les tailles des BQs d'InAs formés dans l'expérience à une température ambiante sont caractérisées par une hauteur de 7 nm et une taille latérale d'environ 30 nm. Le

spectre PL simulé obtenu a également été comparé à celui mesuré expérimentalement pour la même structure sous une basse température de 1.6 K et une puissance d'excitation de 28 mW/cm² [74]. En outre, l'effet de la variation de l'épaisseur de BQs a également été étudié et discuté. Les paramètres physiques des matériaux utilisés dans cette simulation sont extraits à partir les références [69][75].

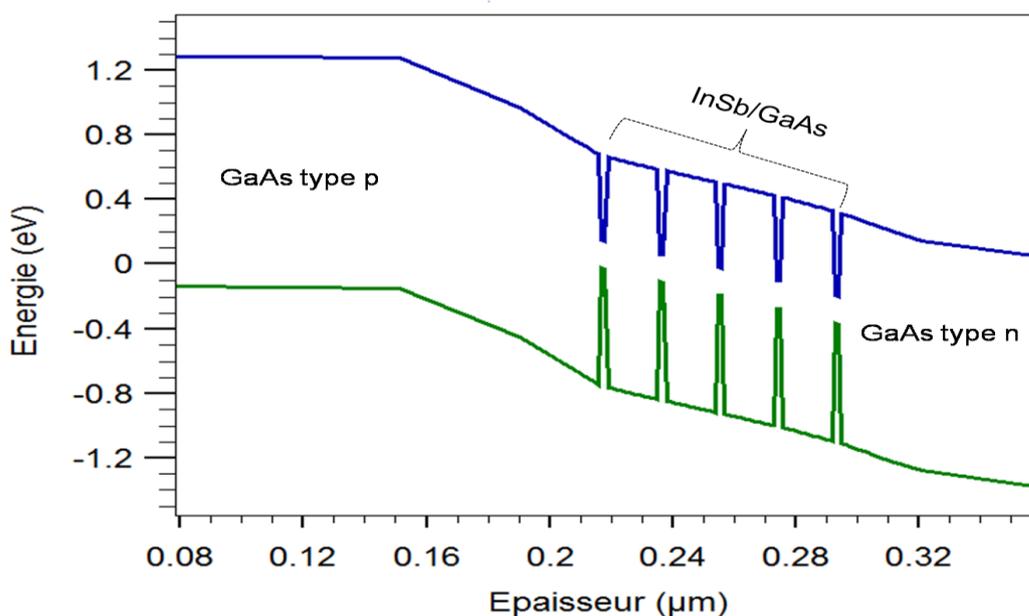


Figure 3.8 : Diagramme de bandes d'énergie de la cellule solaire à BQ d'InSb/GaAs [71].

Tableau 3.2 : Paramètres des régions de la structure à BQs d'InSb/GaAs.

Paramètres régions	Epaisseur (µm)	Dopage (cm ⁻³)	Largueur (µm)
Emetteur (GaAs)	0.2	10 ¹⁷	0.1
Base (GaAs)	0.2	10 ¹⁷	0.1
1×Barrière (GaAs)	0.016	-	0.1
1×BQ (InSb)	0.005	-	0.01
Substrat (GaAs)	1	5×10 ¹⁸	0.1

Figure (3.9) représente l'EQE en fonction de la longueur d'onde pour une cellule solaire avec et sans BQs avec un nombre variable de couches de BQs insérées: 10, 20 et 30, respectivement. On observe que l'EQE d'une cellule solaire p-i-n chute à partir la longueur d'onde 880 nm. L'EQE dans la gamme de longueurs d'onde 900 nm-1400 nm de la cellule

solaire à BQs d'InSb/GaAs avec 10 couches, 20 couches et 30 couches de BQs varie de 5% à 11%. Cela signifie que les photons dans cette gamme de longueurs d'onde sont effectivement absorbés et ils contribuent pour la création des paires électron-trou supplémentaires. Avec 30 couches de BQs, l'EQE atteint un gain d'environ 11% dans la gamme de longueurs d'ondes mentionnée. D'autre part, il existe également une optimisation supplémentaire dans la gamme de longueurs d'onde 650 nm-880 nm. Cela peut être expliqué par l'élargissement de l'épaisseur de la région intrinsèque par l'augmentation du nombre de couches QD introduites.

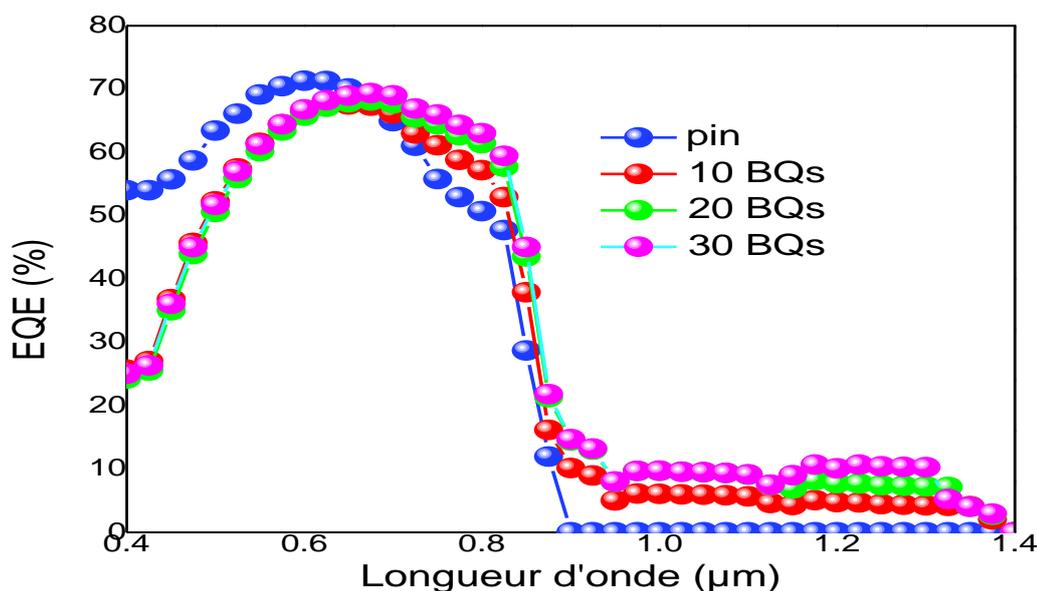


Figure 3.9 : EQE de la cellule solaire p-i-n et à BQ d'InSb/GaAs pour un nombre variable de couches de BQs [71].

La figure (3.10) montre la courbe du coefficient d'absorption calculée de la cellule solaire p-i-n et à BQs d'InSb/GaAs pour un nombre différent de couches de BQ intégrées: 10, 20 et 30, respectivement. On voit clairement que le coefficient d'absorption augmente avec l'augmentation de couches de BQs. Il était également évident que la structure à BQs d'InSb / GaAs exploite une large gamme du spectre solaire incident (de 300 nm à 1400 nm). Par exemple à la longueur d'onde 600 nm où on trouve l'intensité maximale du spectre solaire [76], le coefficient d'absorption augmente de $1.48 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$ à $8.16 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$ lorsque le nombre de BQs augmente de 0 à 30.

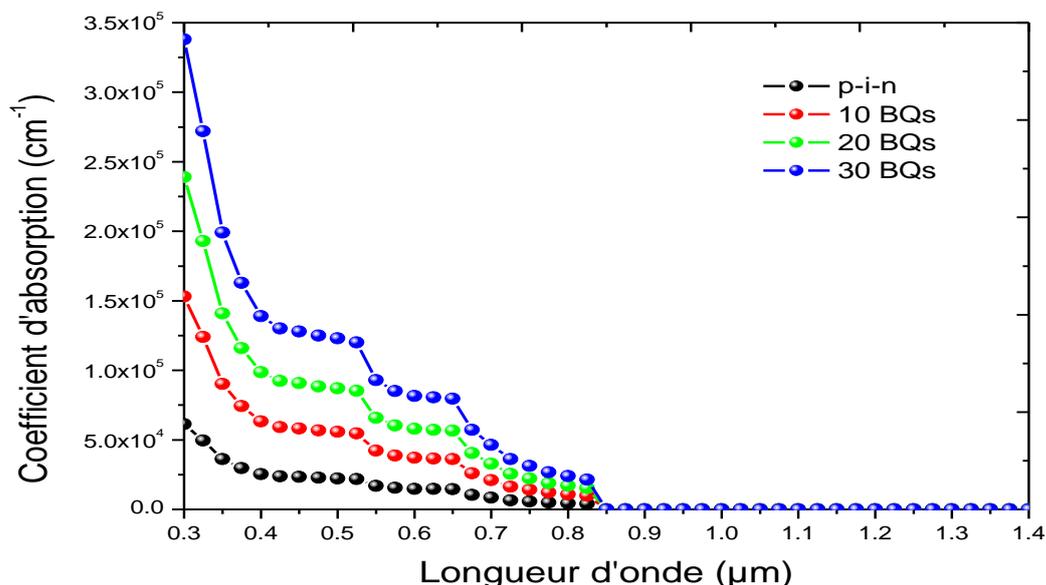


Figure 3.10 : Coefficient d'absorption de la cellule solaire p-i-n et à BQ d'InSb/GaAs pour un nombre de couches de BQs différent [71].

Dans ce que suit, nous avons examiné les spectres de PL calculés à 77 K. Figure (3.11) et (3.12) montrent le spectre PL calculé de la cellule solaire à 30 couches de BQs et p-i-n pour une puissance d'excitation externe de 10 mW, respectivement. Comme on peut le voir dans la figure (3.11), la courbe présente un pic d'émission distinct à 1375 nm (énergie d'émission de 0.90 eV) provient de la recombinaison radiative des porteurs dans InSb. D'autre part, la cellule solaire p-i-n à base de GaAs présente un pic d'émission autour de 850 nm (énergie d'émission de 1.45 eV), comme le montre la figure (3.12). Ainsi, l'insertion des couches de BQs d'InSb/GaAs déplace la longueur d'onde d'émission de la cellule solaire p-i-n à base de GaAs d'environ 500 nm.

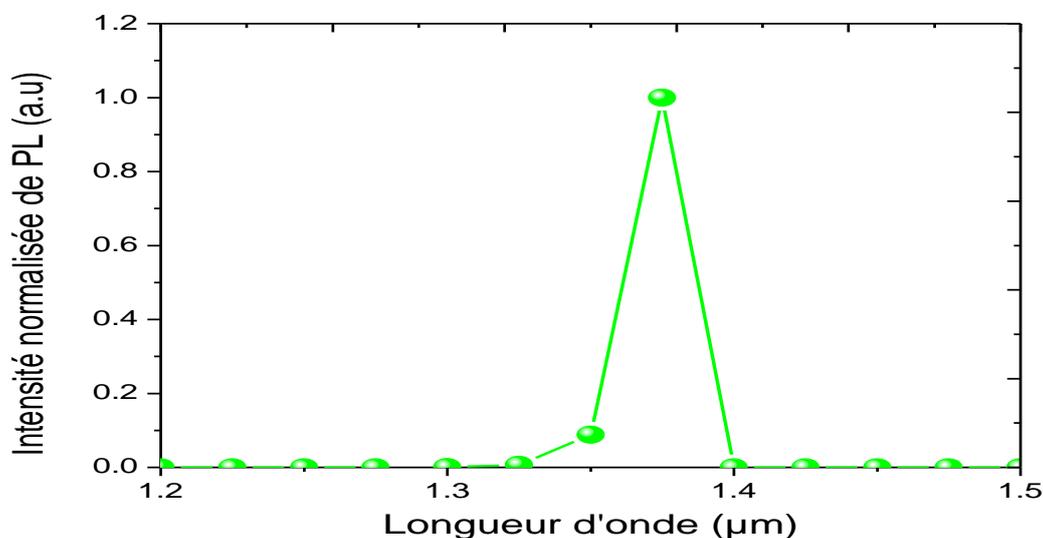


Figure 3.11 : Spectre de PL calculé de la cellule solaire à BQs d'InSb/GaAs à une température de 77 K [71].

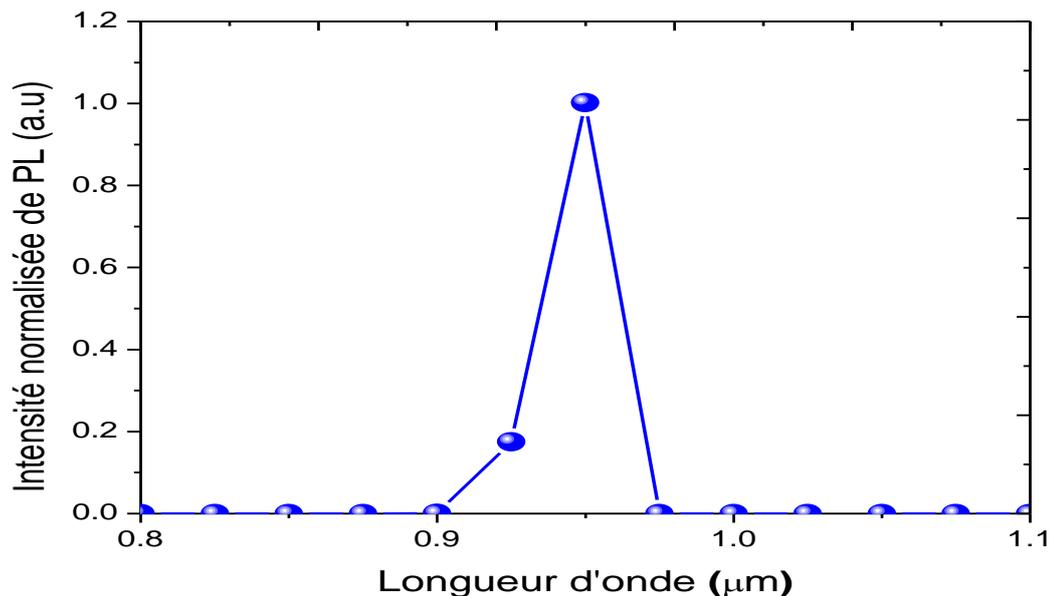


Figure 3.12 : Spectre de PL calculé de la cellule solaire p-i-n à une température de 77 K [71].

Figure (3.13) représente la caractéristique J-V de la cellule solaire à BQs pour un nombre variable de couches de BQs insérées: 0, 10, 20 et 30, respectivement. Le tableau (3.3) résume tous les paramètres caractéristiques de la cellule solaire avec et sans BQs : la densité du courant de court-circuit (J_{cc}), la tension de circuit ouvert (V_{co}), le facteur de forme (FF) et le rendement de conversion (η). On observe que l'augmentation du nombre de couches QD dans la région intrinsèque de la cellule solaire p-i-n à base de GaAs provoque une augmentation du courant de court-circuit et du rendement de conversion. Cela est dû à la génération de paires électron-trou additionnels par l'absorption de photons de faibles énergies. La tension de circuit ouvert retient approximativement la même valeur lorsque le nombre de couches QD insérées augmente. Une amélioration relative de 22.33% du courant de court-circuit et de 29.31% du rendement de conversion est obtenue lors de la comparaison d'une cellule solaire à 30 couches de BQs avec la cellule solaire p-i-n.

Tableau 3.3 : Paramètres caractéristiques de la cellule solaire sans et avec un nombre variable de couches de BQs d'InSb/GaAs.

BQs	J_{cc} (mA/cm ²)	V_{co} (V)	FF (%)	η (%)
0	18.76	0.87	76.66	12.52
10	20.42	0.8566	84.78	14.83
20	21.78	0.8561	82.59	15.4
30	22.95	0.8549	82.52	16.19

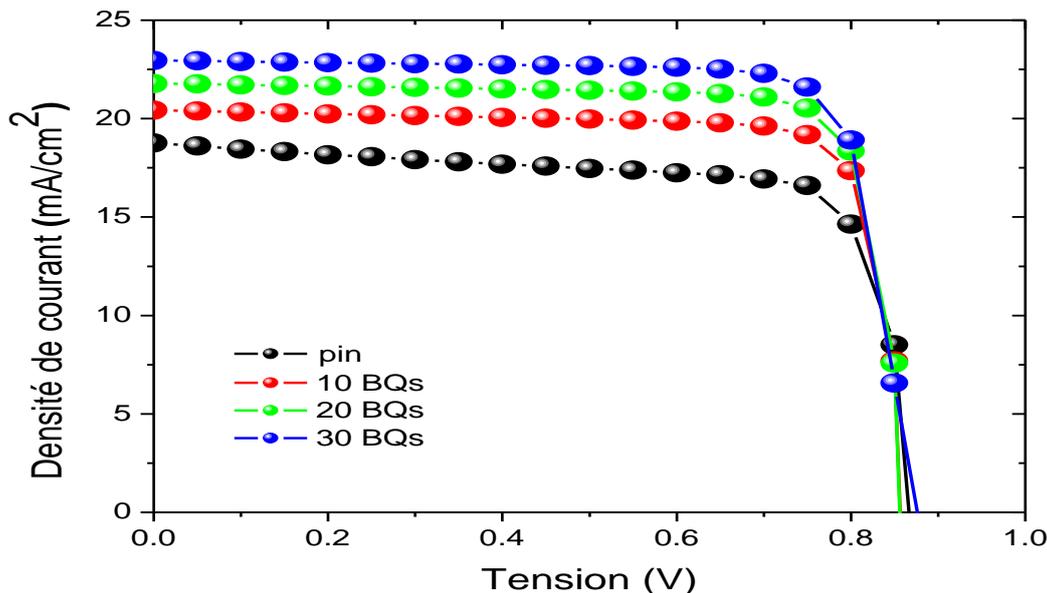


Figure 3.13 : Caractéristique J-V de la cellule solaire p-i-n et à BQs d'InSb/GaAs avec un nombre variable de couche de BQs insérés [71].

Figure (3.14) montre la comparaison entre la courbe d'EQE simulée à 30 couche de BQs et celle mesurée de la structure à BQs d'InAs/GaAs dans la gamme de longueurs d'onde 855 nm-1130 nm. On peut voir clairement que l'EQE mesuré prend des valeurs élevées que l'EQE de notre structure dans la bande de longueurs d'ondes 855 nm-935 nm. Au-delà de 935 nm, l'EQE mesuré diminue et notre EQE simulé domine. D'autre part, l'EQE mesurée tend à zéro autour de la longueur d'onde 1130 nm, tandis que l'EQE de la structure simulé présente des valeurs non négligées d'environ 10% à cette longueur d'onde. Par exemple, la différence d'EQE des deux structures à la longueur d'onde 1105 nm est de 7.87%. Cette étude nous a permis de constater que l'utilisation des BQs d'InSb est utile pour l'absorption et l'émission de fortes longueurs d'onde par rapport aux BQs d'InAs

Figure (3.15) montre la comparaison de J-V de notre structure simulée à 30 couche de BQs et celle mesurée de la structure à BQs d'InAs/GaAs. Il est noté que la densité de courant d'InAs/GaAs est plus grande que celle de notre structure simulée InSb/GaAs; Par exemple, la différence entre le courant de court-circuit entre les deux structures est $\Delta J_{cc}=2.05 \text{ mA/cm}^2$. Alors que la tension de circuit ouvert d'InAs/GaAs est 0.84 V par rapport à 0.85 V simulé. Cette diminution de la densité du courant de notre structure est due au désaccord de maille élevé présent dans InSb/GaAs d'environ 14.6% comparé à 7.16% pour la structure InAs/GaAs.

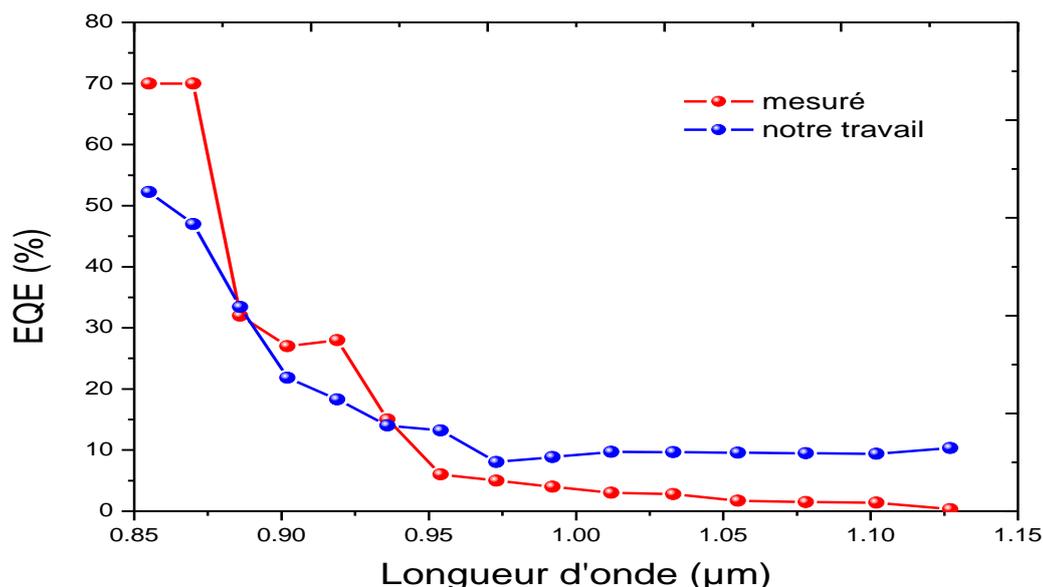


Figure 3.14 : Comparaison d'EQE de la cellule solaire à 30 couches de BQs d'InSb/GaAs simulé et d'InAs/GaAs mesuré à une température ambiante [71].

Le spectre PL montré à la figure (3.11) a également été comparé à un résultat expérimental pour la validation, comme le montre la figure (3.16). Une forte bande d'émission est notée à partir de l'expérience avec un pic d'émission à 1127 nm (énergie d'émission de 1.1 eV). Le spectre PL simulé présente une bande d'émission étroite avec pic à 1375 nm (énergie d'émission de 0.90 eV). Nous avons également remarqué qu'il y a un décalage de la longueur d'onde d'émission d'environ 248 nm entre le spectre PL simulé et l'expérimental. Cet effet peut être lié aux conditions de travail différentes utilisées dans la simulation et l'expérimentation. Le spectre PL expérimental a été mesuré à basse température d'environ 1.6 K par rapport à 77 K pour notre simulation; et il est bien connu que l'augmentation de la température entraîne la diminution de l'énergie du gap, ce qui déplace plus la longueur d'onde d'émission dans l'infrarouge comme indiqué dans [77]. Une autre raison est liée à la densité de puissance d'excitation. La puissance d'excitation utilisée dans l'expérience était 28 mW/cm^2 par rapport à 10 mW/cm^2 utilisé pour notre simulation. Comme il est rapporté par GLASER et al, le pic d'émission se déplace vers les énergies inférieures, puis vers des longueurs d'onde plus fortes lorsque la densité de puissance d'excitation diminue [76].

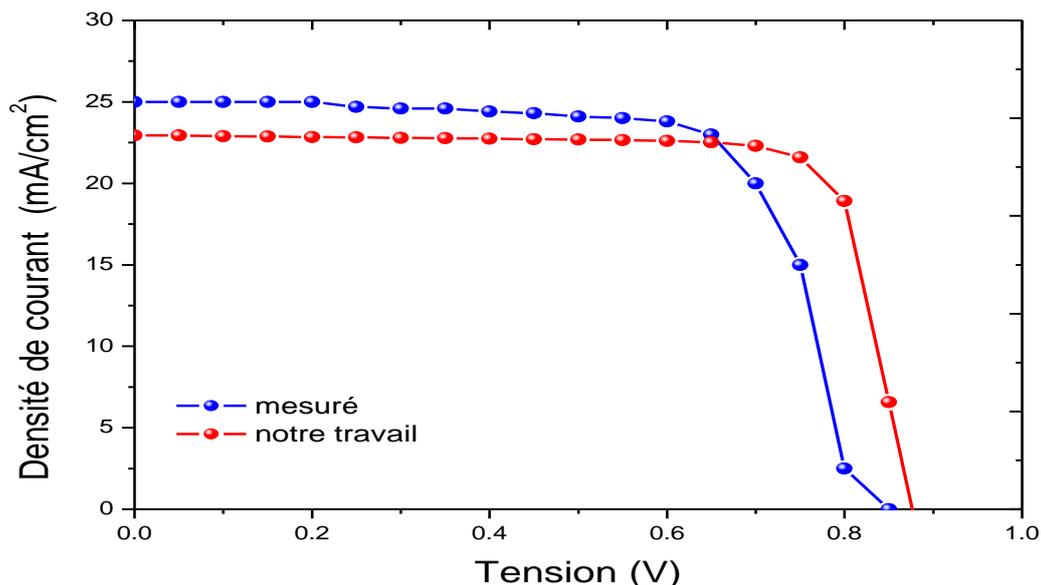


Figure 3.15 : Comparaison de J-V de la cellule solaire à 30 couches de BQs d'InSb/GaAs simulé et d'InAs/GaAs mesuré à une température ambiante [71].

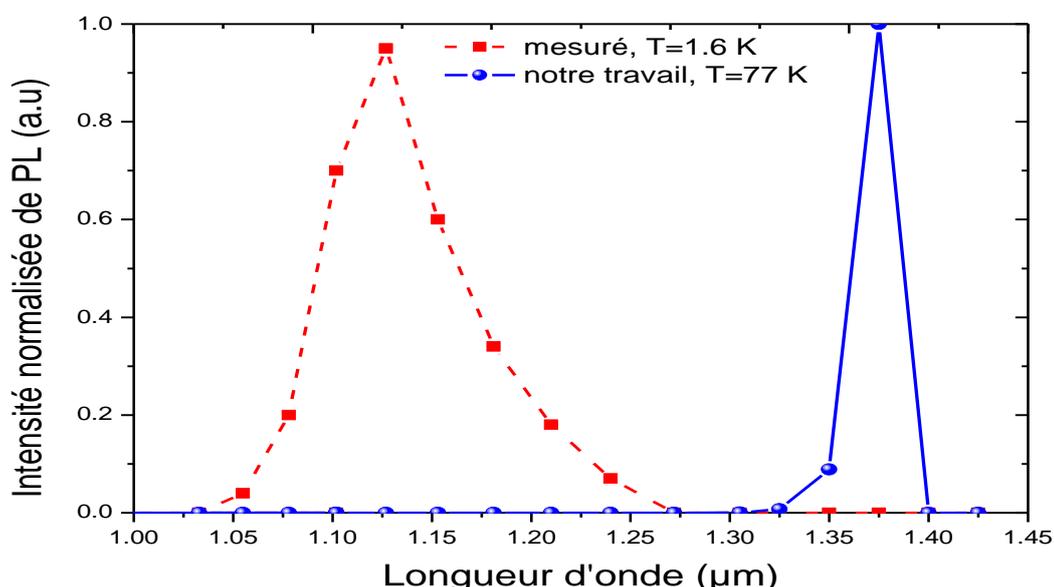


Figure 3.16 : Comparaison de PL de la cellule solaire à 30 couches de BQs d'InSb/GaAs simulée et celle mesurée à deux température différentes [71].

L'une des approches utilisées pour améliorer l'absorption de la lumière dans les cellules solaires à BQs est le changement de l'épaisseur du BQs. Dans cette section, nous discutons l'influence de la variation d'épaisseur du BQs sur les caractéristiques électriques et optiques de la structure. Les simulations ont été effectuées en utilisant 10 couches d'InSb /GaAs, pour

différentes épaisseurs: $L_w = 5, 10, 15$ et 20 nm. Les spectres d'EQE et PL sont calculés à une température de 77 K.

Figure (3.17) montre le spectre d'EQE de 10 couches de BQs d'InSb/GaAs avec une épaisseur variable de BQs de 5 à 20 nm. Il est clair que la cellule solaire avec des BQs épais, présente une grande amélioration dans la gamme de longueurs d'ondes fortes 900 nm- 1400 nm. Dans cette gamme, EQE atteint un gain $\Delta EQE = 14\%$ lorsque l'épaisseur augmente de 5 à 20 nm. Ainsi, plus la boîte quantique est grosse, plus le nombre d'états propres est élevé et la différence entre les niveaux énergétiques des électrons (trous) diminue, ce qui facilite l'absorption et la capture des photons par les BQs [78].

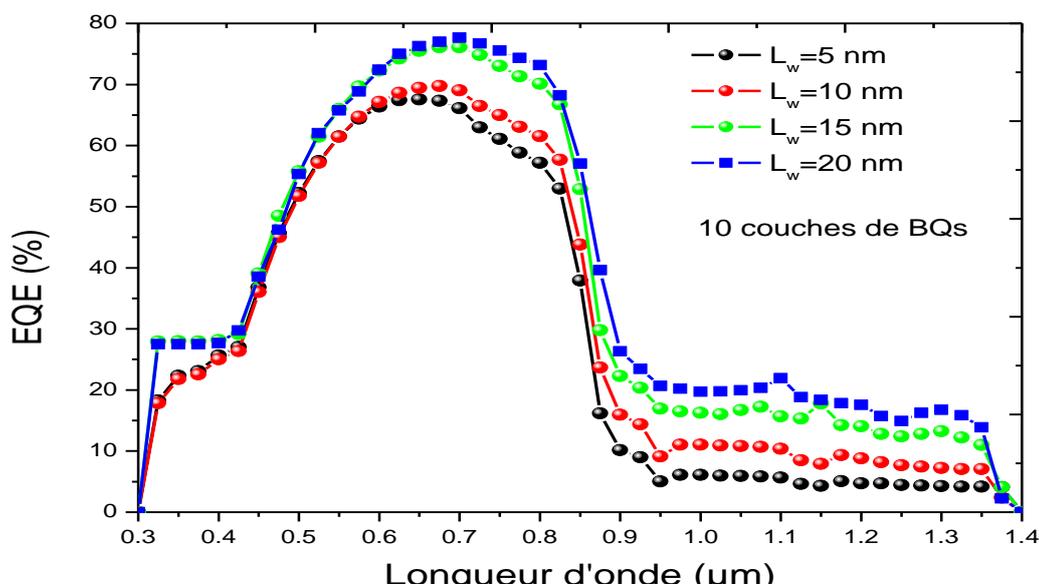


Figure 3.17 : EQE de la cellule solaire à 10 couches de BQs d'InSb/GaAs pour différentes épaisseurs de BQs [71].

Figure (3.18) indique les spectres PL pour différentes valeurs de l'épaisseur des boîtes quantiques ($L_w = 5, 10, 15$ et 20 nm). Comme on peut remarquer, la structure possède la même longueur d'onde d'émission 1375 nm (énergie d'émission de 0.90 eV) pour ces valeurs de l'épaisseur. Il y a également une augmentation notable de l'intensité d'émission PL avec l'augmentation de l'épaisseur des BQs. L'explication possible de ce phénomène est que la BQ la plus grosse induit l'approfondissement des niveaux énergétiques. Par conséquent, il y a moins de probabilité que les excitons s'échappent de ces niveaux; ce qui augmente la recombinaison dans le matériau BQ.

Figure (3.19) représente la caractéristique J-V de la cellule solaire à 10 couches de BQs d'InSb/GaAs avec une épaisseur de la boîte variant de 5 à 20 nm. Les paramètres

caractéristiques déduits sont résumés dans le tableau (3.4). On peut noter que le courant de court circuit augmente quand on passe de 5 à 20 nm. Pour une épaisseur de BQs de 20 nm, la cellule solaire fournit un courant de court-circuit de 26.07 mA/cm^2 . De même, lorsque qu'on augmente l'épaisseur de BQs de 5 à 20 nm, le rendement de conversion augmente de 14.83% à 18.31%. Cette valeur élevée du rendement révèle que la structure avec une épaisseur de 20 nm produit beaucoup de paires électron-trou. Cela pourrait s'expliquer par la diminution de l'écart énergétique entre les niveaux discrets (ΔE_i^e et ΔE_i^h) dans la bande de conduction et la bande de valence. Plus la boîte quantique est grosse, plus le confinement est faible et donc plus les niveaux d'énergie discrets sont rapprochés ce qui améliore la capture et l'extraction des excitons de la BQ [79].

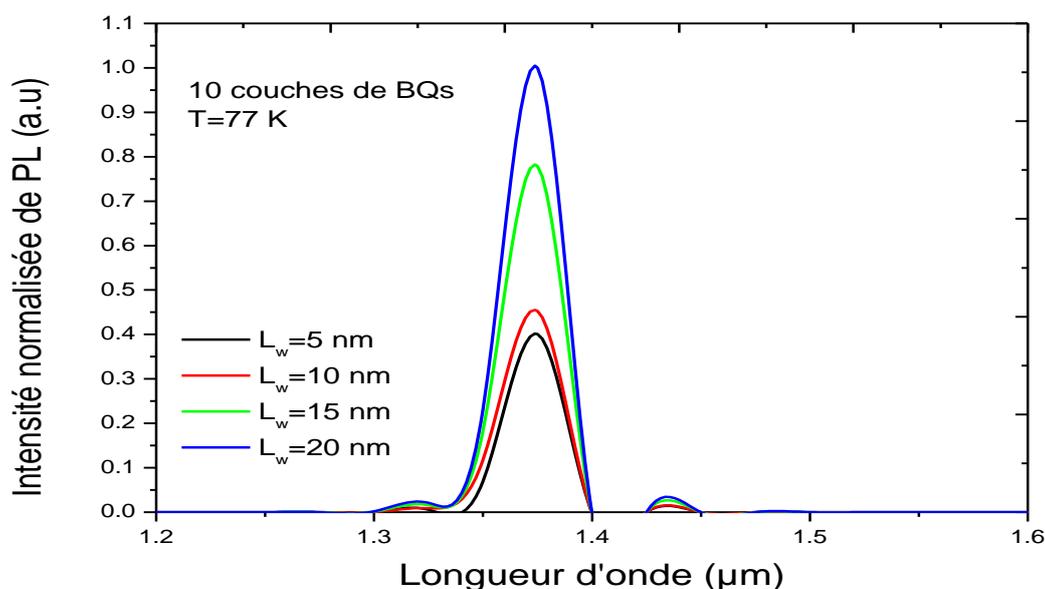


Figure 3.18 : Spectre de PL de la cellule solaire à 10 couches de BQs d'InSb/GaAs à 77 K pour différentes épaisseurs de BQs [71].

Tableau 3.4 : Paramètres caractéristiques de la cellule solaire à 10 couches de BQs d'InSb/GaAs pour différentes épaisseurs de BQs.

Epaisseur de la BQ ; L_w (nm)	J_{cc} (mA/cm^2)	V_{co} (V)	FF (%)	η (%)
5	20.42	0.8566	84.78	14.83
10	22.33	0.8575	82.72	15.84
15	24.70	0.8587	81.23	17.23
20	26.07	0.859	81.76	18.31

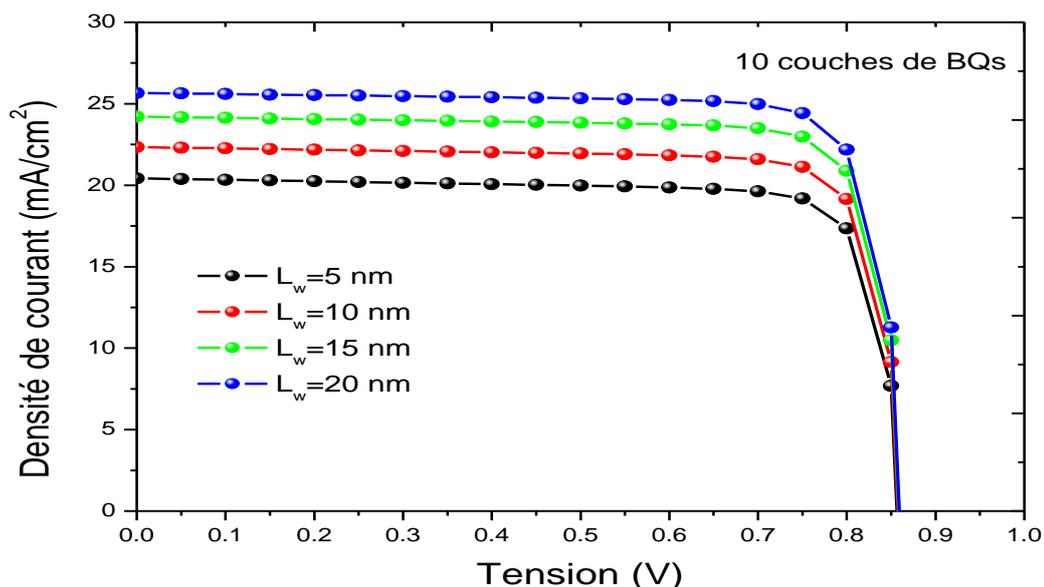


Figure 3.19 : Caractéristique J-V de la cellule solaire à 10 couches de BQs d'InSb/GaAs pour différentes épaisseurs de BQs [71].

3.3.3. Cellule solaire à BQs InAsP/GaAs :

Dans cette section de l'étude, nous avons fait une modélisation et simulation d'une structure à base d'un nouveau matériau ternaire BQ qui est $\text{InAs}_x\text{P}_{1-x}$. Ces BQs sont insérés dans la région intrinsèque d'une cellule solaire p-i-n à base de GaAs. InAsP a gagné une importance significative dans le domaine de l'optoélectronique dans les dernières années grâce à ses propriétés physiques unique. L'addition d'une assez quantité de l'arsenic As dans InP (35%-60%) rend InAsP un matériau favorable pour la fabrication des BQs et PQs. Tout d'abord nous avons analysé l'effet de la variation de la fraction molaire de l'arsenic sur la courbe de l'énergie du gap et la contrainte dans le but de trouver la fraction molaire optimale qui donne une contrainte et énergie de gap raisonnable. Par la suite nous avons étudié l'effet de la variation du nombre de couches de BQ sur les caractéristiques: densité du courant-tension J-V et la densité du puissance-tension P-V, ainsi l'EQE.

La figure (3.20) représente la structure de la cellule solaire à cinq couches de BQs d'InAsP/GaAs qui sont crûs sur un substrat de GaAs. Les BQs d'InAsP en jaune sont insérés dans la région intrinsèque et ils sont caractérisés par une hauteur de 5 nm et un largeur de 10 nm.

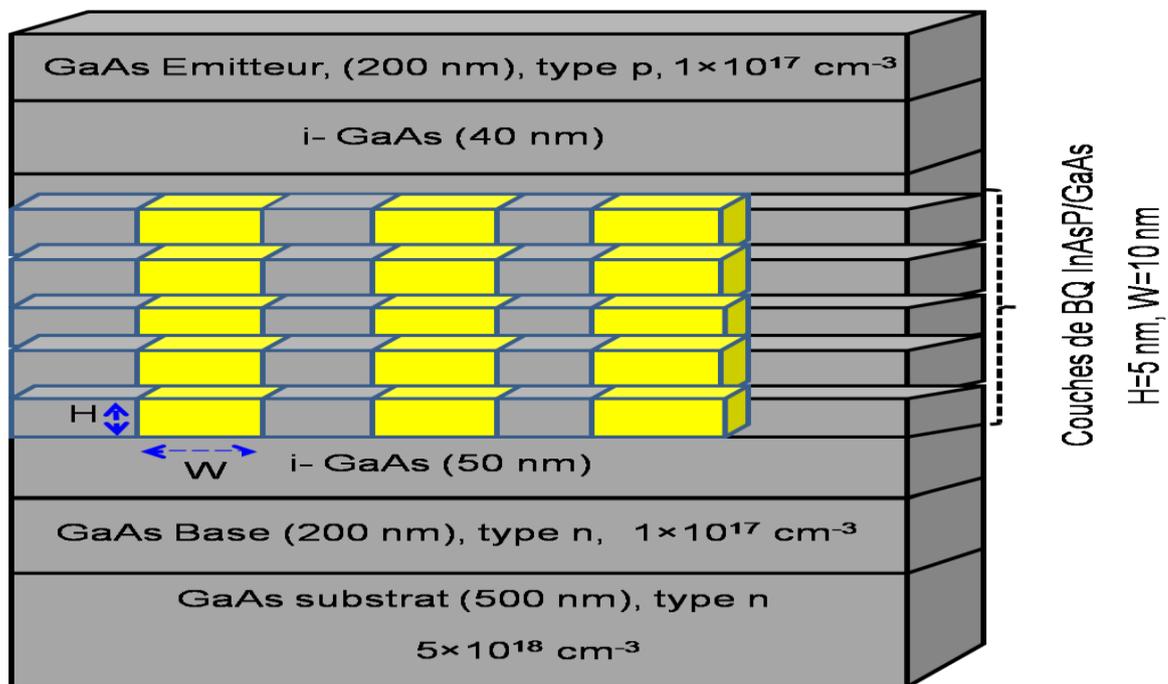


Figure 3.20 : Structure d'InAsP/GaAs avec cinq couches de BQs insérés dans la région intrinsèque [80].

3.3.3.1. Résultats et discussion :

Toutes les simulations ont été effectuées à une température de 300 K et sous un spectre solaire AM1.5G. En premier temps, nous avons examiné l'effet de la variation de la fraction molaire d'arsenic x sur les courbes d'énergie du gap E_g et la contrainte ε . Par la suite, nous avons étudiés l'influence du nombre de couches de BQs InAsP/GaAs avec la fraction molaire optimale trouvée sur les caractéristiques électriques de la cellule solaire. Les paramètres des matériaux utilisés dans cette partie de l'étude sont extraits de [76][81][82].

La figure (3.21) illustre l'évolution de l'énergie du gap et la contrainte de la structure à BQs en fonction de la fraction molaire de l'arsenic. L'énergie du gap est comparée avec autres énergies de bande interdite mesurés pour la validation. Il est clair que l'énergie du gap diminue avec l'augmentation de x , et les résultats mesurés sont en accord avec nos calculs. De l'autre part, on voit que la contrainte augmente avec l'augmentation de x . Par conséquent, un bon compromis entre l'énergie du gap et la contrainte doit être atteint pour une bonne performance de la structure à BQs comme on a vu dans le chapitre (2). Pour cela on a pris $x=0.35$ qui correspond à une contrainte de 5% et une énergie du gap de 0.98 eV.

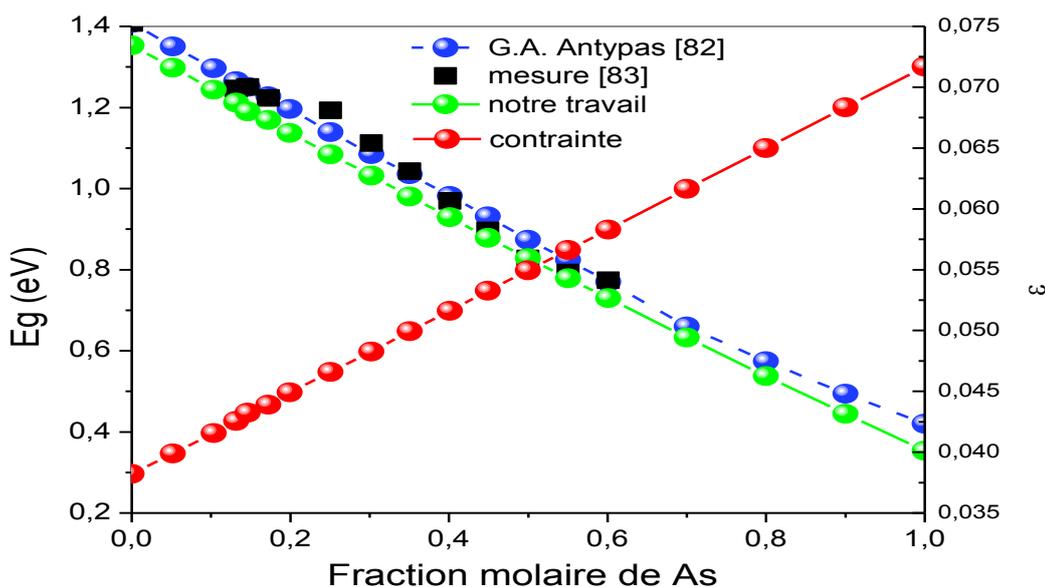


Figure 3.21 : Evolution de l'énergie du gap et la contrainte de la structure $\text{InAs}_x\text{P}_{1-x}/\text{GaAs}$ en fonction de la fraction molaire x [80].

La figure (3.22) représente l'EQE en fonction de la longueur d'onde d'une cellule solaire avec et sans BQs $\text{InAs}_{0.35}\text{P}_{0.65}/\text{GaAs}$ pour un différent nombre de couches de BQs insérées: 5, 10, 15 et 20, respectivement. Il est clair que l'EQE d'une cellule solaire p-i-n tend vers zéro à partir la longueur d'onde 875 nm. L'EQE de la cellule solaire à BQs avec 5 couches, 10 couches, 15 couches et 20 couches dans la gamme de longueurs d'onde 875 nm-1200 nm varie de 4% à 12% environ, ce qui signifie que les photons dans cette plage de longueurs d'onde sont effectivement absorbés et ne sont pas perdus, et ils contribuent ainsi à la création de paires électron-trou. En outre, il peut y avoir une autre optimisation dans la gamme de longueurs d'onde de 550 nm à 875 nm. Nous pouvons expliquer ce résultat par l'élargissement de l'épaisseur de la région intrinsèque de la cellule solaire p-i-n en raison du nombre croissant de couches de BQs.

La figure (3.23) et (3.24) expriment les caractéristiques J-V et P-V de la cellule solaire sans et avec 5, 10, 15 et 20 couches de BQs d' $\text{InAs}_{0.35}\text{P}_{0.65}/\text{GaAs}$ intégrées, respectivement. Il est clair que le courant de court-circuit augmente avec le nombre de couches de BQs intégrées dans la région intrinsèque grâce aux paires électron-trou supplémentaires photogénérés. La tension de circuit ouvert conserve la même valeur 0.857 V, car elle dépend uniquement du matériau hôte GaAs. Par conséquent, le rendement de la conversion augmente avec le nombre de couches de BQs jusqu'à 20 couches. C'est le nombre de couches pour lequel la structure

devient saturée. Tous les paramètres électriques obtenus sont montrés dans le tableau (3.5). Une augmentation relative d'environ 32.58% du rendement de conversion est obtenue lors de la comparaison d'une cellule solaire à 20 couches de BQs avec une cellule solaire p-i-n.

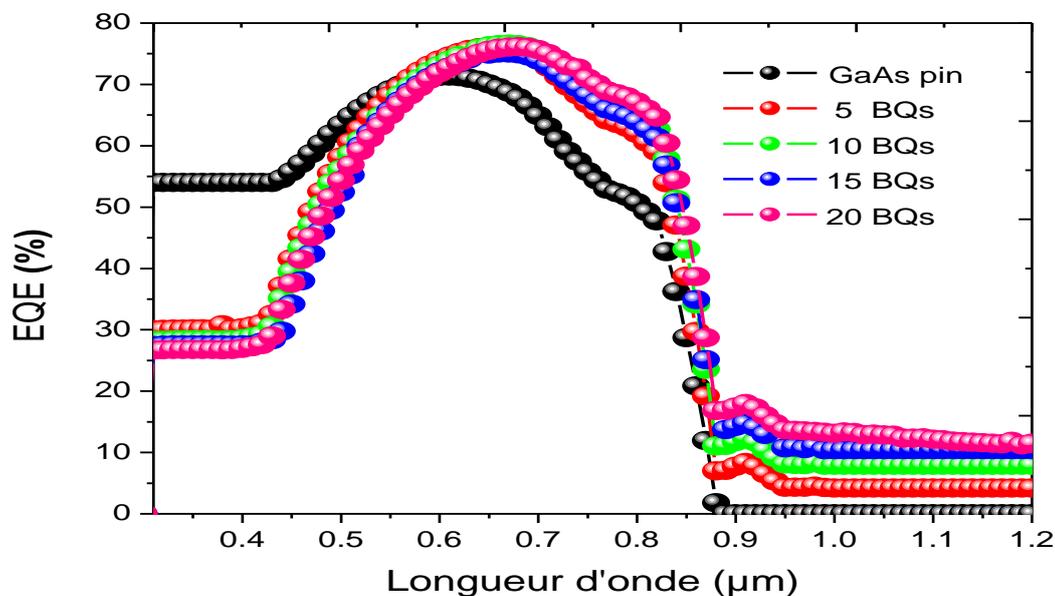


Figure 3.22 : EQE de la cellule solaire p-i-n et à BQ d' $\text{InAs}_{0.35}\text{P}_{0.65}/\text{GaAs}$ pour un nombre variable de couches de BQs [80].

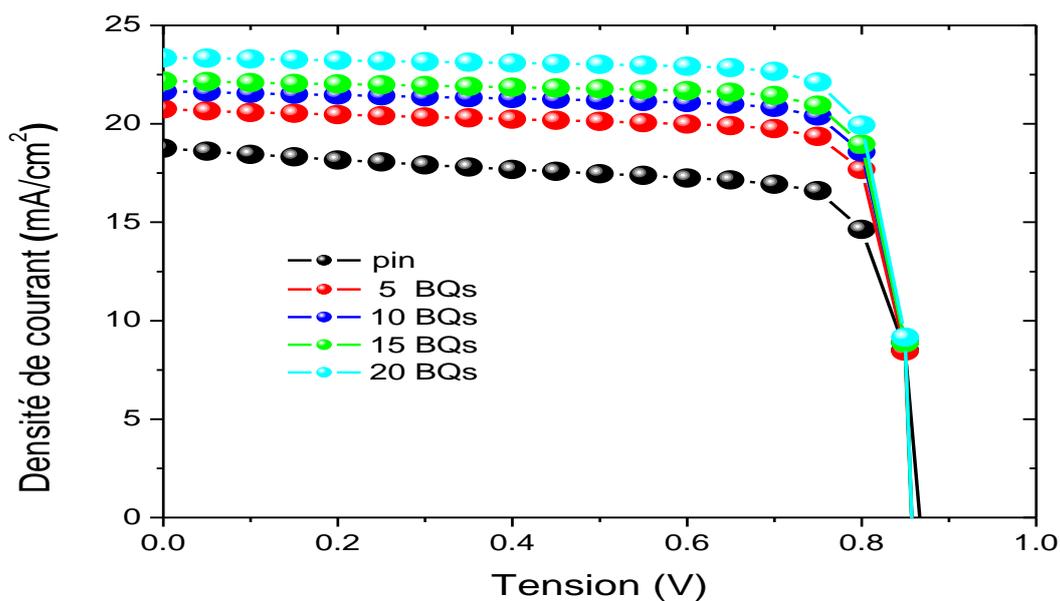


Figure 3.23 : Caractéristique J-V de la cellule solaire p-i-n et à BQ d' $\text{InAs}_{0.35}\text{P}_{0.65}/\text{GaAs}$ pour un nombre variable de couches de BQs [80].

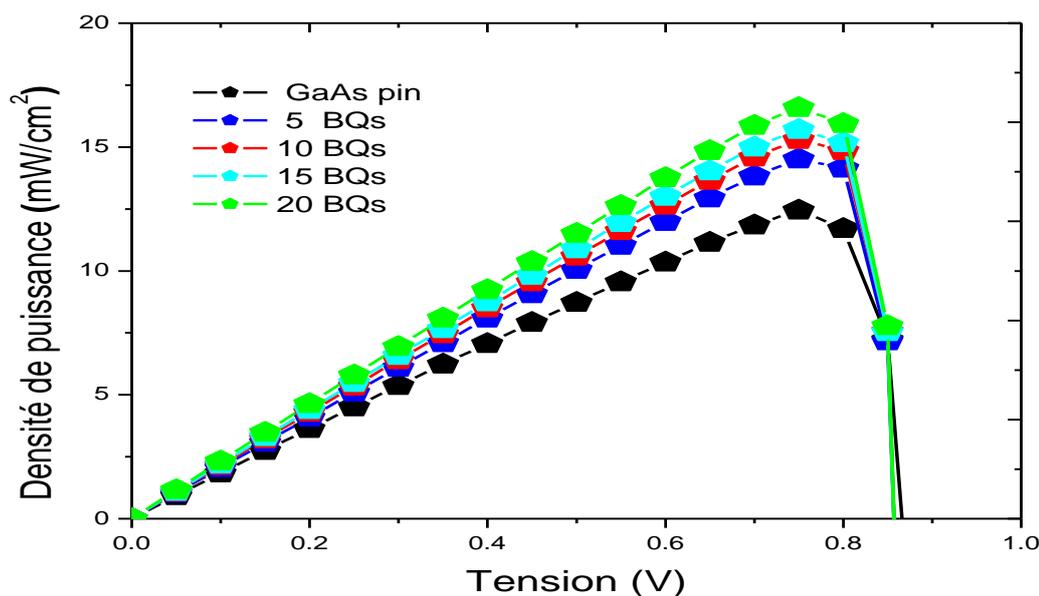


Figure 3.24 : Caractéristique P-V de la cellule solaire p-i-n et à BQ d' $\text{InAs}_{0.35}\text{P}_{0.65}/\text{GaAs}$ pour un nombre variable de couches de BQs [80].

Tableau 3.5 : Paramètres caractéristiques de la cellule solaire sans et avec un nombre variable de couches de BQs d' $\text{InAs}_{0.35}\text{P}_{0.65}/\text{GaAs}$.

Nombre de couches	J_{cc} (mA/cm ²)	V_{co} (V)	FF (%)	η (%)
0	19.35	0.87	74.37	12.52
5	20.75	0.857	81.7	14.52
10	21.68	0.857	82.3	15.3
15	22.17	0.857	82.7	15.71
20	23.35	0.89	83	16.6

3.3.4. Cellule solaire à BQs InAsP/Si :

Nous avons pris la même structure à BQs d' InAsP de la section 3.3.3, mais cette fois nous avons remplacé le matériau barrière GaAs par Si afin de réduire le prix des cellules solaires. Toutefois, il est rapporté que l'intégration des semiconducteurs III-V est un défi technologique [85] à cause de la contrainte importante présente dans ces configurations et de large différence entre les coefficients d'expansion ce qui provoque les dislocations [86]. Pour cela, nous avons étudié l'effet d'intégration des BQs d' InAsP dans une matrice de Si et voir leur influence sur les propriétés électriques comme la caractéristique J-V et l'EQE.

La structure de la cellule solaire étudiée est montrée dans la figure (3.25). Dix couches d' $\text{InAs}_x\text{P}_{1-x}/\text{GaAs}$ sont insérées dans la région intrinsèque d'une cellule solaire p-i-n à base de Si. Deux couches vertes de Si en haut et en bas représentent l'émetteur de type p et la base de type n avec des concentrations de dopages de $1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ et $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, respectivement. Une autre couche verte dans le milieu contient les BQs InAsP en couleur rouge est la couche intrinsèque.

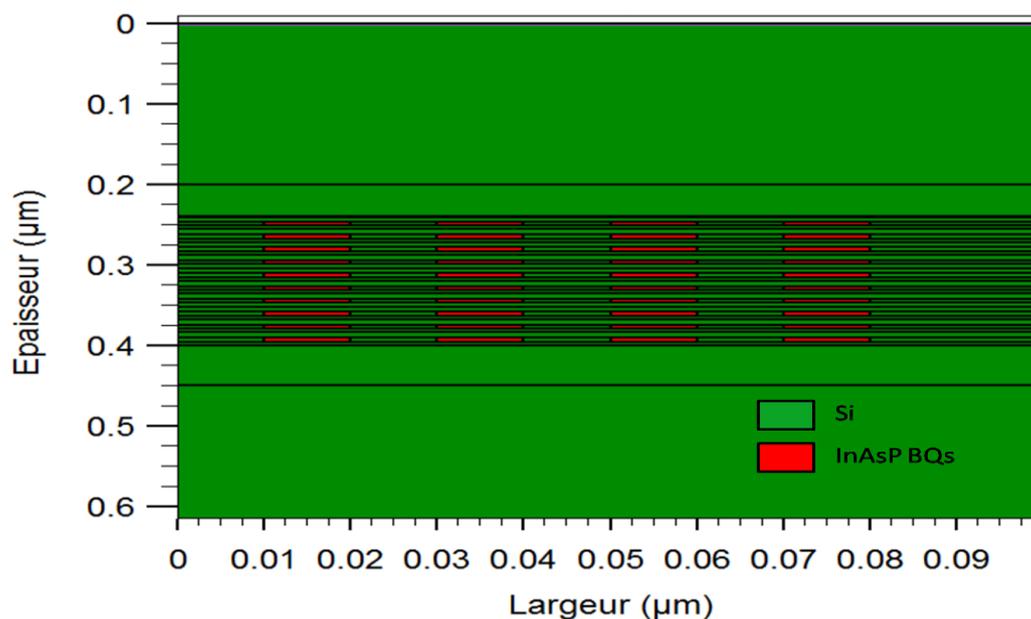


Figure 3.25 : Structure de la cellule solaire à 10 couches de BQ d' InAsP/Si [87].

3.3.4.1. Résultats et discussion :

Toutes les simulations ont été effectuées à une température de 300 K et sous un spectre solaire AM1.5G. En premier temps, nous avons examiné l'effet de la variation de la fraction molaire d'arsenic x sur les courbes de l'énergie du gap E_g , la contrainte ε , la caractéristique J-V, et l'EQE. Par la suite nous avons étudiés l'influence du nombre de couches de BQs d' InAsP/Si avec la fraction molaire optimale trouvé sur les caractéristiques électriques de la cellule solaire. Les paramètres des matériaux utilisés dans cette partie de l'étude est extrait de [76][81][82].

La figure (3.26) montre l'évolution de l'énergie du gap et la contrainte dans le système $\text{InAs}_x\text{P}_{1-x}/\text{Si}$ en fonction de la fraction molaire de l'arsenic. Il est évident que la structure présente une contrainte relativement élevé comprise entre 8% et 11.5%, ceci est due à la nature cristalline différente de deux matériaux et aussi au désaccord de maille. D'autre part, on observe que l'augmentation de la fraction molaire d'arsenic entraîne l'augmentation de la

contrainte. L'énergie du gap est comparée avec certaines énergie du gap mesurés par des autres pour la validation. Il est clair que l'énergie du gap diminue quand on augmente x , et les résultats mesurés sont en accord avec nos calculs. Une faible énergie de gap veut dire un grand nombre de niveaux d'énergie et donc un confinement fort des porteurs dans le puits de potentiel de la BQ. En basant sur ces analyses, on suggère que la valeur optimale de x est située entre 0.6 et 0.8.

La figure (3.27) représente la courbe d'EQE dans la gamme 460 nm-660 nm de 20 couches d' $\text{InAs}_x\text{P}_{1-x}/\text{Si}$ pour une fraction molaire d'arsenic x variable. On voit que malgré la contrainte élevée présenté dans cette structure, le maximum d'EQE à la longueur d'onde 540 nm augmente par un facteur de 0.47 % quand x augmente de 0.2 jusqu'à 0.9. Malgré la faible augmentation d'EQE avec le taux d'arsenic, cette dernière est susceptible d'améliorer le rendement de conversion d'une cellule solaire avec quelques fractions en pourcentage. Toutefois, il est rapporté qu'une faible amélioration du rendement est un plus dans le domaine de photovoltaïque.

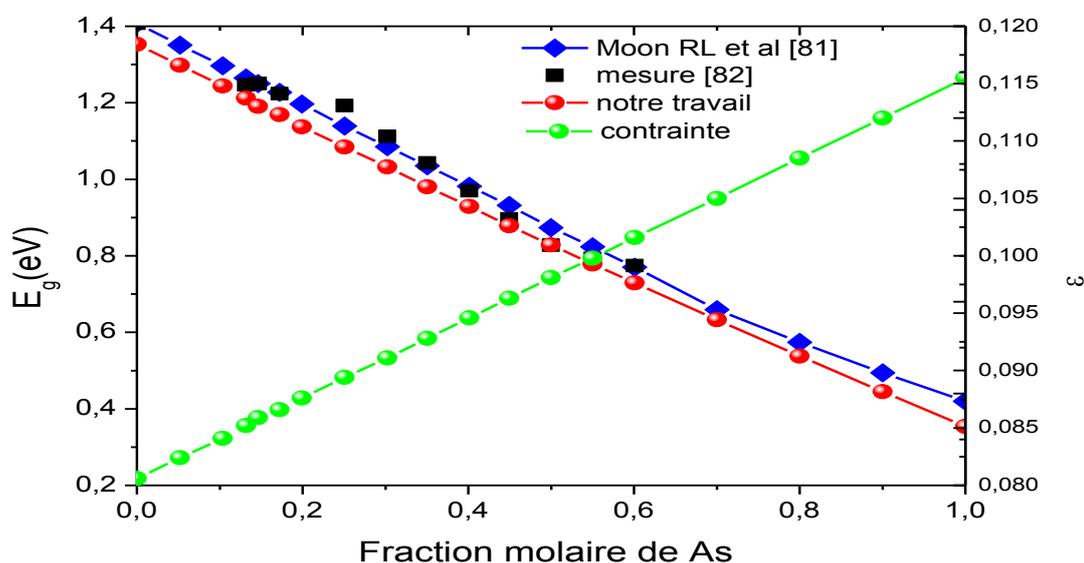


Figure 3.26 : Evolution de l'énergie du gap et la contrainte de la structure $\text{InAs}_x\text{P}_{1-x}/\text{Si}$ en fonction de la fraction molaire x [87].

La figure (3.28) montre la caractéristique J-V de 20 couches de BQs d' $\text{InAs}_x\text{P}_{1-x}/\text{Si}$ pour une fraction molaire variable. Les paramètres caractéristiques de la cellule solaire pour une x varie de 0.2 jusqu'à 0.9 sont rassemblés dans le tableau (3.6). Comme on peut le voir dans le tableau, la structure $\text{InAs}_x\text{P}_{1-x}/\text{Si}$ présente un courant de court-circuit de 33.50 mA/cm^2 et un

rendement de conversion élevé de 15.39 % pour $x=0.6$. En basant sur ces résultats on fixe x à 0.6 pour la suite de cette partie d'étude.

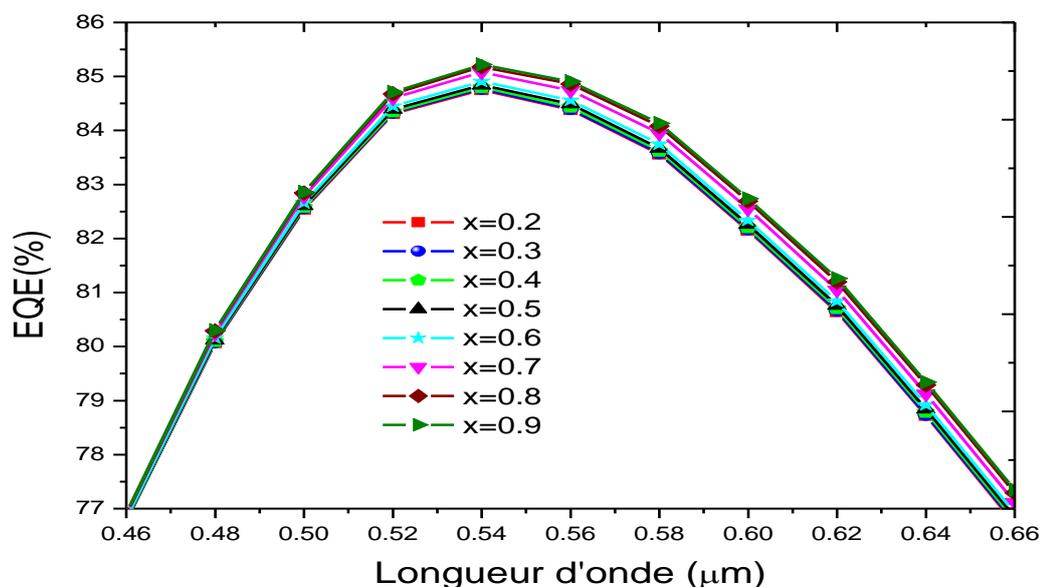


Figure 3.27 : Evolution de la courbe d'EQE de 20 couches de BQs $\text{InAs}_x\text{P}_{1-x}/\text{Si}$ en fonction de la fraction molaire x [87].

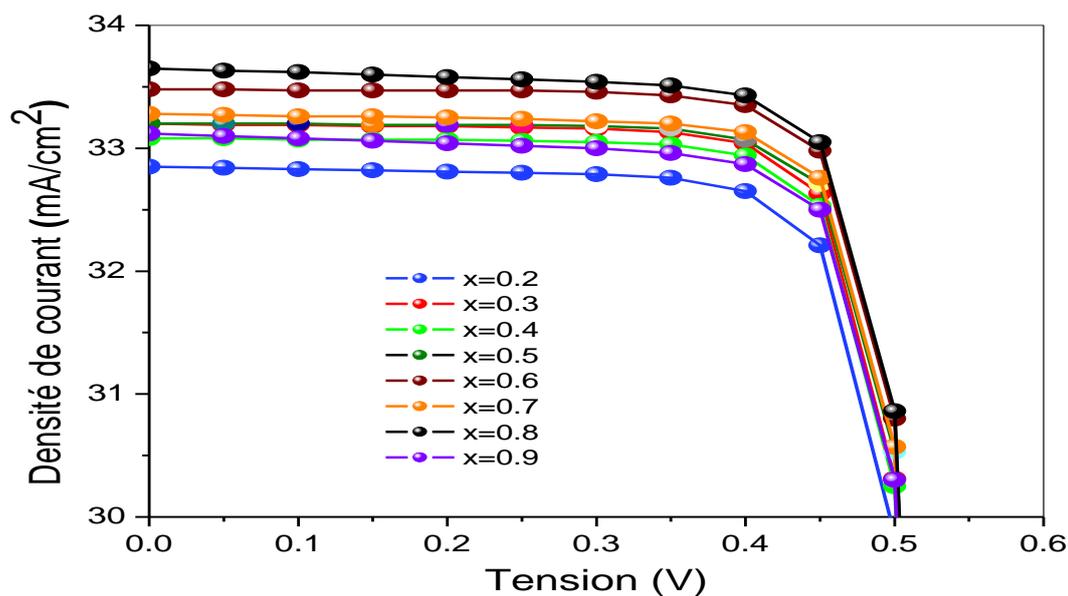


Figure 3.28 : Caractéristique J-V de 20 couches de BQs $\text{InAs}_x\text{P}_{1-x}/\text{Si}$ pour une fraction molaire x variable [87].

La figure (3.29) représente la courbe d'EQE en fonction de la longueur d'onde d'une cellule solaire avec et sans BQs d' $\text{InAs}_{0.6}\text{P}_{0.4}/\text{Si}$ pour un nombre variable de couches de BQ insérées: 10, 20 et 30, respectivement. Il était clair que l'EQE d'une cellule solaire p-i-n tend vers zéro à partir la longueur d'onde 1120 nm. On a également remarqué que la longueur

d'absorption prolonge de 1120 nm à 1200 nm par rapport à la cellule solaire p-i-n grâce à l'introduction des couches de BQs InAsP. Dans cette gamme de longueurs d'onde, l'EQE augmente de 3.41% quand le nombre de couches QD augmente de 10 à 30 ; Cela signifie que les photons dans cette gamme de longueurs d'ondes sont effectivement absorbés, et ils ont donc contribué à la création de paires électron-trou.

Tableau 3.6 : Paramètres électriques de la cellule solaire 20 couches de BQs InAs_xP_{1-x}/Si pour une fraction molaire x variable.

x	J_{cc} (mA/cm ²)	V_{co} (V)	FF (%)	η (%)	EQE à 540 nm
0.2	32.85	0.558	81.4	14.92	84.75
0.3	33.2	0.558	81.78	15.15	84.77
0.4	33.08	0.558	81.91	15.12	84.8
0.5	33.2	0.56	82.08	15.26	84.84
0.6	33.48	0.558	82.38	15.39	84.91
0.7	33.28	0.558	82.28	15.28	85.08
0.8	33.65	0.557	81.99	15.34	85.18
0.9	33.12	0.558	81.98	15.15	85.22

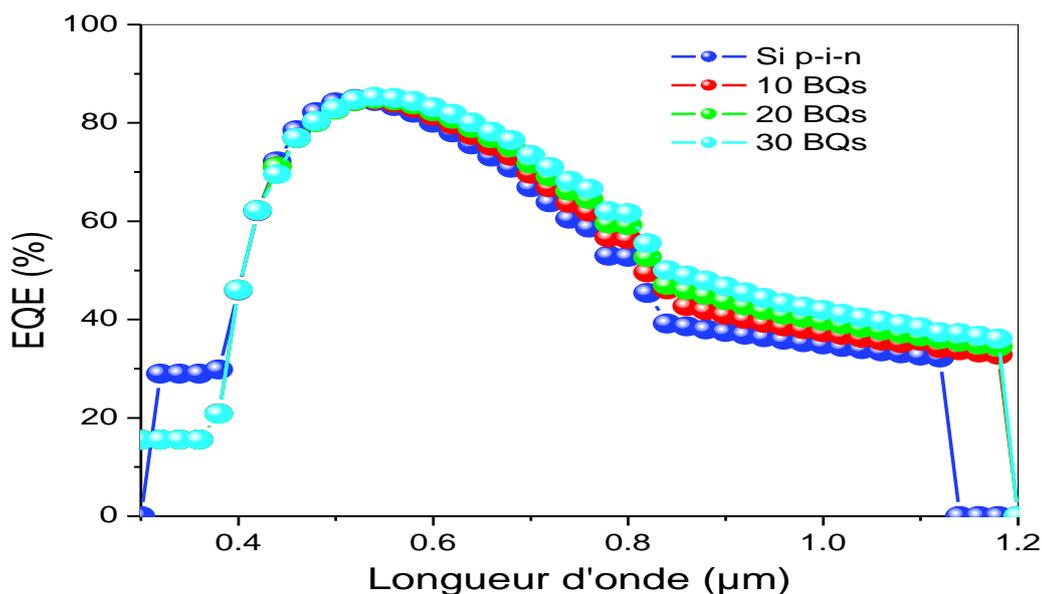


Figure 3.29 : EQE de la cellule solaire p-i-n et à BQs d'InAs_{0,6}P_{0,4}/Si pour un nombre variable de couches de BQs [87].

La figure (3.30) indique la courbe calculée du coefficient d'absorption de la cellule solaire sans et avec 30 couches de BQs en fonction de la longueur d'onde. Il est évident que la cellule solaire avec 30 couches de BQs exploite une large partie du spectre solaire (300

nm-1200 nm). En plus, la cellule solaire à 30 couches de BQs prend des valeurs très supérieures qu'une cellule sans BQs le long de la gamme de longueurs d'onde. Par exemple à la longueur d'onde 600 nm où on trouve le maximum de l'irradiance solaire [76], le gain du coefficient d'absorption est $\Delta\alpha=3439 \text{ cm}^{-1}$.

La figure (3.31) et (3.32) montrent les caractéristiques J-V et P-V, respectivement de la cellule solaire avec et sans BQs d' $\text{InAs}_{0.6}\text{P}_{0.4}/\text{Si}$ pour un nombre variable de couches de BQ insérées: 10, 20 et 30, respectivement. Les paramètres électriques obtenus sont listés dans le tableau (3.7). Comme on peut le voir, le courant de court-circuit augmente lorsque le nombre de couches de BQs augmente. Ceci est dû aux paires électron-trou supplémentaires photogénérées. La tension de circuit ouvert diminue légèrement avec l'ajout de couches de BQs. Nous suggérons que cela est dû à la recombinaison causée par l'augmentation du nombre de couches de BQs et aussi à la qualité de matériau BQ utilisé [88]. D'autre part, la puissance maximale et le rendement de conversion augmentent lorsque plusieurs couches de BQs sont ajoutées jusqu'à 30 couches de BQs. C'est le nombre de couches de BQs maximale que la cellule solaire à BQs d' $\text{InAs}_{0.6}\text{P}_{0.4}/\text{Si}$ peut supporter. Une amélioration relative de 7% et 6.70% du courant de court-circuit et du rendement de conversion, respectivement, est obtenue lorsqu'on compare une cellule solaire à BQs d' $\text{InAs}_{0.6}\text{P}_{0.4}/\text{Si}$ avec une cellule solaire

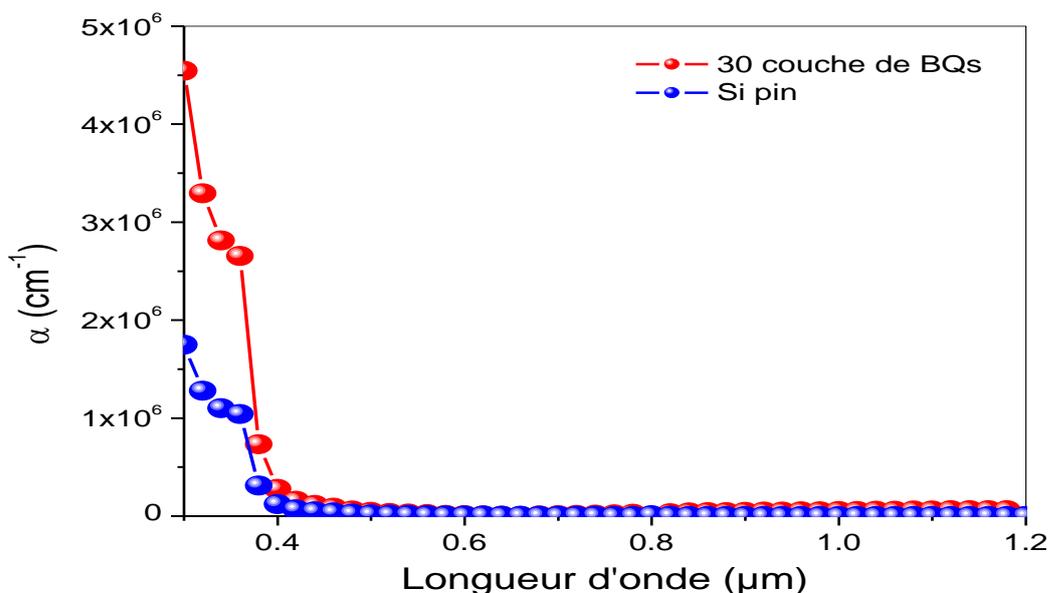


Figure 3.30 : Coefficient d'absorption de la cellule solaire p-i-n et à 30 couches de BQs d' $\text{InAs}_{0.6}\text{P}_{0.4}/\text{Si}$ [87].

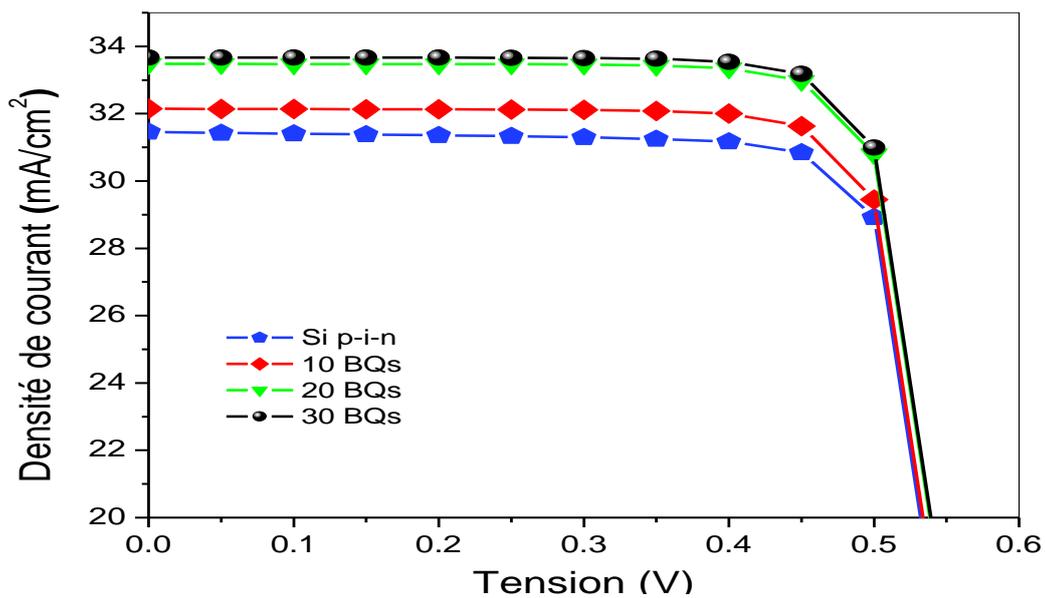


Figure 3.31 : Caractéristique J-V de la cellule solaire p-i-n et à BQs d' $\text{InAs}_{0.6}\text{P}_{0.4}/\text{Si}$ pour un nombre variable de couches de BQs [87].

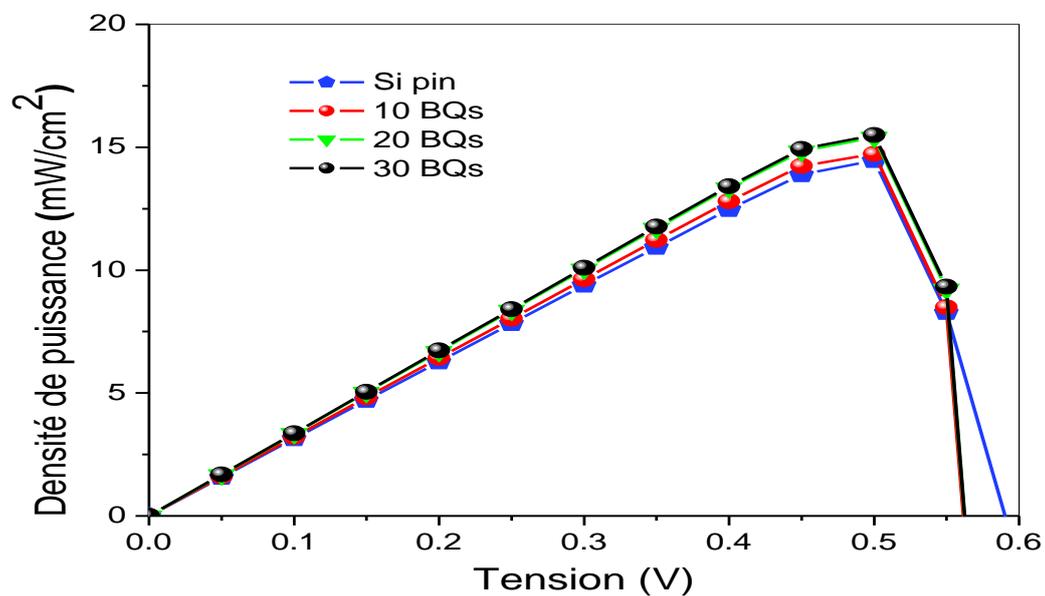


Figure 3.32 : Caractéristique P-V de la cellule solaire p-i-n et à BQs d' $\text{InAs}_{0.6}\text{P}_{0.4}/\text{Si}$ pour un nombre variable de couches de BQs [87].

Tableau 3.7 : Paramètres caractéristiques de la cellule solaire sans et avec un nombre variable de couches de BQs d'InAs_{0,6}P_{0,4}/Si.

Nombre de couches de BQs	J_{cc} (mA/cm ²)	V_{co} (V)	FF (%)	η (%)	EQE à 1120 nm
0	31.46	0.566	81.54	14.52	32.26
10	32.15	0.558	82.05	14.72	34.2
20	33.48	0.558	92.34	15.39	36
30	33.67	0.559	78.27	15.49	37.38

3.3.5. Cellule solaire à BQs InGaN/GaN :

Une nouvelle structure à BQs III-V croit sur un substrat différent que GaAs qui est GaN a été modélisé et simulé dans cette partie de travail. Le système matériel InGaN offre un potentiel important dans le développement de cellules solaires ultra-élevées pour les applications terrestres et spatiales. Grâce à l'énergie du gap élevé de GaN (3.42 eV) et faible d'InN (0.7 eV), respectivement, l'énergie du gap du système In_xGa_{1-x}N peut varier de 0.7 eV jusqu'à 3.42 eV et donc il peut couvrir le maximum du spectre solaire. En plus, InGaN présente un coefficient d'absorption élevé de 10⁵ cm⁻¹, une grande résistance aux rayonnements et polarisations. En particulier, le système In_xGa_{1-x}N présente d'excellentes propriétés dans les dispositifs semi-conducteurs à faibles dimensions. Cependant, ces alliages ont été fabriqués avec fraction molaire variable d'indium et les résultats sont encourageants [89]. Puisque le matériau In_xGa_{1-x}N manifeste ces supériorités mentionnées ci-dessus, la cellule solaire à BQs In_xGa_{1-x}N/GaN est étudiée théoriquement et expérimentalement dans le but de perfectionner leurs performances pour les applications spatiales. Plusieurs effets sont étudiés dans cette section du travail, comme par exemple le nombre de couches de BQs, la variation de la fraction molaire d'indium x , et les variations de la température.

La figure (3.33) montre le schéma de la cellule solaire à BQs étudiée avec trois couches de BQs d'In_{0,25}Ga_{0,75}N/GaN insérés dans la région intrinsèque et placés entre la couche de GaN de type P en haut avec une concentration de dopants de 2×10¹⁸ cm⁻³ et la couche de GaN de type N en bas avec une concentration de dopants de 1×10¹⁹ cm⁻³. Al_{0,1}Ga_{0,99}N est la couche de blocage des électrons (en anglais electron blocking layer EBL), elle fournit une hauteur de barrière de potentiel suffisante pour confiner les électrons dans la bande de conduction [90]. La figure (3.34) représente le diagramme de bandes d'énergies de la structure à cinq couches de BQs d'In_{0,25}Ga_{0,75}N/GaN. On voit clairement sur cette figure la barrière de potentiel qui a fournit par EBL dans la BC, et il est évident que le type d'alignement de bandes est type I.

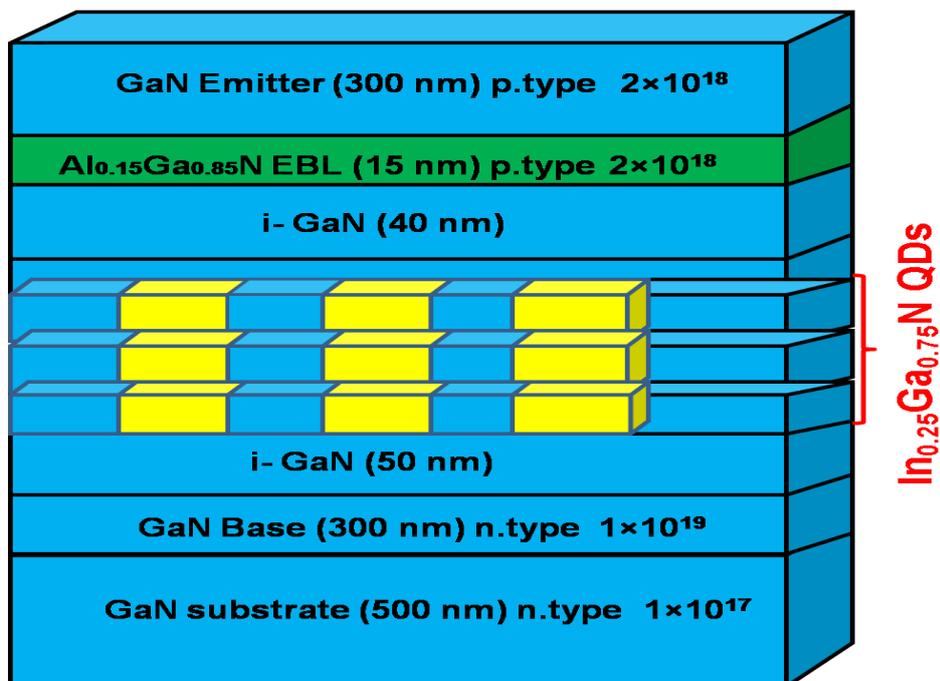


Figure 3.33 : Structure de la cellule solaire à 3 couches de BQs d' $\text{In}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}/\text{GaN}$ [91].

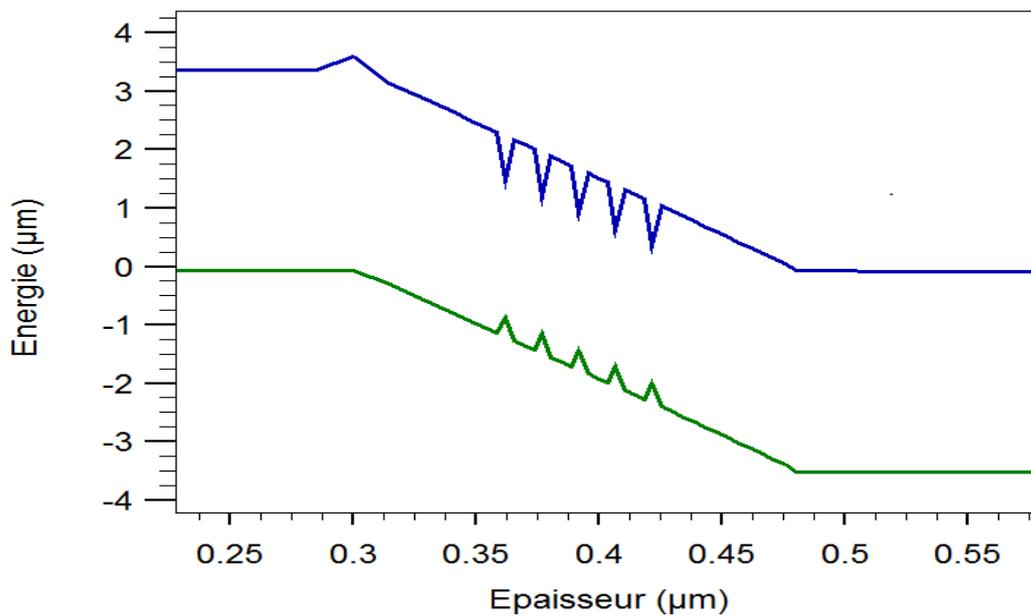


Figure 3.34 : Diagramme de bandes d'énergies de la cellule solaire à cinq couches de BQs d' $\text{In}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}/\text{GaN}$ [91].

3.3.5.1. Résultats et discussion :

Au cours de ce travail, nous avons choisit un spectre solaire AM1.5G pour la simulation. Nous avons commencé la simulation de la structure à BQs $\text{In}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}/\text{GaN}$ présentée dans la figure (3.33) avec un nombre variable de couches : 0, 5, 10 et 15. Ensuite, nous avons étudié la variation de la fraction molaire d'indium x et la température sur les performances de la cellule solaire. Pour chaque simulation, la caractéristique J-V et les paramètres importants de la cellule solaire sont présentés et discutés. Les paramètres des matériaux utilisés dans cette partie de l'étude est extrait de [76][82][92].

La figure (3.35) montre la caractéristique J-V de la cellule solaire à BQs $\text{In}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}/\text{GaN}$ pour un nombre de couches 0, 5, 10 et 15, respectivement. Il est clair que le courant de court-circuit augmente lorsque nous introduisons les couches de BQs dans la région intrinsèque de la cellule solaire p-i-n en raison des paires électron-trou supplémentaires photogénérés. Des chutes élevées sont observées dans la courbe J-V au-delà de 5 couches de BQs, à cause de l'accumulation de la contrainte produite par l'augmentation du plans de BQs et aussi à la qualité cristalline de la structure étudiée. La tension en circuit ouvert diminue avec l'ajout de BQs, ce qui est commun pour la plupart des cellules solaire à BQs [93][94]. En ce qui concerne le rendement de conversion, et selon le tableau (3.8), nous constatons une augmentation du rendement avec le nombre croissant de plans de BQs inférieur à 5 plans, au-delà de ce nombre, le rendement de conversion commence à diminuer. Il s'agit du nombre de plans de BQs pour lequel la recombinaison croissante générée par les pièges d'interfaces d' $\text{In}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}/\text{GaN}$ commence à dépasser l'absorption croissant dans les BQs. Une augmentation relative d'environ 54.77% du rendement de conversion est obtenue lorsqu'on compare une cellule solaire à 5 couches de BQs avec une cellule solaire p-i-n.

Tableau 3.8 : Paramètres caractéristiques de la cellule solaire sans et avec un nombre variable de couches de BQs d' $\text{In}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}/\text{GaN}$.

Nombre de couches de BQs	J_{cc} (mA/cm ²)	V_{co} (V)	FF (%)	η (%)
0	5.04	2.93	85.8	12.67
5	20.31	1.99	48.52	19.61
10	18.66	1.97	33.87	12.48
15	14.41	1.96	39	11.02

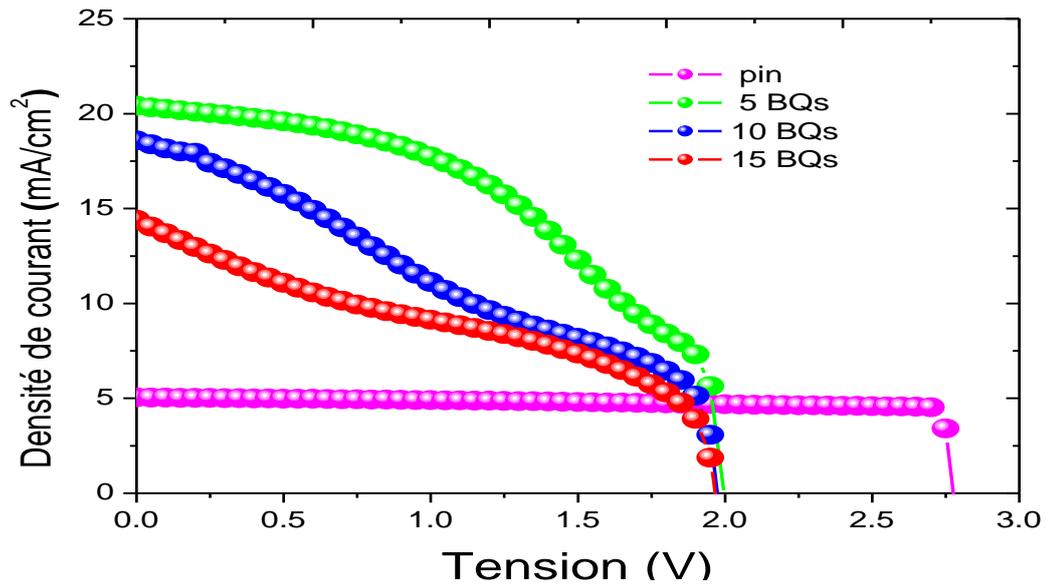


Figure 3.35 : Caractéristique J-V de la cellule solaire p-i-n et à BQs d' $\text{In}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}/\text{GaN}$ pour un nombre variable de couches de BQs [91].

Dans cette section, nous avons étudié la variation de la fraction molaire d'indium. Les simulations ont été effectuées en utilisant une cellule solaire à 5 couches de BQs avec diverses fractions molaires d'indium. Les résultats de l'effet de la fraction molaire x sur les paramètres importants de la cellule solaire sont présentés dans les figures (3.36) et (3.37), respectivement. La figure (3.36) représente à la fois la courbe de la variation du courant de court-circuit J_{cc} et le rendement de conversion η en fonction la fraction molaire d'indium x varie entre 10% et 50 %. Comme on peut voir, le courant de court-circuit augmente avec la fraction molaire x . La structure à BQs d' InGaN/GaN donne un courant de court-circuit optimal de 19.09 mA/cm^2 avec une optimisation relative de 73.59 %. L'augmentation de la fraction molaire x dans ces structures à BQs d' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ conduit à une accumulation de la contrainte et donc un taux de recombinaison élevé des porteurs de charges d'une part et d'autre part la diminution d'énergie du gap, ce qui facilite l'absorption des photons par les BQs. Cependant, il est clair qu'avec $x=10\%$ on obtient un rendement de conversion maximal de 18.1%, ça veut dire une amélioration relative de 42.85 %. Au-delà cette fraction molaire, le rendement commence à diminuer, on peut dire que c'est la fraction molaire pour laquelle l'absorption dans les BQs commence à surpasser la recombinaison provoqué par les pièges d'interfaces dans InGaN/GaN .

La figure (3.37) montre la variation de la tension de circuit ouvert en fonction la fraction molaire d'indium x . Il est évident que la tension de circuit ouvert chute avec l'augmentation de la fraction molaire x . Ceci est due à l'augmentation de la recombinaison qui est causé par la qualité des BQs [88][95].

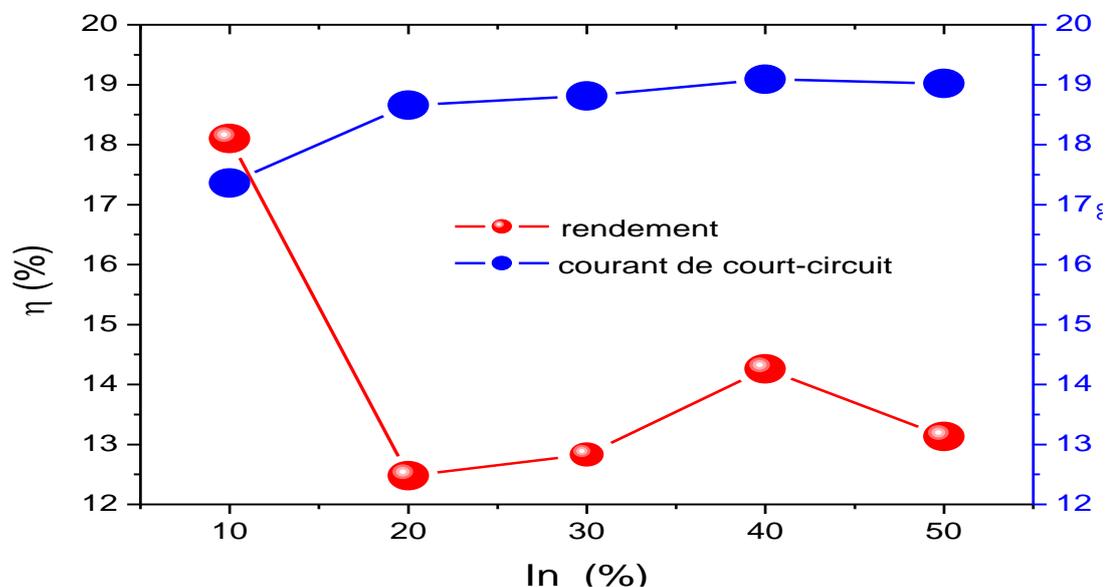


Figure 3.36 : Variation de courant de court-circuit et le rendement de conversion en fonction de la fraction molaire d'Indium x [91].

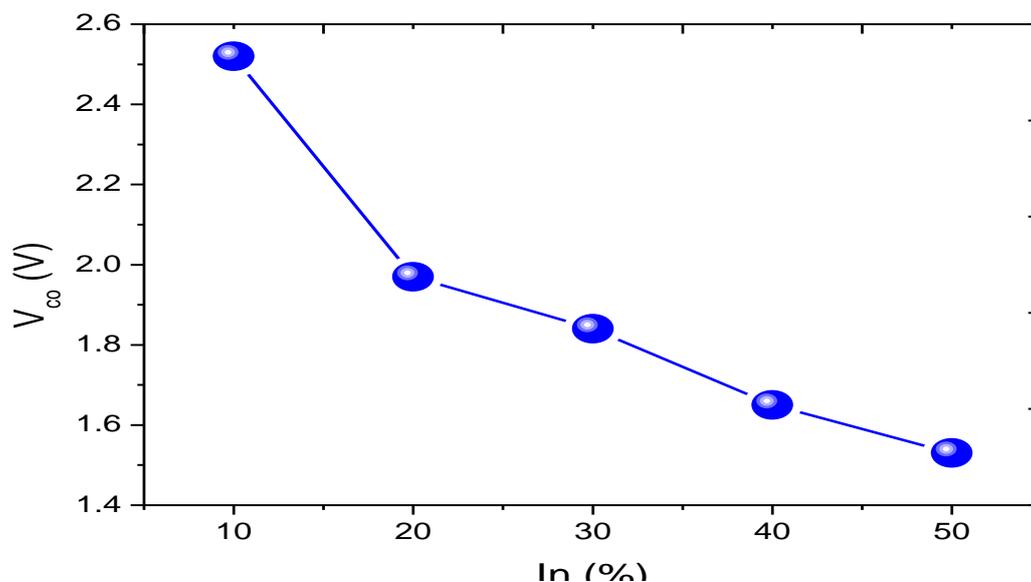
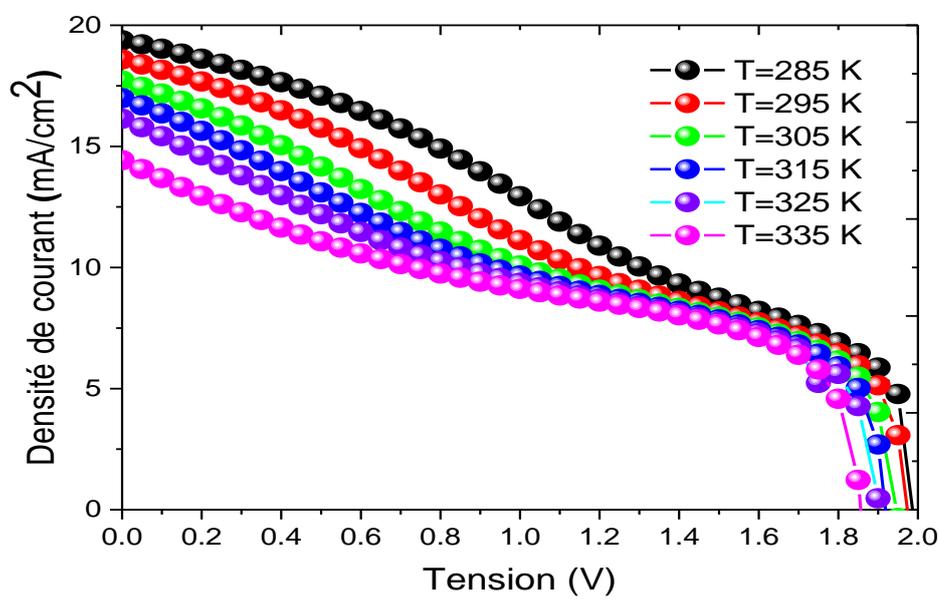


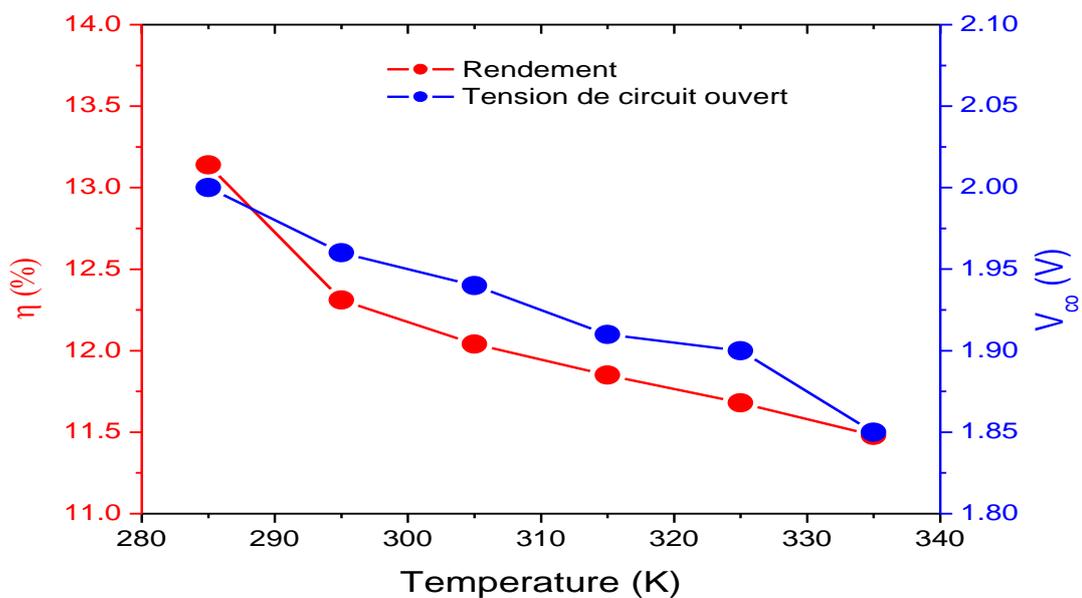
Figure 3.37 : Variation de la tension de circuit ouvert en fonction de la fraction molaire d'Indium x [91].

La figure (3.38.a) illustre la caractéristique J-V d'une cellule solaire à 10 couches de BQs $\text{In}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}/\text{GaN}$ pour une température varie entre 285 K et 335 K. Il est évident que le courant de court-circuit et la tension de circuit ouvert diminuent avec l'augmentation de la

température. La figure (3.38.b) représente l'évolution du rendement de conversion et la tension de circuit ouvert en fonction de la température. Dans cette figure, il est clair que le rendement et la tension de circuit ouvert diminuent linéairement avec la température. Avec une température de 285 K on obtient un rendement optimal de 13.14 % ce qui signifie une amélioration relative de 3.7 %.



a)



b)

Figure 3.38 : (a) caractéristique J-V d'une cellule solaire à 10 couches de BQs d' $\text{In}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}/\text{GaN}$ pour une température variable. (b) évolution du rendement de conversion et la tension de circuit ouvert en fonction de la température [91].

3.3.6. Cellule solaire à PQs SiGe/Si :

Après étudier les différentes cellules solaires à BQs, nous sommes intéressés dans ce qui suit à la modélisation et la simulation des cellules solaires à PQs. Pour cette section du travail, deux structures de cellules solaires sont étudiés : une cellule solaire p-i-n à base de silicium et une cellule solaire à puits quantiques SiGe/Si. Actuellement, dans le marché photovoltaïque, le silicium reste le matériau le moins cher et le plus utilisé pour la fabrication de cellules solaires, malgré sa faible performance par rapport aux autres nouveaux matériaux tels que InGaN, InGaAs, InAsN ... etc. Par conséquent, il est important d'optimiser la performance des cellules solaires en Si.

La figure (3.39) montre le schéma de la cellule solaire p-i-n à base de Si. Une couche de silicium de type p en avant et une autre de type n en arrière, avec une concentration de dopage de $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ pour chacune. Une autre couche de Si placée en milieu représente la couche intrinsèque. Le tout est crû sur un substrat de silicium de type n avec une résistivité $0.05 \text{ } \Omega \cdot \text{cm}$. Les PQs de $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ sont insérés dans la région intrinsèque, tout en obtenant des périodes de $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x(\text{PQs})/\text{Si}$ (barrière). La figure (3.40) représente le diagramme de bandes d'énergies de la structure à PQs $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$. On voit clairement sur cette figure que le type d'alignement de bandes est type II et la discontinuité de la bande de conduction est très faible de quelque meV.

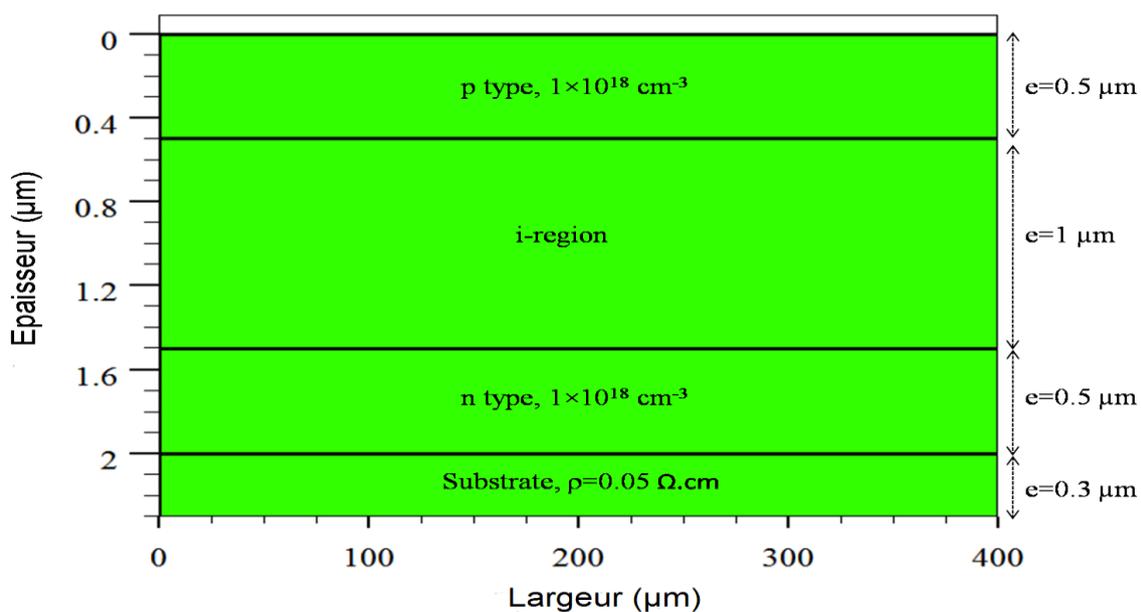


Figure 3.39 : Structure de la cellule solaire p-i-n à base de Si [96].

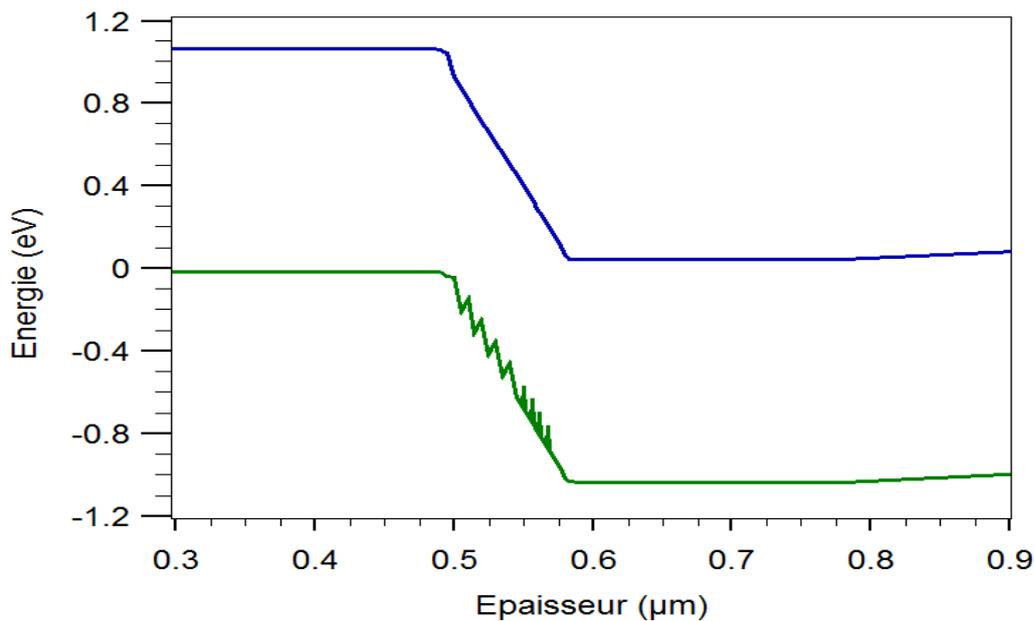


Figure 3.40 : Diagramme de bande d'énergie de la cellule solaire à PQs de SiGe/Si [96].

3.3.6.1. Résultats et discussion :

Le long de ce travail, nous avons utilisé les conditions de qualification des cellules solaires: spectre solaire AM1.5 et une température de 300 K. Nous avons commencé la simulation de la cellule solaire p-i-n illustrée à la figure (3.39). Par la suite, nous avons passé à la simulation d'une cellule solaire à puits quantique SiGe/ Si pour un nombre variable de couches de PQs 30, 50, 60 et 80, respectivement et une fraction molaire de germanium fixe de 0.2. En outre, nous avons étudié l'effet de la variation de la composition de germanium x ; $x=$ 1%, 10%, 15% et 20%, respectivement. Pour chaque simulation, les caractéristiques J-V, P-V, EQE et les paramètres caractéristiques importants d'une cellule solaire sont présentés et discutés. La figure (3.41) représente le coefficient d'absorption de Si et $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ en fonction de la longueur d'onde. On voit clairement que $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ exploite une grande partie du spectre solaire incident que Si.

La figure (3.42) et (3.43) expriment les caractéristiques J-V et P-V de la cellule solaire sans puits quantiques à base de Si. Il est clair que la cellule solaire p-i-n fournit un courant de court-circuit de 23 mA/cm^2 , une tension de circuit ouvert de 0.53 V et une puissance maximale de 10.08 mW/cm^2 .

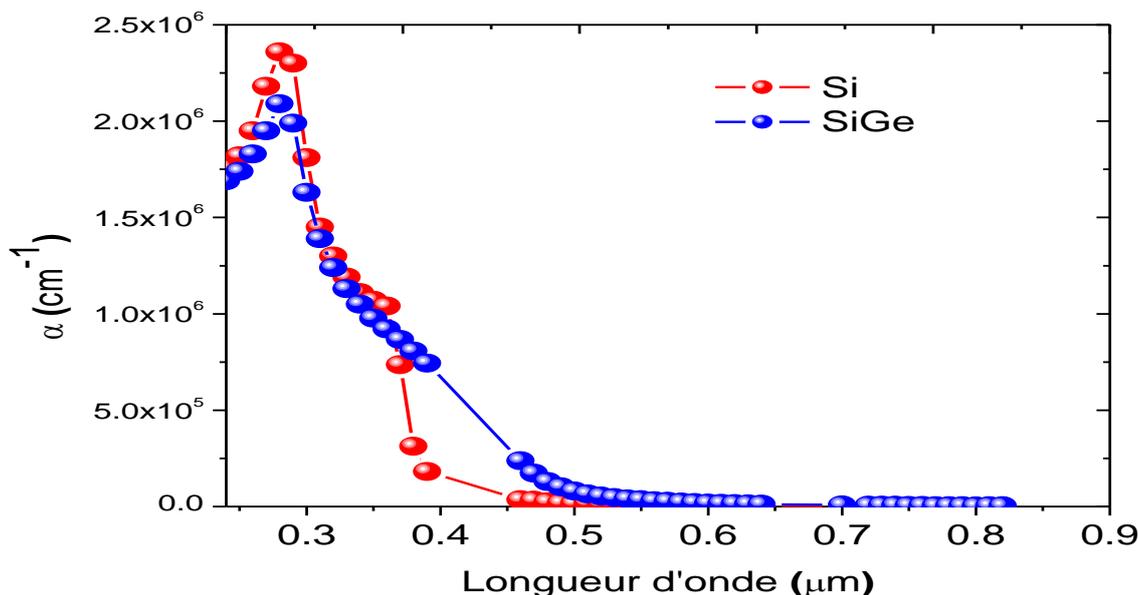


Figure 3.41 : Coefficient d'absorption de Si et SiGe [96].

La figure (3.44) représente la caractéristique J-V de la cellule solaire à PQs pour un nombre variable de périodes de $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ (PQs)/Si (barrière): 30, 50, 60 et 80, respectivement. Comme on peut le voir, le courant de court-circuit augmente avec l'augmentation du nombre de périodes, qui est due aux paires électron-trou supplémentaires photogénérés par les PQs de SiGe. La tension de circuit ouvert reste presque inchangeable. Une augmentation relative de 59.15% du courant de court-circuit est obtenue en comparant une cellule solaire à 80 périodes avec une cellule solaire p-i-n. La figure (3.45) représente la caractéristique P-V de la cellule solaire à PQs de $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ /Si pour un nombre variable de périodes: 30, 50, 60 et 80, respectivement. Il est clair que la puissance et donc le rendement de conversion de la cellule augmente avec le nombre de périodes. Une augmentation relative de 80 % de la performance de la cellule est obtenue en comparant une cellule solaire à 80 périodes avec une cellule solaire p-i-n. Le tableau (3.9) résume tous les paramètres caractéristiques (J_{cc} , V_{co} , FF , η) d'une cellule solaire sans et à PQs pour un nombre de périodes égale à 30, 50, 60 et 80. A partir du tableau, on note que le courant de court-circuit et le rendement de conversion de la cellule solaire augmentent lors l'insertion de périodes de PQs/barrière dans la région intrinsèque, jusqu'à 80 périodes où elle atteint la saturation.

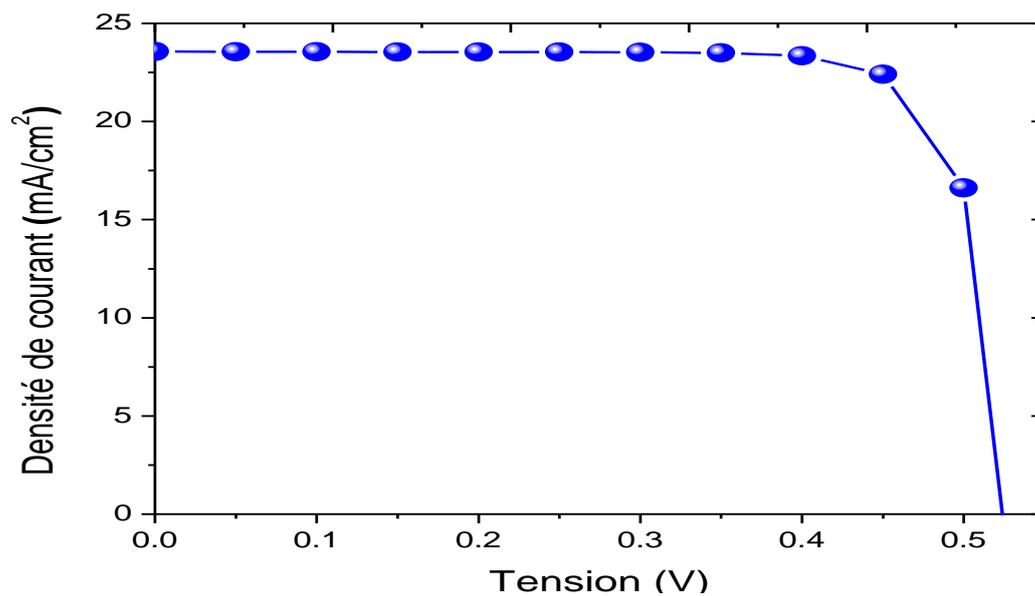


Figure 3.42 : Caractéristique J-V de la cellule solaire p-i-n à base de Si [96].

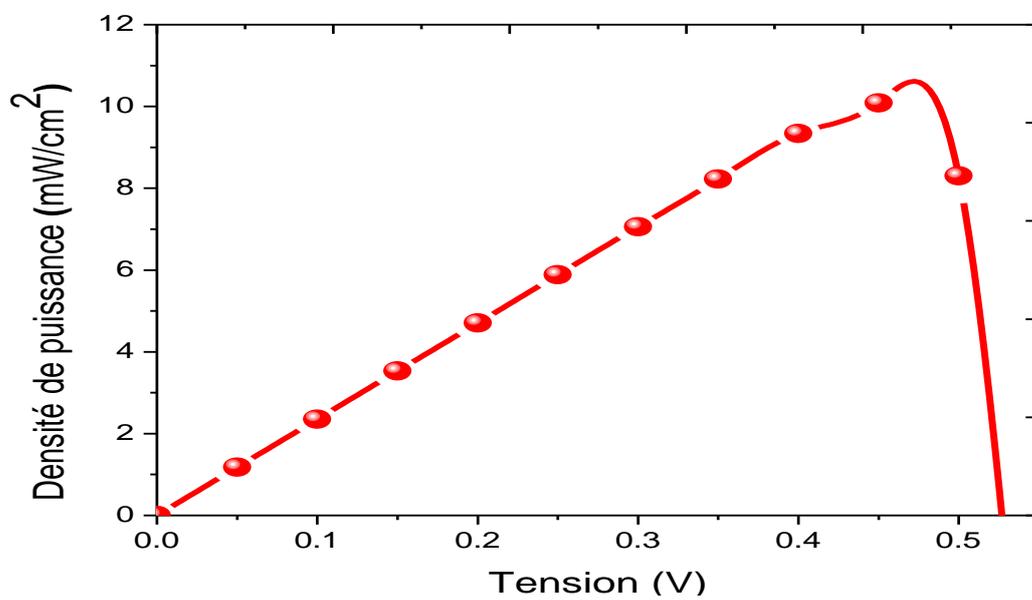


Figure 3.43 : Caractéristique P-V de la cellule solaire p-i-n à base de Si [96].

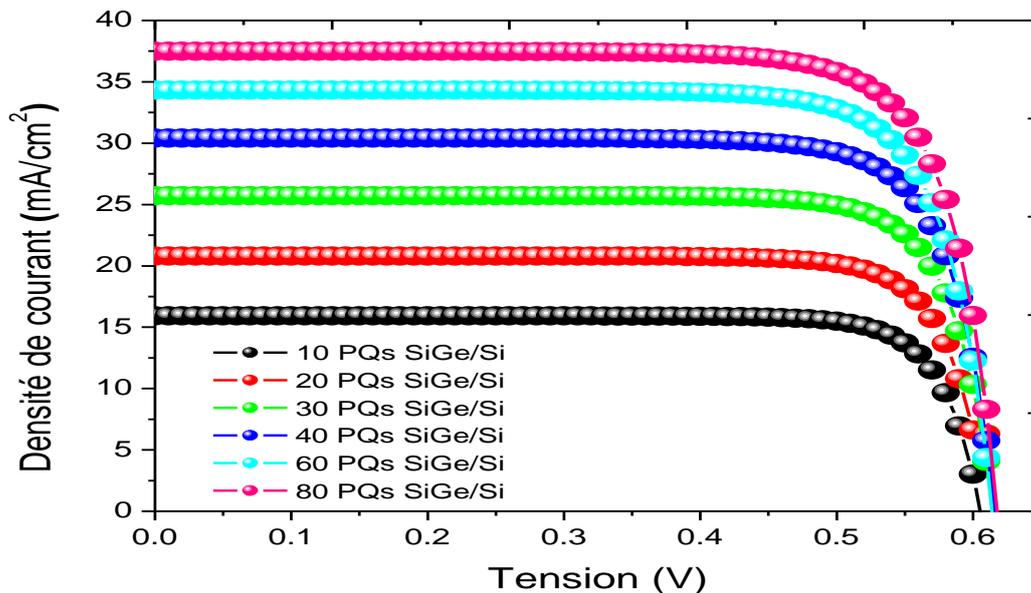


Figure 3.44 : Caractéristique J-V de la cellule solaire sans et avec un nombre variable de périodes de $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}/\text{Si}$ [96].

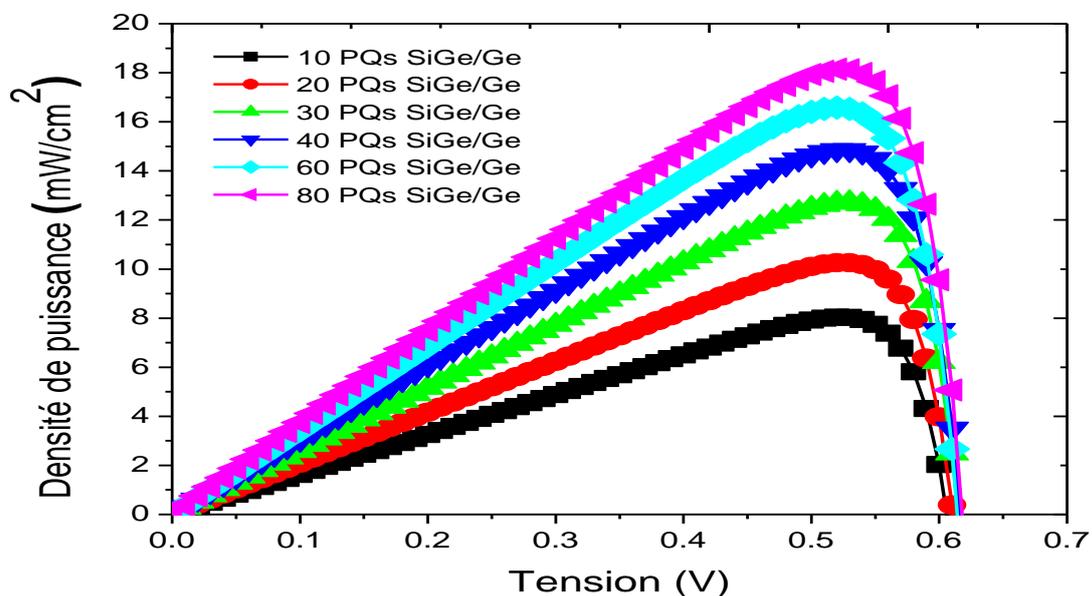


Figure 3.45 : Caractéristique P-V de la cellule solaire sans et avec un nombre variable de périodes de $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}/\text{Si}$ [96].

La figure (3.46) représente l'efficacité quantique externe EQE de la cellule solaire avec PQs $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ pour une composition chimique variable ; $x= 20\%$, 50% et 90% , respectivement. On observe que l'EQE atteint des valeurs maximales pour une composition chimique égale à 20% , il commence de décroître au-delà de cette valeur, à cause de l'augmentation du désaccord de maille entre le matériau barrière qui est le silicium et le

matériau de PQs qui est SiGe. Ce qui influe d'une façon néfaste sur la courbe de la réponse spectrale de la cellule solaire.

Tableau 3.9 : Paramètres caractéristiques d'une cellule solaire p-i-n et à puits quantiques $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}/\text{Si}$ pour un nombre de périodes variable.

Nombre de périodes	J_{cc} (mA/cm ²)	V_{oc} (V)	FF (%)	η (%)
0	23.55	0.53	80.75	10.08
30	25.72	0.623	79.32	12.71
50	30.42	0.622	78.53	14.86
60	34.32	0.621	77.80	16.58
80	37.48	0.62	76.82	18.14

La figure (3.47) représente la caractéristique J-V de la cellule solaire à PQs $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ pour une composition chimique variable ; $x=1\%$, 10% , 15% et 20% , respectivement. On voit clairement que le courant de court circuit et la tension de circuit ouvert augmente légèrement avec la composition chimique. Une composition chimique de 20% donne un meilleur courant de court circuit et un rendement de conversion optimal de 34.325 mA/cm^2 et 18.14% , respectivement.

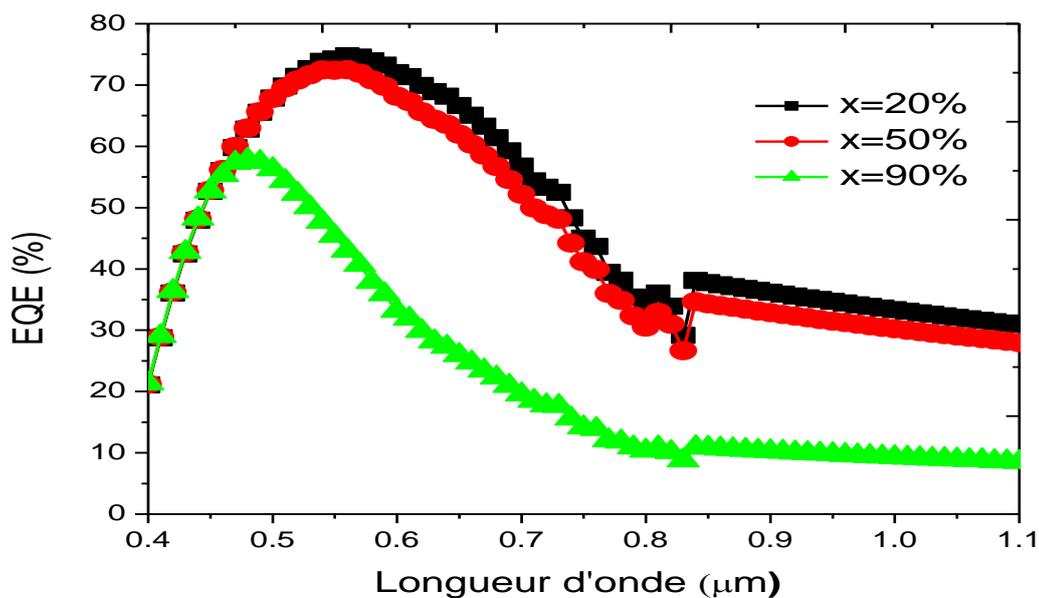


Figure 3.46 : EQE de la cellule solaire à PQs $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ pour une composition chimique variable 20%, 50 % et 90% [96].

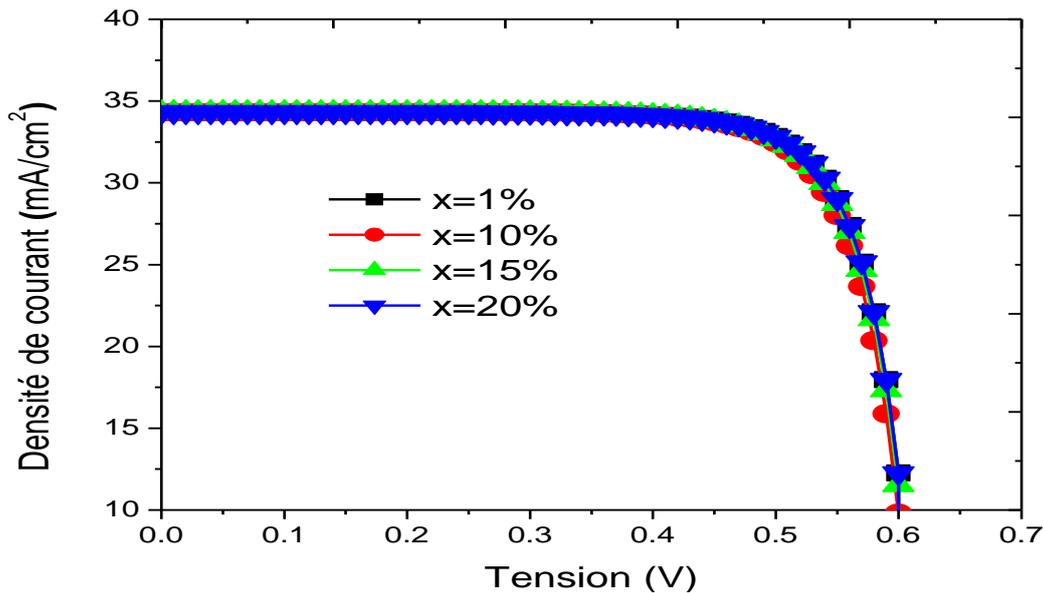


Figure 3.47 : Caractéristique J-V de la cellule solaire à PQs $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ pour une composition chimique variable 20%, 50 % et 90% [96].

3.3.7. Cellule solaire à PQs InGaN/GaN :

Dans cette partie de travail nous sommes intéressés à l'étude de l'influence d'insertion des PQs InGaN dans la région intrinsèque d'une cellule solaire hétérojonction $p\text{-GaN}/i\text{-InGaN}/n\text{-GaN}$ sur ses performances et sur la dynamique des porteurs de charges dont le champ électrique, le taux de photogénération et la recombinaison. La structure de la cellule solaire $p\text{-i-n}$ utilisée dans cette simulation contient quatre couches au total, comme le montre la figure (3.48). Deux couches grises de GaN en haut et en bas représentent l'émetteur de type p et la base de type n avec une concentration de dopants de $2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ chacune, respectivement. La couche intrinsèque InGaN avec une couleur noire au milieu, et une couche blanche $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.99}\text{N}$ (dopée $p \sim 10^{18} \text{ cm}^{-3}$), appelée couche de blocage d'électrons (EBL), offre une hauteur de barrière de potentiel suffisante pour confiner les électrons dans le bande de conduction [90]. La structure de la cellule solaire $p\text{-i-n}$ présentée est utilisée pour la modélisation et la simulation de la cellule solaire à PQs. Les cinq périodes d' $\text{In}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{N}$ (3 nm) / GaN (16 nm) sont insérées dans la région intrinsèque. L'introduction de ces périodes crée des barrières de potentiels et confine les porteurs de charge tout en améliorant l'action de la dérive de ces porteurs grâce à l'utilisation du champ électrique interne qui est présent dans la région de déplétion. Tous les paramètres de matériaux utilisés dans la simulation sont donnés par [76][82][92].

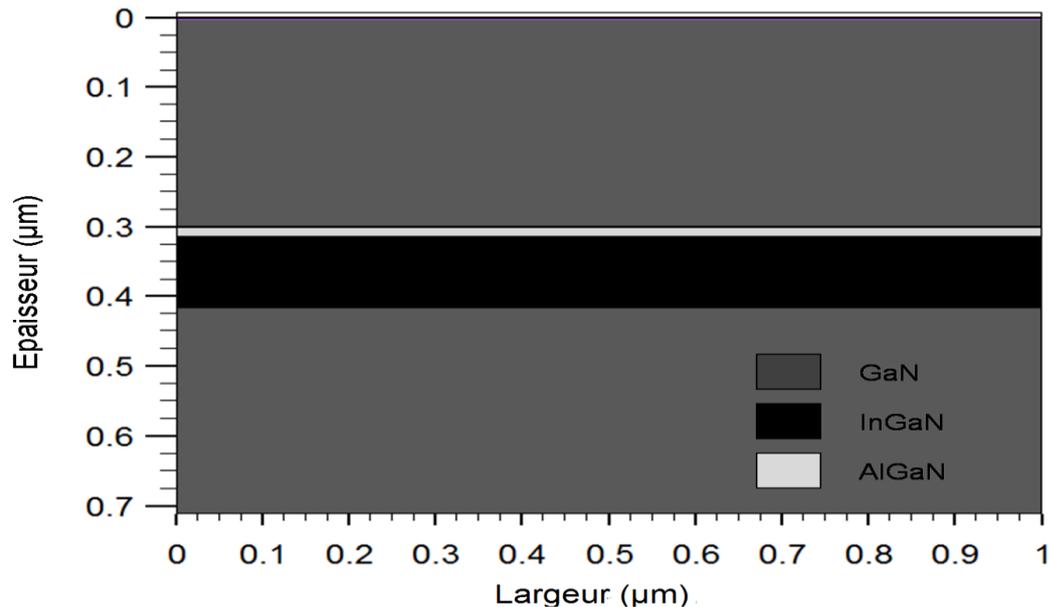


Figure 3.48 : Structure de la cellule solaire p-GaN/i-InGaN/n-GaN [97].

3.3.7.1. Résultats et discussion :

Le long de ce travail, nous avons utilisé les conditions de qualification des cellules solaires : spectre solaire AM1.5 et une température de 300 K. Nous avons commencé la simulation de la cellule solaire p-i-n illustrée dans la figure (3.48). Par la suite, nous avons passé à la simulation d'une cellule solaire à PQs InGaN/GaN pour un nombre variable de périodes : 5, 7, et 15, respectivement pour une fraction molaire d'indium fixe de 0.35. En outre, nous avons étudié l'effet de la variation de l'épaisseur du PQs. Pour chaque simulation, les caractéristiques J-V, P-V, EQE et les paramètres caractéristiques importants d'une cellule solaire sont présentés, discutés et comparés avec les résultats expérimentaux disponibles.

La figure (3.49) représente la caractéristique J-V de la cellule solaire p-i-n et à PQs pour un nombre variable de périodes insérées: 5, 7 et 15, respectivement. Le tableau (3.10) résume tous les paramètres caractéristiques de la cellule solaire p-i-n et à PQs $\text{In}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{N}/\text{GaN}$ avec un nombre différent de périodes incorporées: 5, 7 et 15, respectivement. On voit clairement qu'une augmentation du courant de court-circuit de la cellule solaire p-i-n a été obtenue lorsque les PQs ont été insérés. D'autre part, il a été observé que le courant de court-circuit est légèrement diminué au-delà de 5 périodes insérés. La tension de circuit ouvert diminue lorsque le nombre de périodes augmente. Ceci est dû au nombre élevé de pièges d'interfaces disponibles pour la recombinaison des porteurs et à l'accumulation de la contrainte produite par l'augmentation de plans de PQs et peut-être à la largeur du matériau de barrière GaN choisi pour cette simulation relativement plus épaisse (16 nm). Ce phénomène empêche le

chevauchement des fonctions d'ondes; et donc affecte le coefficient d'absorption [98]. La diminution du courant de court-circuit produite au-delà de 5 périodes révèle qu'il y a un nombre maximum de périodes à ne pas dépasser afin d'éviter une telle diminution. En ce qui concerne le rendement de conversion, le même résultat a été obtenu. Il a été noté qu'il y a une augmentation du rendement avec l'augmentation du nombre de périodes jusqu'à 5 périodes, après ce nombre, le rendement commence à diminuer. Il s'agit d'un nombre de périodes pour lequel la recombinaison croissante générée par les pièges d'interfaces d' $\text{In}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{N}/\text{GaN}$ commence à dépasser l'absorption croissant dans les PQs.

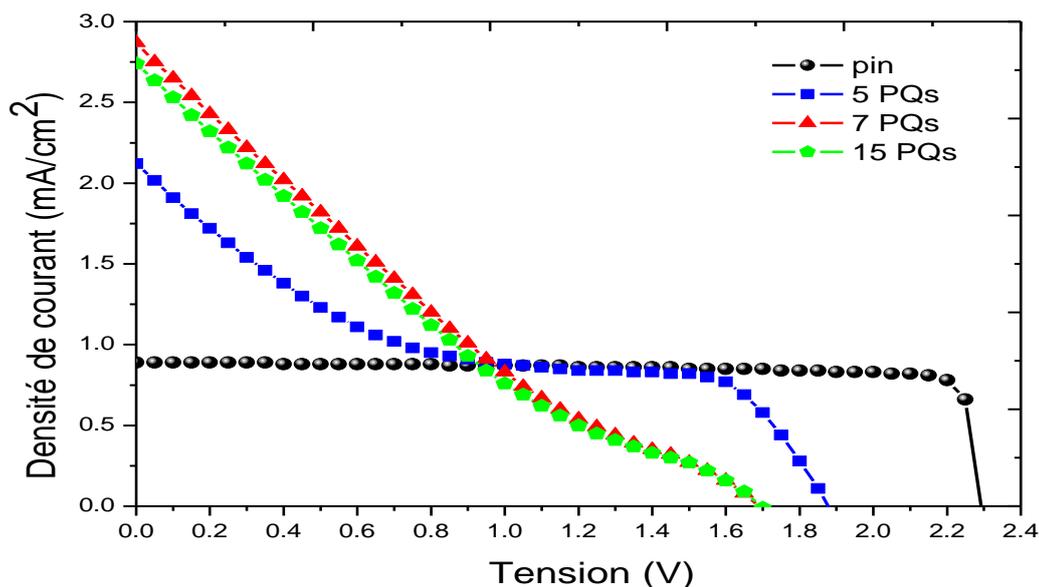


Figure 3.49 : Caractéristique J-V de la cellule solaire sans et avec un nombre variable de périodes de $\text{In}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{N}/\text{GaN}$ [97].

Tableau 3.10 : Paramètres caractéristiques d'une cellule solaire p-i-n et à puits quantiques $\text{In}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{N}/\text{GaN}$ pour un nombre de périodes variable.

Nombre de périodes	J_{cc} (mA/cm ²)	V_{co} (V)	FF (%)	η (%)
0	0.89	2.34	37.45	0.78
5	2.12	1.87	31.49	1.25
7	2.87	1.69	19.97	0.98
15	2.74	1.81	12.03	0.92

La figure (3.50) illustre la comparaison entre la caractéristique J-V calculée et celle mesurée expérimentalement pour 5 périodes d' $\text{In}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{N}/\text{GaN}$. Les deux courbes

présentent la même tension de circuit ouvert d'environ 1.875 V. Cependant, le courant de court-circuit de la courbe expérimentale ($J_{cc} = 1.5 \text{ mA} / \text{cm}^2$) est inférieur à celui simulé ($J_{cc} = 2.12 \text{ mA} / \text{cm}^2$). Le rendement de conversion expérimental obtenu ($\eta = 1.75\%$) est légèrement supérieure à celui simulée ($\eta = 1.25\%$). La raison possible de ce conflit pourrait être liée à l'effet de polarisation piézoélectrique qui s'est produit à l'hétéro-interface, en particulier dans les nitrures de wurtzite qui n'est pas pris en compte dans notre simulation. Ce phénomène conduit à la suppression des porteurs photogénérés [99][97].

EQE est une caractéristique importante d'une cellule solaire. Il donne des informations sur le courant qu'une cellule solaire donnée produira lorsqu'elle sera exposée à un spectre solaire. Dans cette section, et parce que nous avons constaté que 5 périodes de PQs/barrières donnent des performances optimales, nous avons effectué un calcul pour ce nombre pour voir la réponse spectrale EQE et l'a comparé avec un résultat expérimental pour la validation. La figure (3.51) illustre la dépendance spectrale de l'EQE mesurée et simulée. À partir de cette figure, la longueur d'absorption d'une cellule solaire p-GaN/ i-InGaN/n-GaN (430 nm) [101] a été étendu à des longueurs d'onde plus longues. On a également observé qu'à partir de la courbe calculée, EQE a un pic d'environ 34% à la longueur d'onde 430 nm et elle devient nulle autour de 500 nm. Par contre, la courbe mesurée présente un pic d'environ 35% à 400 nm et approche de zéro autour de 470 nm. L'EQE simulé couvre une large bande de spectre solaire. Nous avons suggéré que ce décalage observé entre les deux courbes est due aux conditions utilisées dans l'expérience et au type et la nature des matériaux utilisés en particulier les homogénéités de l'indium dans les matériaux PQs [102]. De plus et comme déjà indiqué, il était lié à l'effet de polarisation piézoélectrique survenu dans l'expérience [103]. L'effet de polarisation piézoélectrique crée des charges de polarisation à chaque interface InGaN/GaN et induit un champ électrique qui entrave la collection et l'extraction des porteurs dans les puits quantiques. Dans la plage de longueurs d'onde de 300 nm à 370 nm, l'EQE mesuré est inférieur à celui simulé. Cette gamme correspond à l'absorption de la couche supérieure p-GaN. Ceci est limité par l'absence de couche fenêtre AlGaN dans la structure utilisée dans l'expérience qui a un bon impact pour améliorer les performances de la cellule solaire.

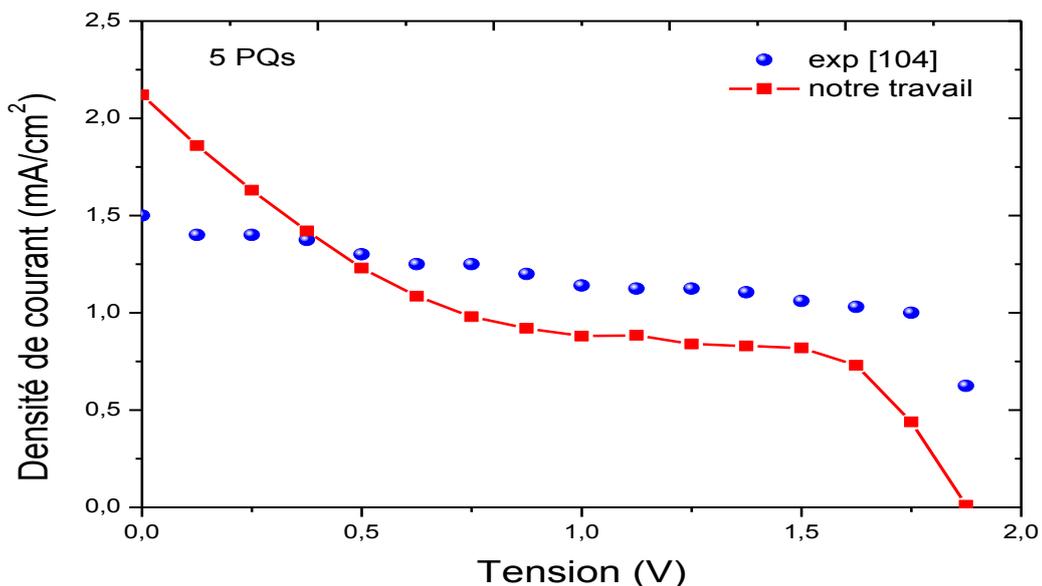


Figure 3.50 : Caractéristique J-V simulée et mesurée de la cellule solaire à 5 périodes d' $\text{In}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{N}/\text{GaN}$ [97].

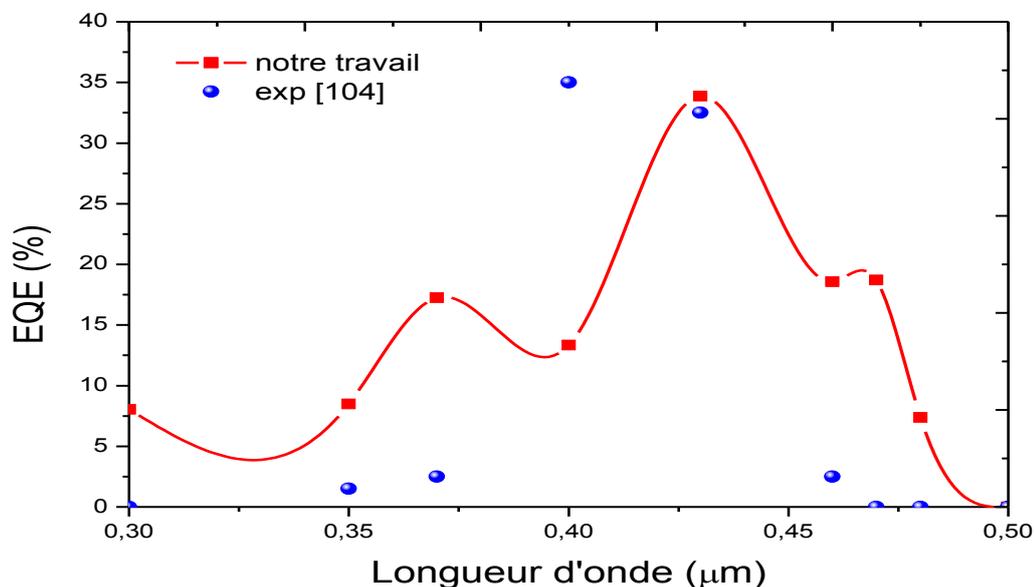


Figure 3.51 : EQE simulée et mesurée de la cellule solaire à 5 périodes d' $\text{In}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{N}/\text{GaN}$ [97].

La figure (3.52) exprime la caractéristique J-V de la cellule solaire à 5 périodes d' $\text{In}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{N}/\text{GaN}$ pour une épaisseur différente de PQs : 3 nm et 16 nm, respectivement. Les paramètres électriques extraits de ces courbes sont listés dans le tableau (3.11). Il était clair que le courant de court-circuit et le rendement de conversion sont augmentés de 2.12 mA/cm^2 à 17.80 mA/cm^2 et de 1.25 % à 3.89 %, respectivement, lorsque l'épaisseur du PQ augmente de 3 à 16 nm; Cela est expliqué par la diminution de la différence entre les niveaux

énergétiques dans la bande de conduction et de valence ce qui facilite l'absorption et l'extraction des porteurs dans les puits [79]. En conséquence, un PQ épais absorbe plus de photons et génère un grand nombre de photoporteurs supplémentaires.

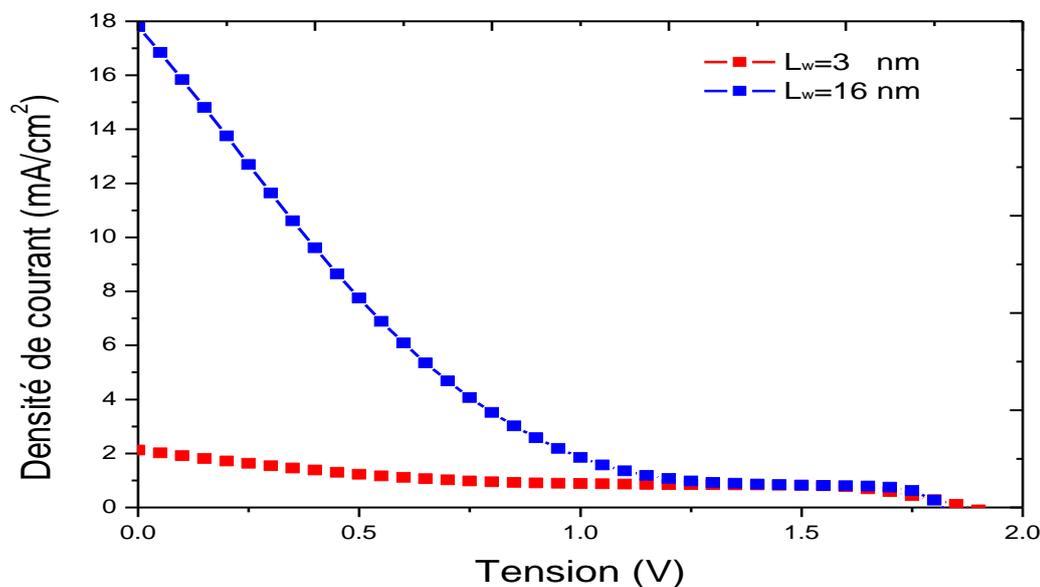


Figure 3.52 : Caractéristique J-V de la cellule solaire à 5 périodes d' $\text{In}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{N}/\text{GaN}$ pour deux épaisseurs différentes de PQs, L_w : 3 nm et 16 nm [97].

Tableau 3.11 : Paramètres caractéristiques d'une cellule solaire à puits quantiques $\text{In}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{N}/\text{GaN}$ pour deux épaisseurs de PQs, L_w : 3 nm et 16 nm.

Épaisseur de PQs $L_w(\text{nm})$	$J_{cc}(\text{mA}/\text{cm}^2)$	V_{co} (V)	FF (%)	η (%)
3	2.12	1.87	31.49	1.25
16	17.80	1.81	12.03	3.89

Figure (3.53) et (3.54) représentent le champ électrique en fonction de la profondeur de 5 et 7 périodes d' $\text{In}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{N}/\text{GaN}$ pour trois tensions de sortie ($V_{out} = 0, 0.8$ et 1.6 V). La troisième tension de sortie est la tension correspond à la puissance maximale. Dans les deux figures, le champ électrique prend des valeurs élevées dans les interfaces entre la région intrinsèque et les régions dopées produites par le gradient de rampe dans les profils de potentiels. À l'intérieur de la région intrinsèque, où les PQs ont été insérés, le champ électrique prend des valeurs discrètes et leur forme est similaire au profil de PQs dans le diagramme de bande d'énergie. Cependant, le champ électrique en condition de court-circuit (170 KV/cm avec 5 périodes et 125 KV/cm avec 7 périodes) est meilleur que lorsque le

dispositif fonctionne à sa tension de la puissance maximale de 1.6 V (50 KV/cm avec 5 périodes et 70 KV/cm avec 7 périodes), et à sa demi-valeur de 0.8 V (80 KV/cm avec 5 périodes et 85 KV/cm avec 7 périodes). En conséquence, 5 périodes fournissent un grand champ électrique à la condition de court-circuit pour extraire et collecter des photoporteurs dans les PQs.

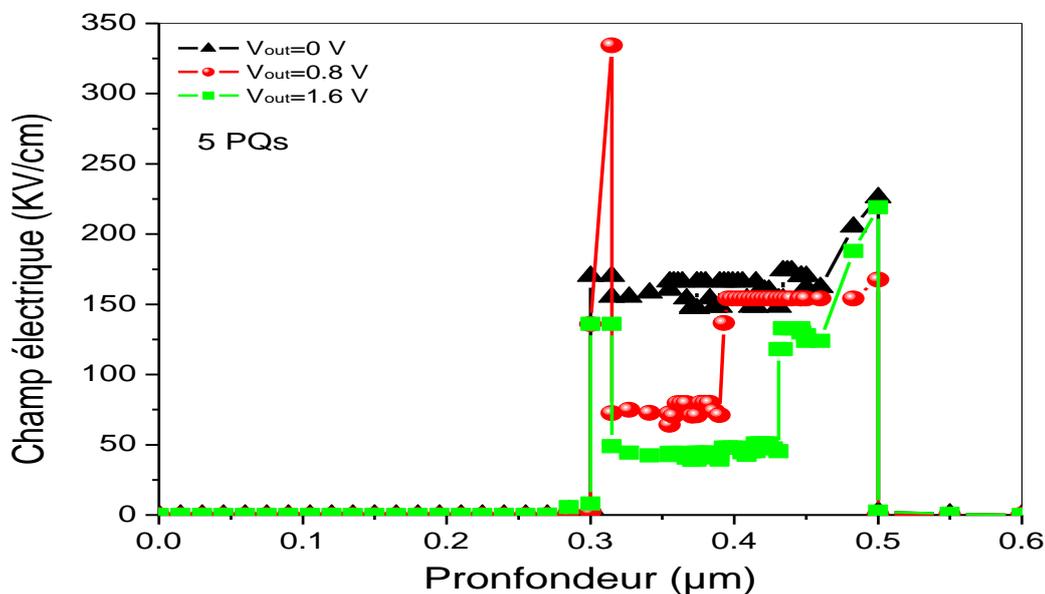


Figure 3.53 : Profil du champ électrique de la cellule solaire à 5 périodes d' $\text{In}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{N}/\text{GaN}$ pour trois tension de sortie V_{out} : 0 V, 0.8 V et 1.6 V [97].

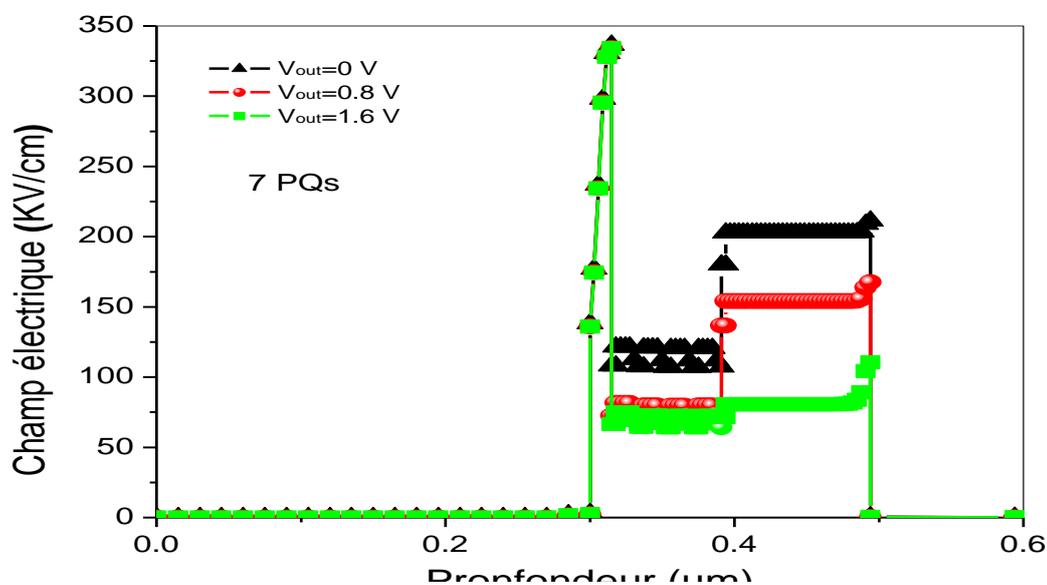


Figure 3.54 : Profil du champ électrique de la cellule solaire à 7 périodes d' $\text{In}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{N}/\text{GaN}$ pour trois tension de sortie V_{out} : 0 V, 0.8 V et 1.6 V [97].

Les taux de recombinaison de 5 et 7 périodes d' $\text{In}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{N}/\text{GaN}$ pour trois tensions de sortie ($V_{\text{out}} = 0, 0.8$ et 1.6 V) sont respectivement représentés dans les figures (3.55) et (3.56). On a noté à partir de ces deux figures que les taux de recombinaison sont approximativement les mêmes dans les régions dopées pour les trois tensions de sorties 0 V, 0.8 V et 1.6 V. A l'intérieur de la région intrinsèque où les PQs ont été intégrés, les taux de recombinaison sont améliorés et c'est évidemment sont augmentés avec l'augmentation de la tension de sortie, car le flux de porteurs dans la région intrinsèque augmente. De plus, il était évident que, avec 7 périodes, le taux de recombinaison était supérieur à ce de 5 périodes, donc il fournit plus de pièges d'interfaces pour la recombinaison des porteurs avant leurs collections. Un taux de recombinaison plus élevé n'est pas favorable pour les applications photovoltaïques.

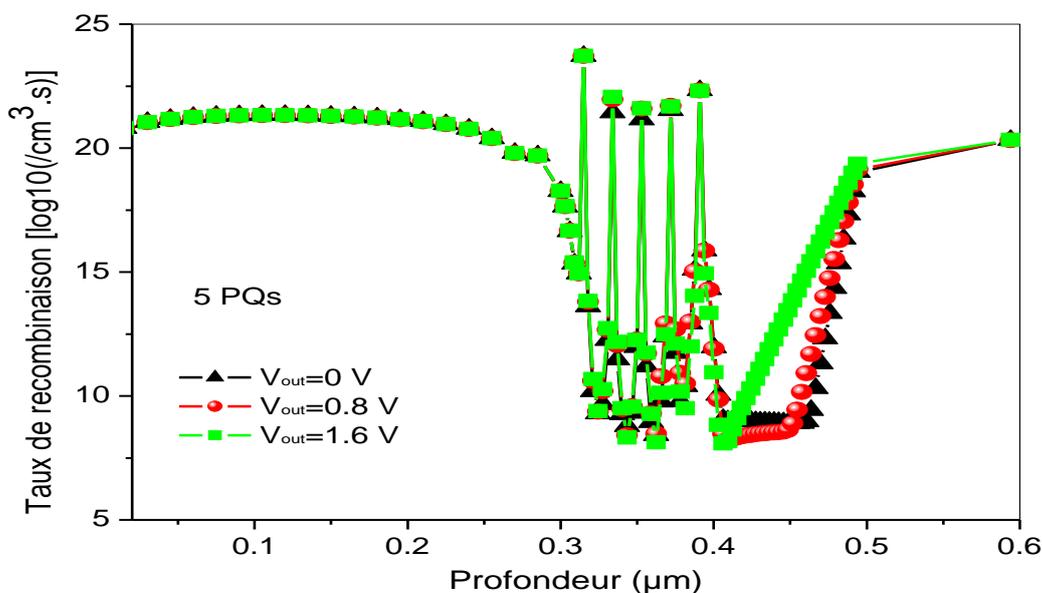


Figure 3.55 : Taux de recombinaison de la cellule solaire à 5 périodes d' $\text{In}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{N}/\text{GaN}$ pour trois tension de sortie V_{out} : 0 V, 0.8 V et 1.6 V [97].

Le taux de la photo-génération à la condition de court-circuit de la cellule solaire p-i-n, et de 2 et 5 périodes d' $\text{In}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{N}/\text{GaN}$ est illustré dans la figure (3.57). Il était évident que la photo-génération diminue avec la profondeur de la cellule solaire pour les trois configurations. De plus, on peut voir clairement une amélioration du taux de photo-génération dans la région intrinsèque de la cellule solaire p-i-n due à l'insertion des PQs; Cela signifie que les photons de faibles énergies sont efficacement absorbés et engendrent des paires électron-trou.

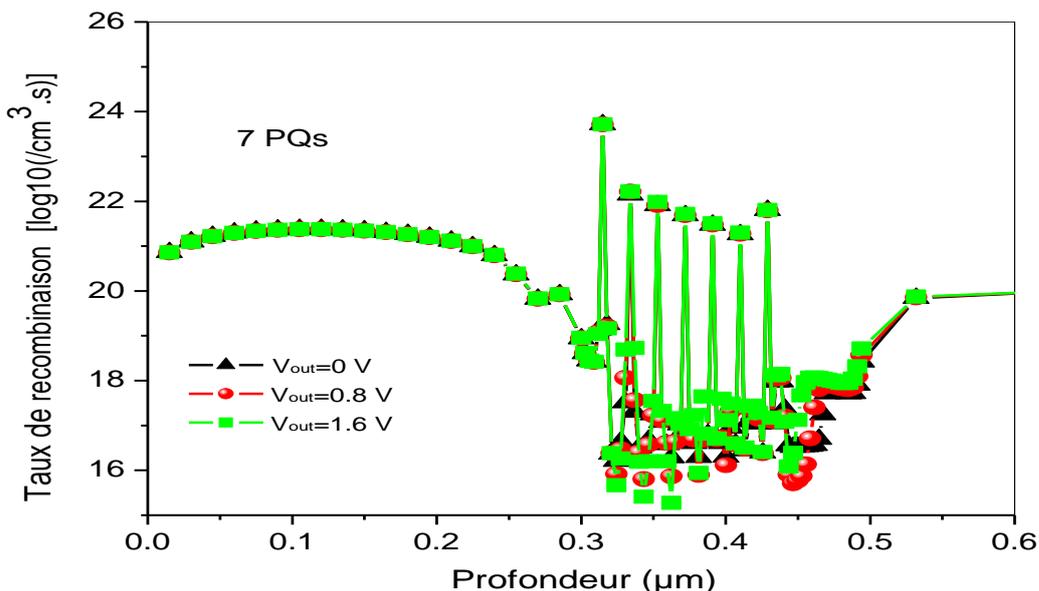


Figure 3.56 : Taux de recombinaison de la cellule solaire à 7 périodes d' $\text{In}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{N}/\text{GaN}$ pour trois tension de sortie V_{out} : 0 V, 0.8 V et 1.6 V [97].

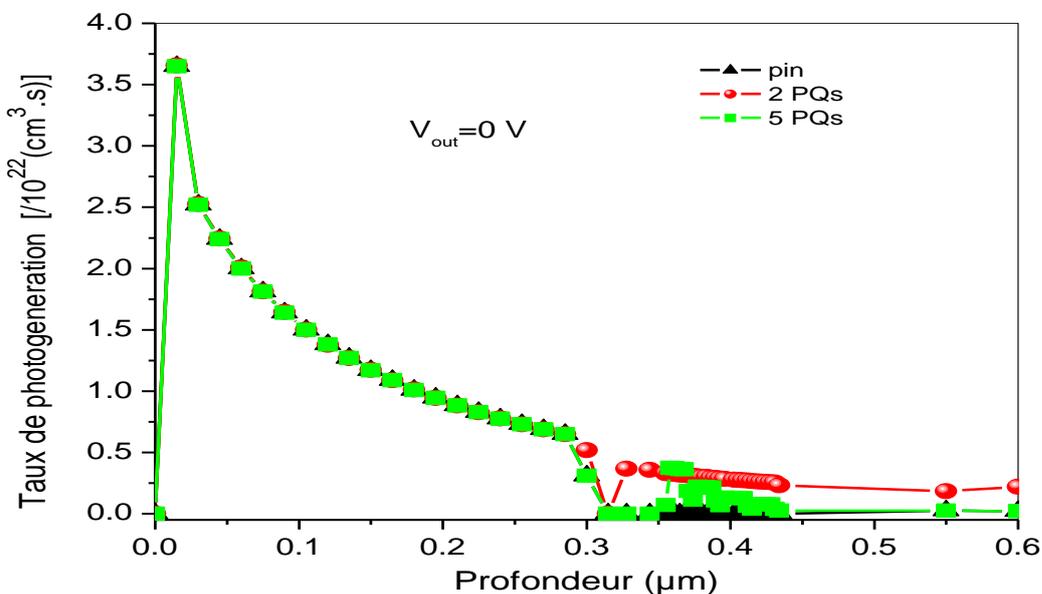


Figure 3.57 : Photogénération de la cellule solaire p-i-n et à 2 et 5 périodes d' $\text{In}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{N}/\text{GaN}$ dans la condition de court-circuit [97].

3.3.8. Cellule solaire à PQs InAsP/GaAs :

Nous sommes intéressés à la modélisation et la simulation d'une cellule solaire à PQs d' InAsP/GaAs dans cette partie de travail. Les PQs $\text{InAs}_{0.35}\text{P}_{0.65}$ sont insérés dans la région intrinsèque d'une cellule solaire p-i-n à base de GaAs et le résultat des périodes d' $\text{InAs}_{0.35}\text{P}_{0.65}$ (PQ)/GaAs (barrière) sont créés dans la région intrinsèque. La structure de la cellule p-i-n étudiée ici est montrée dans la figure (3.58). Deux couches d' InGaAs en bleu sont les couches de contacts. Trois

couches de GaAs en vert sont l'émetteur de type p avec une concentration de dopage de $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, la région intrinsèque et la base de type n avec la même concentration de dopage de l'émetteur. La figure (3.59) montre une zone agrandie de la région intrinsèque après l'insertion des PQs d' $\text{InAs}_{0.35}\text{P}_{0.65}$. Les PQs d' InAsP sont en rouge.

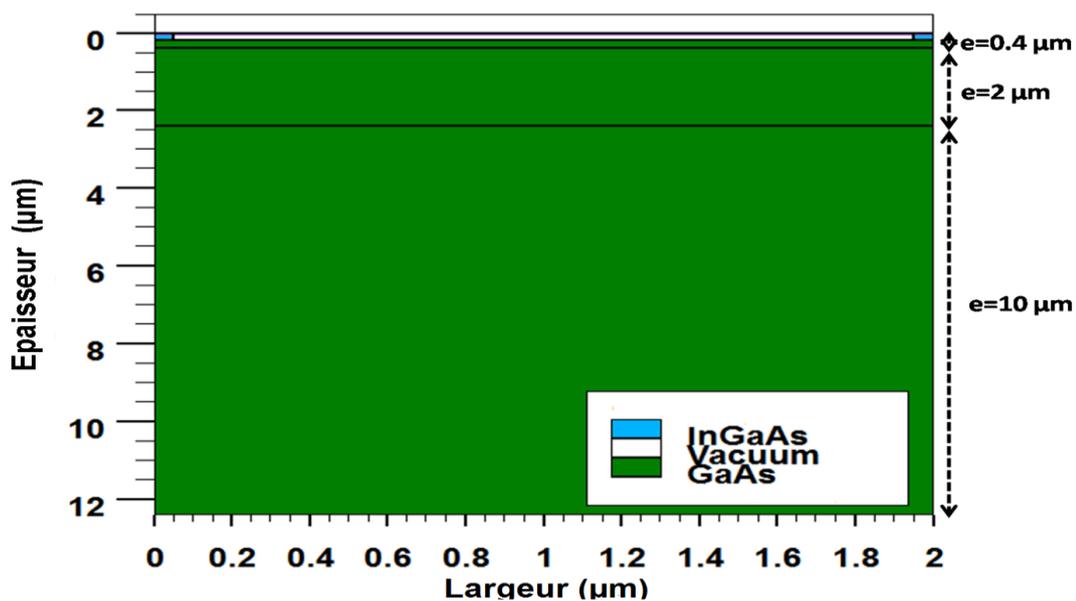


Figure 3.58 : Structure de la cellule solaire p-i-n à base de GaAs [105].

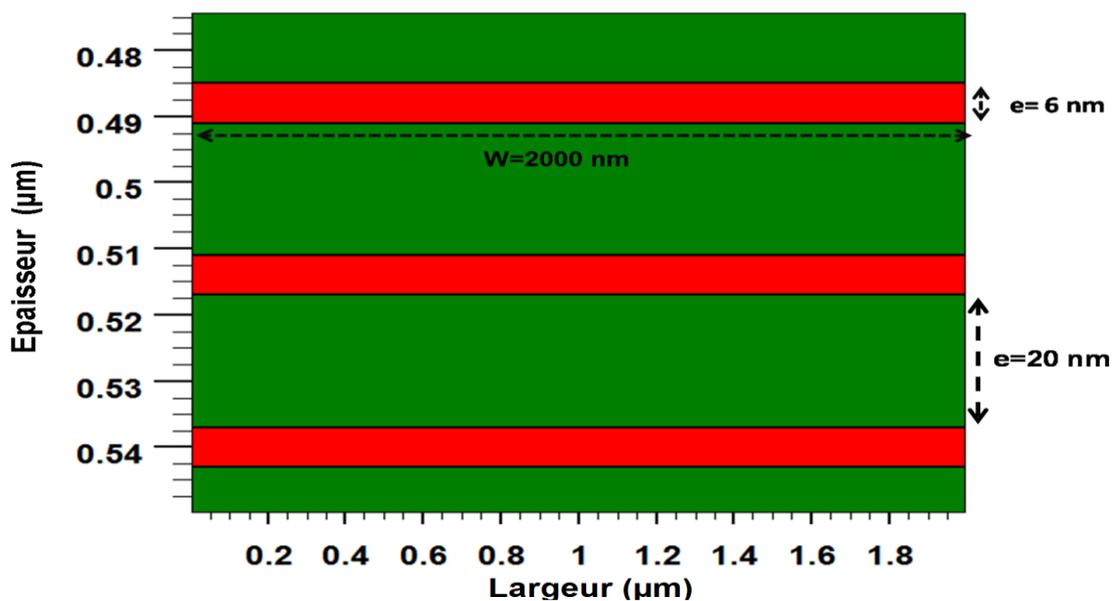


Figure 3.59 : Partie agrandie de la région intrinsèque de la cellule solaire à PQs d' InAsP/GaAs [105].

3.3.8.1. Résultats et discussion :

Au cours de cette partie du travail, nous avons utilisé les conditions standards de qualification des cellules solaires: un spectre solaire AM1.5G et une température de 300 K. Nous avons commencé la simulation de la cellule solaire p-i-n illustrée à la figure (3.58). Par la suite, nous avons passé à la simulation d'une cellule solaire à PQs InAs_{0.35}P_{0.65}/GaAs pour un nombre variable de périodes : 5, 10, et 20, respectivement. Pour chaque simulation, les caractéristiques J-V, la courbe d'EQE et les paramètres caractéristiques importants d'une cellule solaire sont présentés et discutés.

La figure (3.60) représente le coefficient d'absorption de la cellule solaire p-i-n à base de GaAs et la cellule solaire à PQs InAs_{0.35}P_{0.65}/GaAs en fonction de la longueur d'onde. On voit clairement que la cellule solaire à PQs exploite une large gamme du spectre solaire incident avec des valeurs élevées que la cellule solaire p-i-n parce que le coefficient d'absorption augmente quand le nombre des états énergétiques disponibles dans la bande de conduction et la bande de valence augmente, ce qui on le trouve dans les nanostructures.

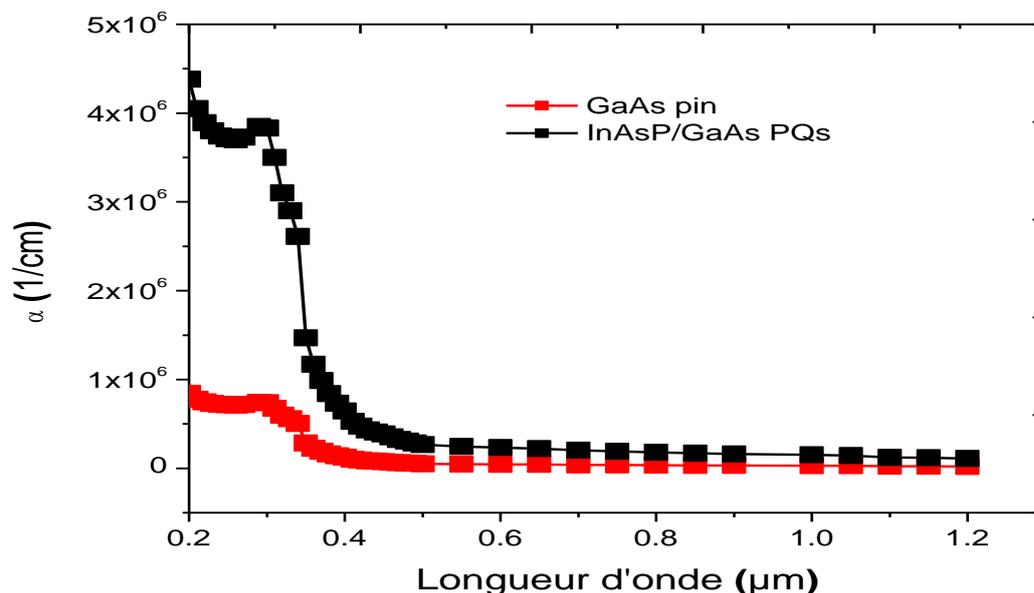


Figure 3.60 : Coefficient d'absorption de la cellule solaire p-i-n à base de GaAs et à PQs d'InAsP/GaAs [105].

La figure (3.61) représente l'efficacité quantique externe EQE en fonction de la longueur d'onde d'une cellule solaire avec et sans puits quantiques d'InAsP pour un nombre différent de périodes insérées: 5, 10 et 20, respectivement. Il est clair dans cette figure que l'EQE d'une cellule solaire standard p-i-n est effectivement rapproché le zéro autour de la longueur d'onde 900 nm. L'EQE dans la gamme 900 nm à 1200 nm de la cellule solaire à

PQs $\text{InAs}_{0.35}\text{P}_{0.65}/\text{GaAs}$ avec 5 périodes, 10 périodes et 20 périodes varie de 10% à 30%, ce qui signifie que les photons moins énergétiques dans cette plage de longueurs d'ondes sont effectivement absorbés et ne sont pas perdus, donc ils ont contribué à la création de paires électron-trou. En addition, il peut y avoir une autre optimisation dans la plage de longueurs d'ondes de 450 nm à 875 nm. Nous pouvons expliquer ce résultat par l'élargissement de l'épaisseur de la région intrinsèque de la cellule solaire p-i-n en raison du nombre accru de plans de PQs introduites.

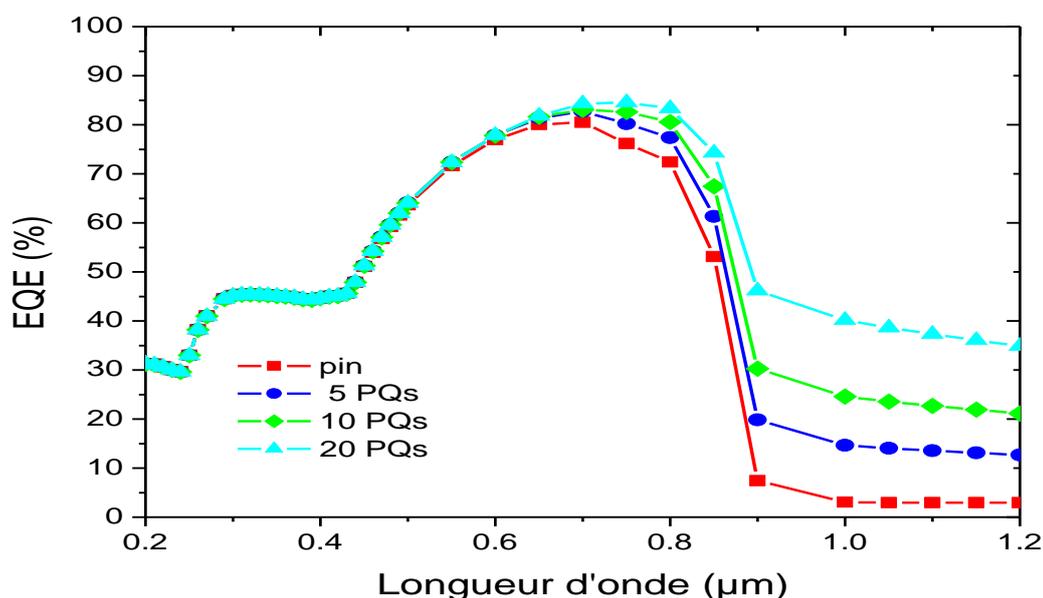


Figure 3.61 : EQE de la cellule solaire sans et avec un nombre variable de périodes de $\text{InAs}_{0.35}\text{P}_{0.65}/\text{GaAs}$ [105].

Nos résultats ont montré que la cellule solaire p-i-n offre un courant de court-circuit de 19.69 mA/cm^2 , une tension de circuit ouvert de 0.93 V et une puissance maximale de 15.82 mW/cm^2 . La figure (3.62) représente la caractéristique J-V de la cellule solaire avec PQs pour un nombre variable de périodes d' $\text{InAs}_{0.35}\text{P}_{0.65}/\text{GaAs}$ insérées: 5, 10 et 20, respectivement. Comme on peut le voir, le courant de court-circuit se développe avec le nombre de périodes, grâce aux paires électron-trou supplémentaires photogénérées. La tension du circuit ouvert diminue lorsque le nombre de puits quantiques insérés augmente. Un développement relativement important de 12.64% du courant de court-circuit est obtenu lors de la comparaison d'une cellule solaire à 20 périodes avec la cellule solaire p-i-n. Le tableau (3.12) résume tous les paramètres caractéristiques de la cellule solaire (courant de court-circuit: J_{cc} , la tension du circuit ouvert: V_{co} , le facteur de remplissage: FF et le rendement de conversion: η) de la cellule solaire sans et avec PQs InAsP/GaAs avec un nombre de périodes variable.

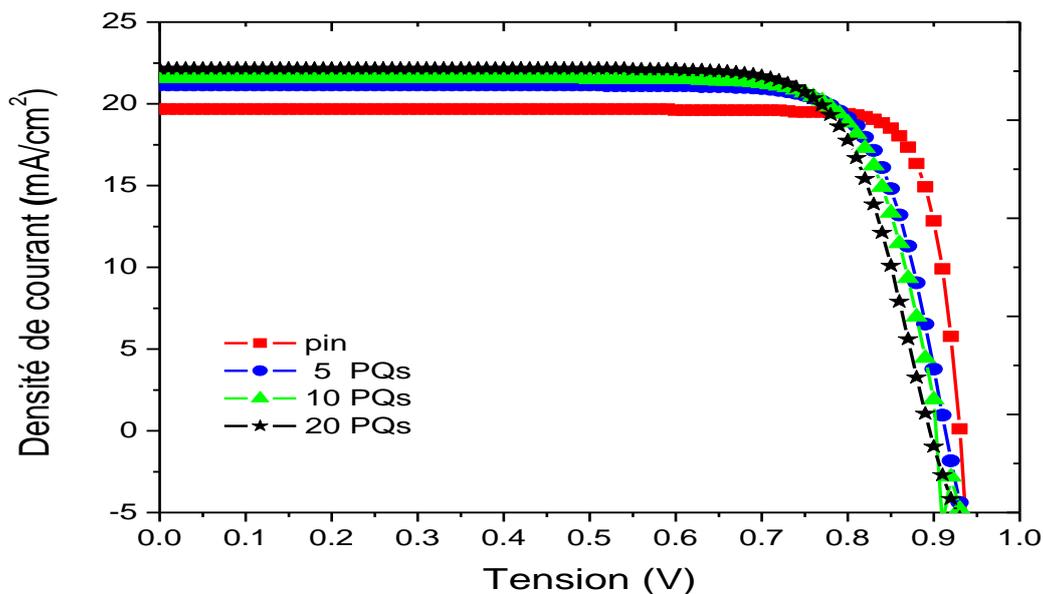


Figure 3.62 : Caractéristique J-V de la cellule solaire sans et avec un nombre variable de périodes de $\text{InAs}_{0.35}\text{P}_{0.65}/\text{GaAs}$ [105].

Tableau 3.12: Paramètres caractéristiques d'une cellule solaire p-i-n et à puits quantiques $\text{InAs}_{0.35}\text{P}_{0.65}/\text{GaAs}$ pour un nombre de périodes variable.

Nombre de périodes	J_{cc} (mA/cm ²)	V_{co} (V)	FF (%)	η (%)
0	19.69	0.93	86.37	15.82
5	21.19	0.91	80.17	15.52
10	21.58	0.9	79.35	15.54
20	22.18	0.89	78.27	15.54

3.3.9. Cellule solaire à nanofils NFs cœur/coquille de Si/SiGe:

Récemment, les nanofils sont apparus comme des dispositifs alternatifs pour améliorer l'absorption optique et l'efficacité de la collection dans une cellule solaire planaire [106][107].

Leur rapport surface/volume élevé est utile pour améliorer les performances des appareils électroniques. De plus, les nanofils diminuent la densité des états dans la surface, ce qui entraîne une diminution de la recombinaison des porteurs photogénérés et réduit la distance pour la jonction collectrice. Puisque Si est un semiconducteur à bande interdite indirecte, quelques microns sont nécessaires pour absorber la majorité des photons compris

dans le spectre solaire. Une solution à cette limitation, les nanofils de Si (NF) peuvent être allié avec d'autres semiconducteurs pour fabriquer des matériaux en alliage. Parmi les semiconducteurs que le silicium qui peut être mélangé avec-le est le germanium Ge, pour créer un alliage IV $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$. Grâce aux propriétés physiques et à la bande interdite de $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ qui est réglable entre 0.66 eV et 1.12 eV, ce matériau joue un rôle important dans le domaine de l'optoélectronique. Dans cette section du travail, nous sommes intéressés à la modélisation et l'optimisation d'une cellule solaire p-i-n à NFs cœur/coquille Si/ $\text{Si}_{0.2}\text{Ge}_{0.8}$ avec une jonction radiale. Plusieurs effets sont étudiés et discutés comme l'influence du rayon et de la longueur de NF sur les principales caractéristiques d'une cellule solaire: courant-tension J-V et efficacité quantique externe EQE. La variation de la densité spatiale totale du courant dans la jonction radiale est également présentée. La figure (3.63.a) montre la structure 3D de la cellule solaire p-i-n à NFs cœur/coquille Si/ $\text{Si}_{0.2}\text{Ge}_{0.8}$ avec une longueur totale d'environ 3 μm et un rayon de 0.19 μm . La figure (3.63.b) montre la face avant de la structure où la zone en couleur rouge représente la coquille SiGe de type n, la zone en couleur bleu est la région intrinsèque et la zone de couleur jaune est le cœur Si de type p.

3.3.9.1. Résultats et discussion :

La figure (3.64) montre à la fois la caractéristique J-V de la cellule solaire p-i-n à NFs cœur/coquille de Si et Si/ $\text{Si}_{0.2}\text{Ge}_{0.8}$ pour plusieurs longueurs: 3 μm , 10 μm , 20 μm , et 30 μm avec rayon fixe de 0.19 μm . Comme on peut le voir, Si/ $\text{Si}_{0.2}\text{Ge}_{0.8}$ produit un grand courant de court-circuit d'environ 20.63 mA/cm^2 par rapport à la cellule solaire p-i-n à NFs cœur/coquille de Si d'environ 20 mA/cm^2 . Pour la cellule solaire p-i-n à NFs cœur/coquille Si/ $\text{Si}_{0.2}\text{Ge}_{0.8}$, le courant de court-circuit augmente avec la longueur de NF jusqu'à 10 μm , au-delà de cette longueur, le courant de court-circuit est diminué et la courbe J-V commence à avoir des perturbations sur sa forme. Les paramètres caractéristiques extraits de la cellule solaire à NF sont listés dans le tableau (3.13). Dans le tableau, il est clair que le rendement de conversion de la cellule solaire p-i-n à NFs cœur/coquille Si/ $\text{Si}_{0.2}\text{Ge}_{0.8}$ est plus grande que l'autre. La cellule solaire p-i-n à NFs cœur/coquille Si/ $\text{Si}_{0.2}\text{Ge}_{0.8}$ atteint une valeur maximale d'efficacité d'environ 10.46 % à une longueur de 10 μm . Si nous dépassons cette valeur, nous obtenons une dégradation du rendement. Cette étude nous a permis de prouver l'avantage de mélanger la coquille de silicium de la structure p-i-n à NFs cœur/coquille de Si avec le germanium et d'optimiser la longueur de la cellule solaire p-i-n à NFs cœur/coquille de Si/ $\text{Si}_{0.2}\text{Ge}_{0.8}$.

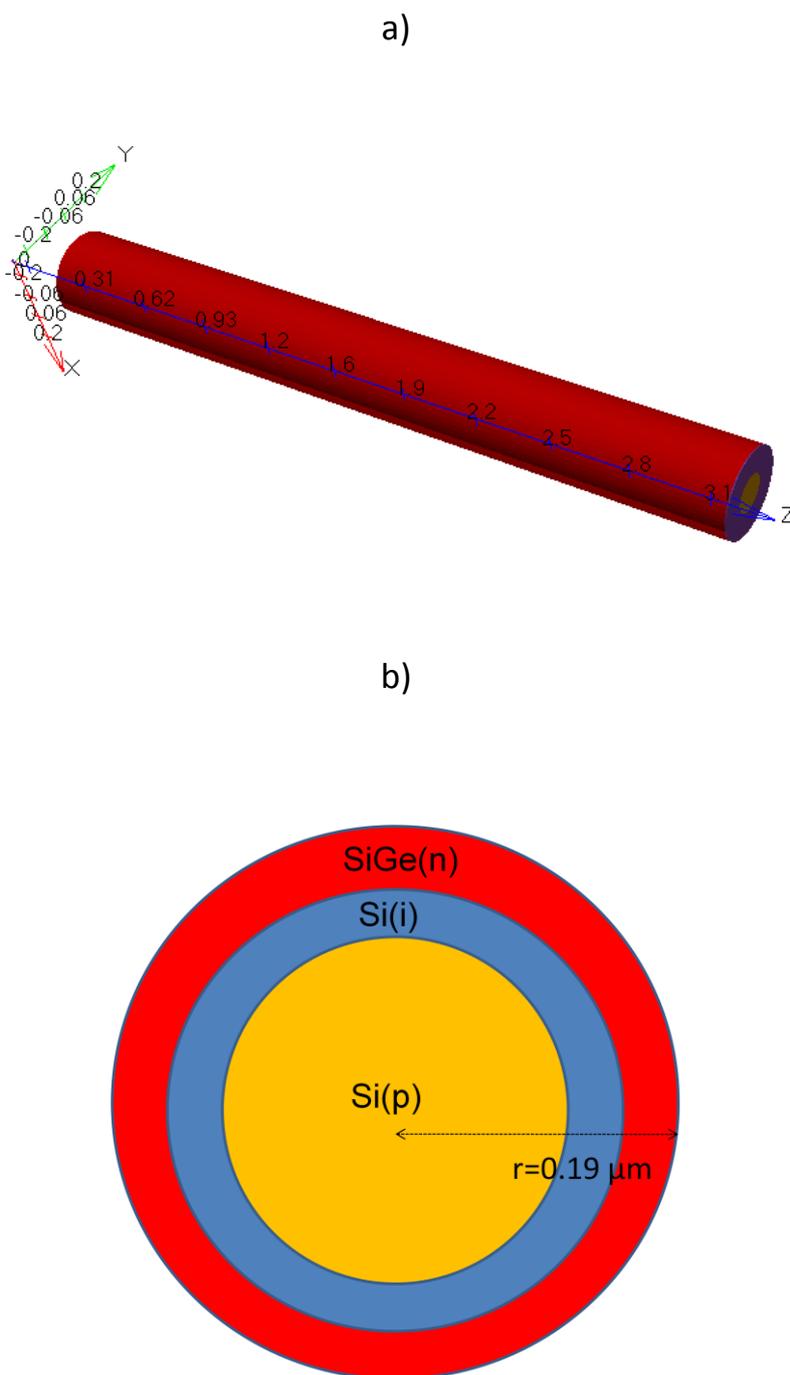


Figure 3.63 : (a) Structure 3D de la cellule solaire p-i-n à NFs cœur/coquille Si/SiGe, (b) face avant de la structure [108].

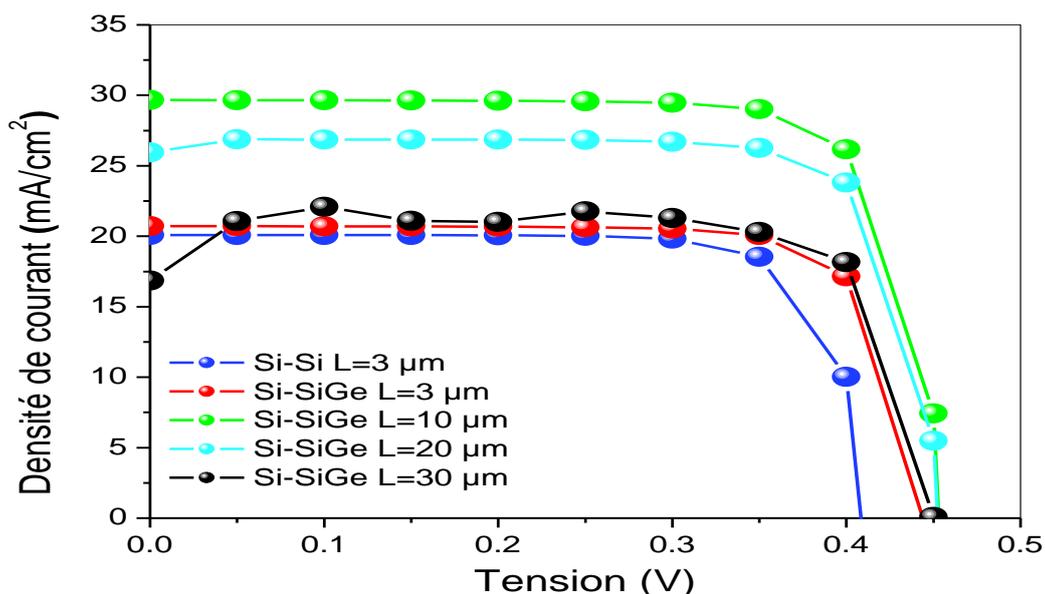


Figure 3.64 : Caractéristique J-V de la cellule solaire p-i-n à NFs cœur/coquille de Si et Si/Si_{0.2}Ge_{0.8} pour plusieurs longueurs et un rayon fixe de $r=0.19 \mu\text{m}$ [108].

Tableau 3.13 : Paramètres caractéristiques d'une cellule solaire p-i-n à NFs cœur/coquille de Si et Si/Si_{0.2}Ge_{0.8} pour plusieurs longueurs et un rayon fixe de $r=0.19 \mu\text{m}$.

Structure	Longueur de NFs, L (μm)	J_{cc} (mA/cm^2)	V_{co} (V)	FF (%)	η (%)
Si	3	20.02	0.4	80.91	6.48
Si/ Si _{0.2} Ge _{0.8}	3	20.63	0.44	77.44	7.03
	10	29.63	0.45	78.44	10.46
	20	25.93	0.45	81.50	9.51
	30	16.84	0.45	95.80	7.26

La figure (3.65) présente l'efficacité quantique externe (EQE) en fonction de la longueur d'onde à la fois de la cellule solaire p-i-n à NFs cœur/coquille de Si et Si/Si_{0.2}Ge_{0.8} pour plusieurs longueurs: 3 μm, 10 μm, 20 μm, et 30 μm avec rayon fixe de 0.19 μm. Il est clair que EQE de la cellule solaire p-i-n à NFs cœur/coquille de Si a un maximum d'environ 76% à la longueur d'onde de 600 nm, et il devient nul autour de la longueur d'onde de 1100 nm. Le remplacement de la coquille de silicium par Si_{0.2}Ge_{0.8} permet de favoriser de manière significative l'absorption de photons dans la gamme de 1100 nm à 1200 nm de longueurs d'ondes avec un gain d'environ 34% d'EQE est obtenu en utilisant une longueur de 10 μm. Cependant, le maximum d'EQE diminue avec la longueur croissante de nanofils.

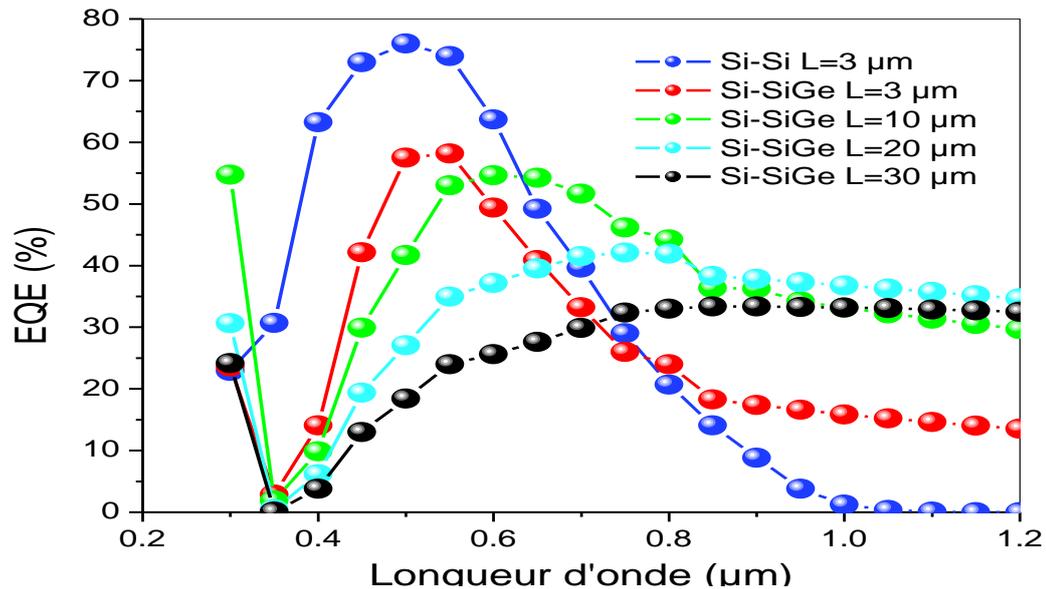
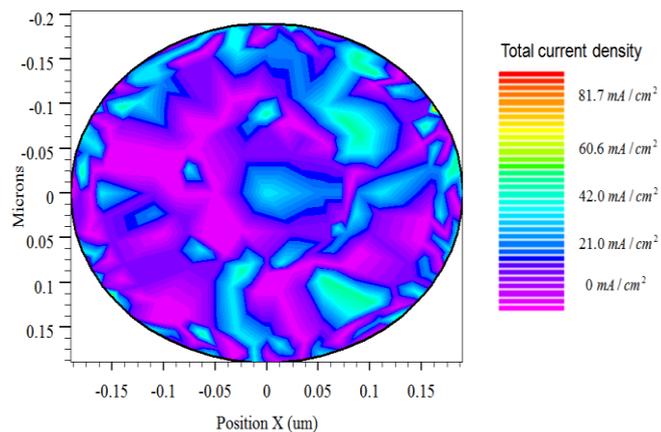


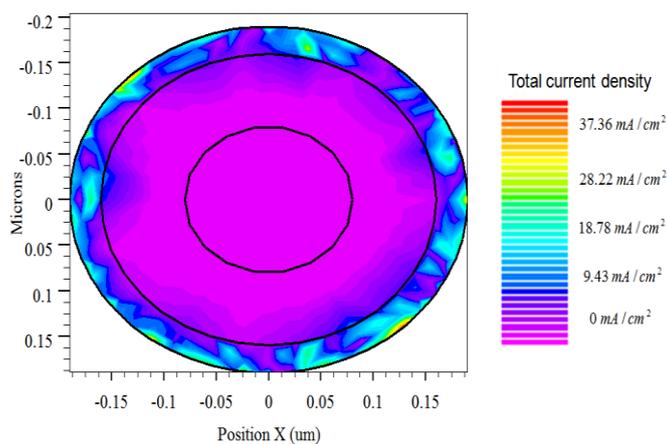
Figure 3.65 : EQE de la cellule solaire p-i-n à NFs cœur/coquille de Si et Si/Si_{0,2}Ge_{0,8} pour plusieurs longueurs et un rayon fixe de $r=0.19 \mu\text{m}$ [108].

La figure (3.66) représente la répartition spatiale de la densité de courant totale de la cellule solaire p-i-n à NFs cœur/coquille de Si/Si_{0,2}Ge_{0,8} dans trois positions: (a) au contact supérieur, (b) au milieu et (c) au contact inférieur, avec une longueur de $10 \mu\text{m}$ et un rayon fixe de $0.19 \mu\text{m}$. Il est évident que le maximum de la densité de courant totale est situé au contact en avant de la structure, comme le montre la figure (3.66.a). De la figure (3.66.b), la densité de courant totale est plus élevée dans la coquille Si_{0,2}Ge_{0,8} et à l'interface entre Si_{0,2}Ge_{0,8} et la région intrinsèque. Tout d'abord, les photons incidents sont absorbés par le cœur de silicium créant des paires électron-trou. Les électrons photogénérés sont accumulés sur la coquille et sur l'interface coquille/région intrinsèque, puis ils sont déplacés le long de l'axe z du nanofil (figure (3.66.a)) et collectés par l'électrode de la coquille (électrode en avant). Les trous photogénérés restent dans le cœur et sont recueillis par électrode de cœur (électrode en arrière, figure (3.66.c)).

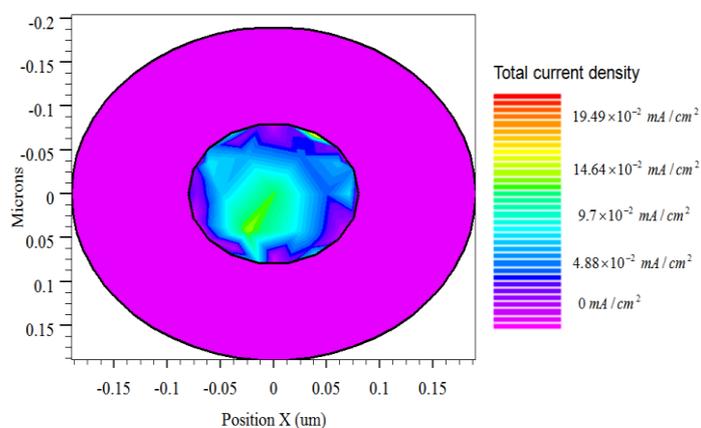
La figure (3.67) montre la caractéristique J-V de la cellule solaire p-i-n à NFs cœur/coquille de Si/Si_{0,2}Ge_{0,8} pour plusieurs rayons: $0.19 \mu\text{m}$, $0.28 \mu\text{m}$, $0.38 \mu\text{m}$, $0.48 \mu\text{m}$ et $0.57 \mu\text{m}$ avec une longueur optimale précédemment trouvée $L=10 \mu\text{m}$. Il est évident que la structure Si/Si_{0,2}Ge_{0,8} avec un rayon de $0.28 \mu\text{m}$ produit un grand courant de court-circuit par comparaison aux autres rayons. Les paramètres caractéristiques extraits de la cellule solaire à NF pour plusieurs rayons sont résumés dans le tableau (3.14).



(a)



(b)



(c)

Figure 3.66 :Distribution spatiale de la densité du courant totale de la cellule solaire p-i-n à NFs cœur/coquille de Si/Si_{0.2}Ge_{0.8} obtenu pour des concentrations de dopage $N_D=5 \times 10^{17}$ cm⁻³ et $N_A=4 \times 10^{16}$ cm⁻³ de Si_{0.2}Ge_{0.8} et Si, respectivement. Structure simulé a un rayon de 0.19 μm et une longueur de 10 μm. (a) densité du courant totale dans le contact en avant, (b) dans le milieu et (c) dans le contact en arrière [108].

À partir de ce tableau, il est clair que la structure avec un rayon de $0.28 \mu\text{m}$ atteint une valeur maximale du rendement de conversion d'environ 13.23%. En dépassant ce rayon, le rendement de conversion et le courant de court-circuit commencent à diminuer. Cette étude nous a permis d'améliorer le rayon de la cellule solaire p-i-n à NFs cœur/coquille de

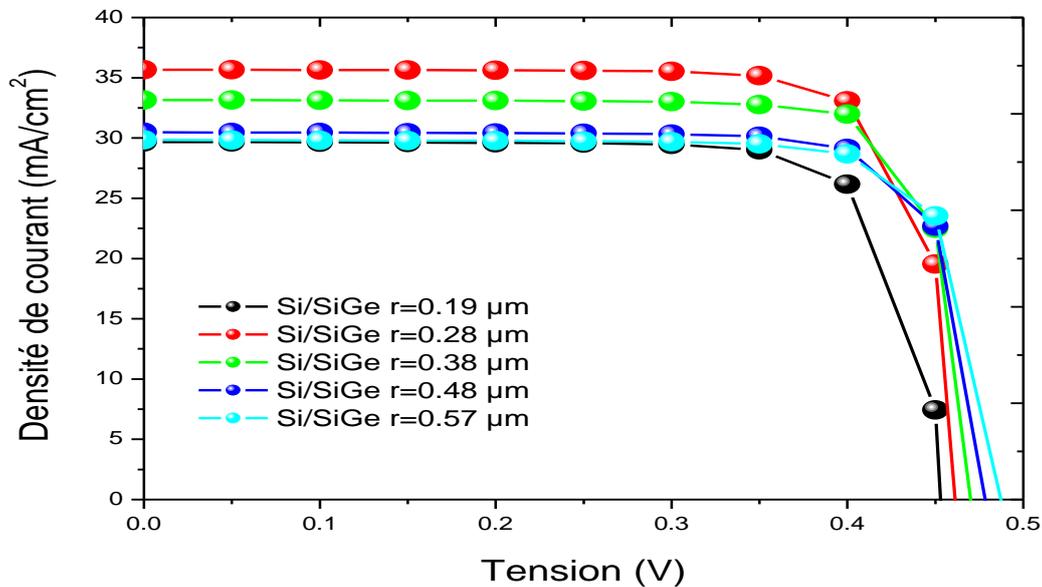


Figure 3.67 : Caractéristique J-V de la cellule solaire p-i-n à NFs cœur/coquille de $\text{Si}/\text{Si}_{0.2}\text{Ge}_{0.8}$ pour plusieurs rayons et une longueur optimale fixe $L=10 \mu\text{m}$ [108].

Tableau 3.14 : Paramètres caractéristiques d'une cellule solaire p-i-n à NFs cœur/coquille de $\text{Si}/\text{Si}_{0.2}\text{Ge}_{0.8}$ pour plusieurs rayons et une longueur optimale fixe $L=10 \mu\text{m}$.

Rayon de NFs, r (μm)	J_{cc} (mA/cm^2)	V_{co} (V)	FF (%)	η (%)
0.19	29.63	0.45	78.44	10.46
0.28	35.67	0.46	80.63	13.23
0.38	34.54	0.47	77.30	12.55
0.48	30.47	0.48	79.65	11.65
0.57	29.72	0.48	80.40	11.47

La figure (3.68) montre l'EQE en fonction de la longueur d'onde de la cellule solaire p-i-n à NFs cœur/coquille de $\text{Si}/\text{Si}_{0.2}\text{Ge}_{0.8}$ pour plusieurs rayons: $0.19 \mu\text{m}$, $0.28 \mu\text{m}$, $0.38 \mu\text{m}$, $0.48 \mu\text{m}$ and $0.57 \mu\text{m}$ avec une longueur optimale précédemment trouvée $L=10 \mu\text{m}$. On observe qu'avec un rayon de $0.28 \mu\text{m}$ nous obtenons une amélioration élevée de l'EQE. Par exemple, à la longueur d'onde 600 nm , la valeur maximale d'EQE est de 58%, ce qui signifie une

amélioration relative d'environ 7.4% par rapport à la structure standard avec un rayon de 0.19 μm . Au-delà de ce rayon, le maximum d'EQE diminue. Cependant, à la plage de longueurs d'ondes de 1100 nm à 1200 nm, l'EQE de la structure avec un rayon de 0.19 μm atteint un gain de $\Delta\text{EQE} = 9.17\%$ en utilisant un rayon de 0.28 μm . Cette séquence de l'étude nous a permis d'améliorer l'EQE de la cellule solaire p-i-n à NFs cœur/coquille de Si/Si_{0.2}Ge_{0.8} en trouvant le rayon optimal.

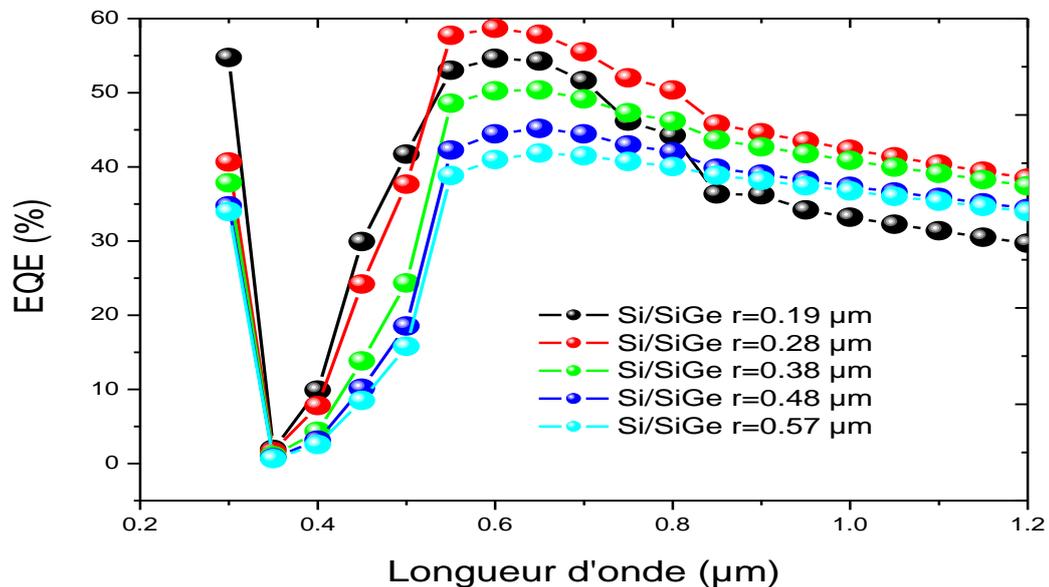


Figure 3.68 : EQE de la cellule solaire p-i-n à NFs cœur/coquille de Si/Si_{0.2}Ge_{0.8} pour plusieurs rayons et une longueur optimale fixe $L=10 \mu\text{m}$ [108].

3.4. Comparaison entre les différentes cellules solaires nanostructures quantiques étudiés :

Après avoir étudié les différentes structures de cellules solaires à nanostructures quantiques, nous avons essayé dans cette section de faire une comparaison entre ces derniers dans le but de sélectionner les meilleurs. Notez que la comparaison a été faite au niveau du rendement de la conversion calculé de différentes structures.

- La comparaison entre la cellule solaire à BQs GaSb/GaAs de la section 3.3.1 et la cellule solaire à BQs InSb/GaAs de la section 3.3.2 nous a permis de sélectionner la première structure à BQs GaSb/GaAs comme la meilleure structure tout simplement parceque elle donne un meilleur rendement de conversion de l'ordre de 22.42 % par rapport à 15.4 % obtenu par la structure à BQs InSb/GaAs avec 20 couches de BQs.
- La comparaison de notre travail rapporté dans la section 3.3.3 sur la cellule solaire à BQs InAsP/GaAs et le travail de la section 3.3.8 de la même structure mais avec des

PQs InAsP/GaAs nous a laissé de choisir la première structure comme la bonne structure puisque elle offre plus d'avantages et un rendement de conversion d'environ 16.6% en utilisant 20 couches de BQs par rapport à 15.54 % obtenu par la deuxième structure. En plus, cette comparaison affirme l'intérêt de l'utilisation de BQs pour améliorer les performances des cellules solaires conventionnelles par rapport aux PQs grâce à le degré de confinement fort des porteurs de charges qu'ils présentent.

- La comparaison faite entre l'étude de la partie 3.3.3 sur la cellule solaire à BQs InAsP/GaAs et celle faite sur la même structure mais avec un matériau barrière qui est le Silicium dans la partie 3.3.4 nous a montré l'avantage d'utiliser GaAs comme un matériau barrière et substrat pour ces configurations.
- La comparaison faite entre le travail de la section 3.3.5 et ce de la section 3.3.7 sur la structure InGaN/GaN, nous a montré que le nombre maximal de BQs ou bien de PQs à ne pas dépasser pour toute amélioration du rendement de conversion de ce type de structure est cinq couches ou périodes de InGaN (BQ ou PQ)/GaN (barrière).

3.5. Conclusion :

Dans ce chapitre les différentes structures de cellules solaires à nanostructures : BQs, PQs et NFs à base de nouveaux matériaux ont été simulés et optimisés dans l'environnement SILVACO ATLAS. Suites à ces simulations et à la comparaison faite entre les différentes structures, nous sommes arrivés à montrer l'utilité des nanostructures quantiques pour améliorer les performances électriques et optiques d'une cellule solaire conventionnelle et à sélectionner les bons matériaux nanostructures et barrières. Nous avons vu que l'utilisation du GaAs comme un matériau barrière et substrat est un très bon choix pour former les cellules solaires à nanostructures quantiques grâce à la facilité de la croissance sur GaAs et ses propriétés excellentes. Concernant les matériaux nanostructures, nous avons trouvé que le GaSb est l'excellent matériau binaire BQ à employer sur une matrice de GaAs, avec un rendement de conversion de 22.46 % obtenu. InAsP est le bon matériau parmi les autres matériaux III-V étudiés qui donne un meilleur rendement de conversion de 16.6 % si on le croît sur le GaAs. Pour la structure InGaN/GaN, nous avons vu que le nombre de couches ou bien périodes maximal ne doit pas dépasser cinq couches ou bien périodes pour avoir un rendement de conversion optimal. Au delà de ce nombre, nous avons vu une dégradation de la performance de la cellule. Avec cinq couches de BQs d' $\text{In}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}/\text{GaN}$ nous avons obtenu un rendement de conversion de 19.61 %. A la fin de ce chapitre une nouvelle structure à

nanofil cœur/coquille de Si/SiGe a été optimisée par l'étude de la variation de ses paramètres géométriques. Dans ce contexte, nous avons trouvé qu'avec une longueur de nanofils de 10 μm et un rayon fixe de 0.19 μm le rendement de conversion de la cellule solaire à NFs de Si/Si a augmenté de 6.48 % à 10.46 %. En addition, qu'avec cette longueur optimale de NFs et un rayon de 0.28 μm , le rendement de conversion a remonté de 10.46 % à 13.23 %. Dans le chapitre suivant nous allons présenter le travail expérimental sur la réalisation des nanofils cœur/coquille de Si/SiO₂ qu'on a effectué dans l'équipe Nanostructures Semi-conductrices Epitaxies NSE de laboratoire IM2NP, à l'université d'Aix-Marseille en 2016.

CHAPITRE 4

REALISATION ET METALLISATION DES NANOFILS

CŒUR/COQUILLE Si/SiO₂

4.1. Introduction :

Ce chapitre montre le travail pratique effectué au sein de l'équipe Nanostructures Semi-conductrices Epitaxiées (NSE) de l'Institut Matériaux Microélectronique Nanosciences de Provence IM2NP UMR CNRS 7334 d'universités d'Aix-Marseille et de Toulon. NSE s'intéresse au développement de nouveaux procédés qui combinent la croissance par épitaxie et la nanostructuration des substrats pour contrôler la croissance, la composition, la contrainte et l'organisation de nanostructures à base de Si et SiGe, pour différents domaines d'application (nanoélectronique, nanophotonique,...) . Ces nanostructures sont modélisées, fabriquées dans l'équipe NSE, puis caractérisées par différentes techniques au sein de l'IM2NP et en collaboration avec d'autres laboratoires. A cause de la courte durée de notre stage qui était trois mois seulement, on n'a pas pu travailler sur les BQs qui nécessitent une formation assez profonde et longue sur le dispositif MBE. C'est pour ça au cours de notre stage, nous nous sommes intéressés à développer des procédés de fabrication d'un autre type de nanostructure intéressant qui sont les nanofils NFs cœur/coquille de Si/SiO₂ en utilisant un instrument de nanogravure qui s'appelle FIB : Focused Ion Beam, qui travaille avec deux sources d'ions l'un de l'or Au⁺ et l'autre de silicium Si⁺⁺ et la réalisation de contacts métalliques à différentes échelles en vue de leur caractérisations électriques. Dans ce but, nous allons présenter tout d'abord les différentes méthodes expérimentales utilisées pour la fabrication et la caractérisation des NFs cœur/coquille Si/SiO₂. Par la suite les procédés de fabrication des échantillons seront décrits. Enfin, la mise des contacts métalliques aux ces NFs par lithographie laser sera montré.

4.2. Méthodes expérimentales :

4.2.1. Faisceau d'ions focalisé (FIB) :

Les systèmes FIB (figure (4.1)) utilisent un faisceau d'ions (généralement Ga⁺) focalisé ayant un diamètre inférieur à 7 nm et accéléré à des énergies allant jusqu'à 50 keV. Ces systèmes peuvent graver des lignes d'une largeur minimale de 2.5 nm [109][110]. Le FIB

utilise une source d'ions à métal liquide (LMIS pour Liquid Metal Ion Source). Ce type de source est constitué d'un réservoir de métal liquide maintenu à l'extrémité d'une pointe généralement en tungstène (figure (4.2)). Le métal mouille la pointe et coule jusqu'à l'extrémité qui se trouve en face d'une ouverture pour permettre l'extraction.

Une différence de potentiel est appliquée entre la pointe et l'ouverture. Sous l'influence du champ électrique le métal liquide prend une forme conique avec un angle très pointu ; les ions sont émis par le sommet de ce cône. Le rayon au sommet du cône est inférieur à 10 nm, cependant la taille effective de la source est plus importante à cause de la répulsion mutuelle entre les ions. Le métal liquide utilisé doit pouvoir mouiller la pointe sans la corroder et avoir une faible pression de vapeur quand il est fondu. Des sources d'alliages peuvent également être utilisées, dans ce cas le FIB doit être équipé d'un filtre de masse pour sélectionner un type d'ion, ce qui est le cas pour notre système. Nous avons utilisé dans ce travail une source AuSi. Avec ce système on peut utiliser l'un ou l'autre ion selon l'application visée, et on peut éviter par exemple une contamination du silicium par du Ga, utilisé classiquement en FIB.

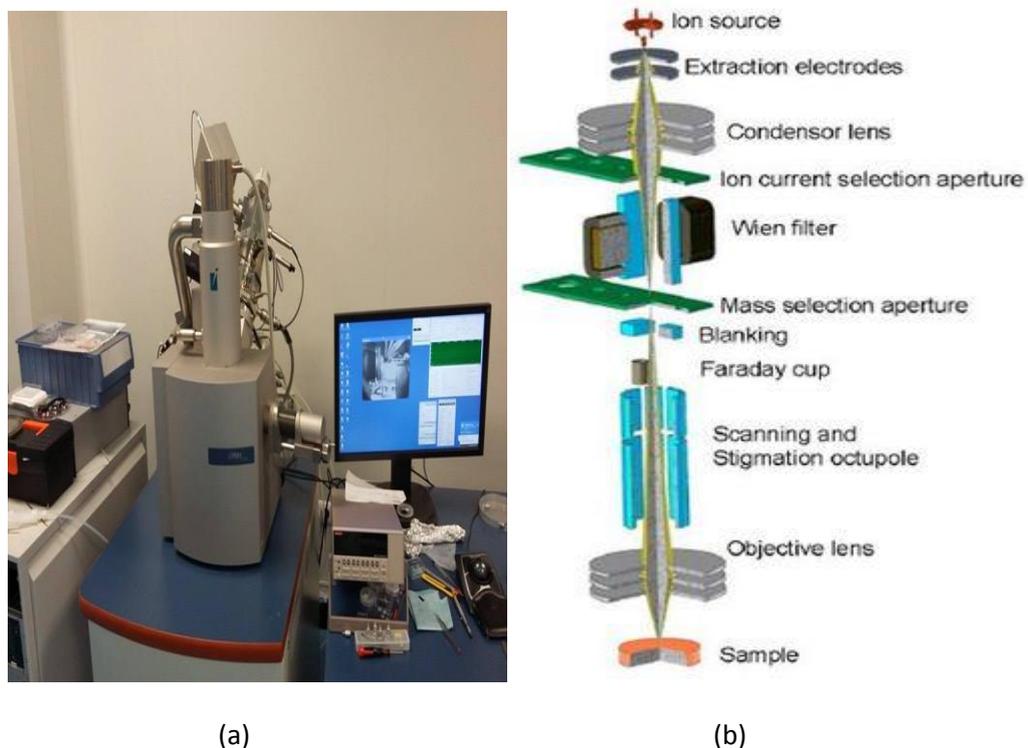


Figure 4.1 : (a) photographie de la colonne TESCAN Lyra1 XMU de l'équipe NSE de l'IM2NP possédant à la fois un faisceau électrons et un faisceau d'ions filtré en masse ; (b) représentation schématique des principaux composants d'une colonne ionique avec un filtre de masse.

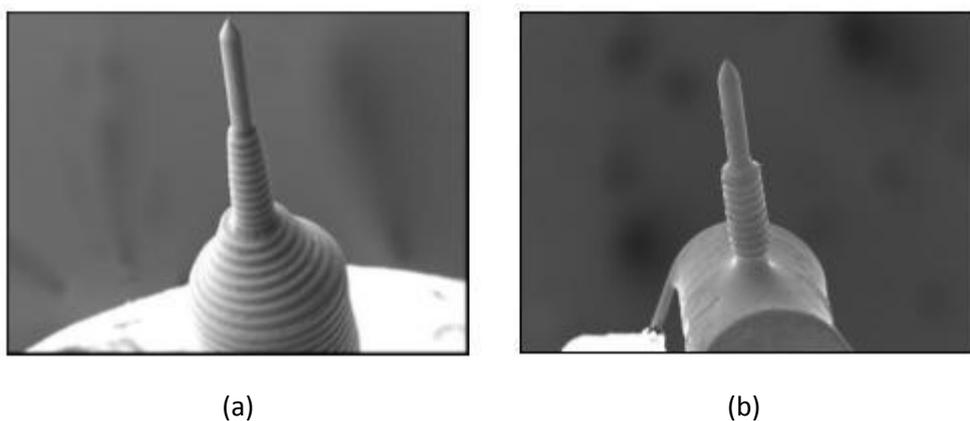


Figure 4.2 : Images SEM d'une source Ga (a) et d'une source Au-Si (b).

Dans le filtre de masse (figure (4.3)), les ions sont déviés en fonction de leur masse. Lorsque $m=m_0$, la trajectoire est rectiligne ; lorsque $m = m_0+\Delta m$ le faisceau est dévié d'une distance x définie par [111] :

$$x = \frac{1}{4} \cdot \frac{V}{V_0} \cdot \frac{L}{d} \cdot \left(\frac{L}{2} + D \right) \cdot \frac{\Delta m}{m} \quad (4.1)$$

Sachant que la déviation dépend de :

$$\frac{E}{B} = v \Leftrightarrow \sqrt{\frac{2qV_0}{m_0}} = \frac{V}{dB} \quad (4.2)$$

Avec E et B sont les champs électrique et magnétique, respectivement.

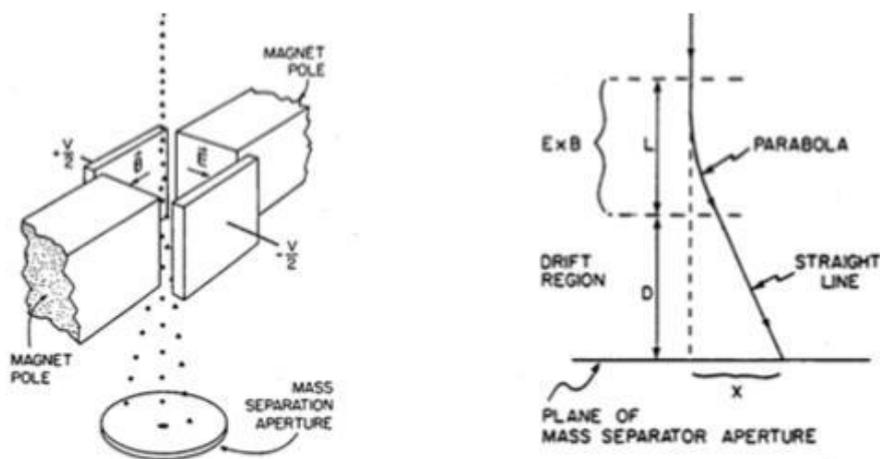


Figure 4.3 : Schéma montrant la méthode de séparation des ions en fonction de la masse des ions en utilisant un filtre de masse [112].

Les principaux éléments pour la focalisation du faisceau sont illustrés par le schéma de principe de la colonne FIB (condenseur, diaphragmes, octopole, et lentille objectif) dans la figure (4.1). Les phénomènes physiques les plus importants qui ont lieu lors de l'interaction ions/matière sont [109][110]:

- la pulvérisation d'atomes neutres et ionisés qui provoque la gravure ;
- l'émission d'électrons qui permettent d'imager la surface ; ils peuvent être responsables du chargement de l'échantillon lorsque celui-ci est isolant ;
- le déplacement des atomes dans l'échantillon qui cause des défauts étendus et qui induit la formation d'une couche amorphe pour un solide cristallin ;
- l'émission de phonons qui sont responsables de l'échauffement de l'échantillon ;
- l'implantation des ions incidents. Le rendement de la gravure qui est défini comme le nombre d'atomes du substrat éjectés par les ions incidents dépend de l'angle d'incidence des ions ϕ : il augmente avec $1/\cos \phi$ (ϕ angle entre la normale à la surface et la direction des ions incidents).
- Pour un matériau donné, la profondeur de gravure dépend du temps de résidence du faisceau en un point de la surface (dwell time), du courant du faisceau et de l'énergie et de l'incidence des ions.

L'intérêt de cette technique est de ne pas nécessiter de masque et donc de permettre de graver directement des motifs libres et à volonté, juste en balayant la surface à graver par le faisceau d'ions. Dans ce travail, nous avons gravé des zones allant jusqu'à $400 \times 400 \mu\text{m}^2$ (maximum de la fenêtre FIB). Des motifs de repérage ou d'alignement des zones gravées sont généralement réalisés, en utilisant soit une pointe diamant soit à nouveau une gravure FIB macroscopique.

Notre système FIB est également un système d'injection de Gaz (GIS) microlocalisé (5 injecteurs de précurseurs pour W, Pt, SiO₂, XeF₂, et un libre) comme montre la figure (4.4). Il nous permet de faire des dépôts à l'échelle locale induit par FIB, avec l'injection du gaz précurseur dans la chambre FIB, le gaz s'absorbe sur le substrat absorbe et en balayant la surface ciblée avec le faisceau, le gaz se décompose en éléments volatils et non-volatils, la composante volatile elle se vaporise alors que la composante non-volatile reste déposé en surface [109][110]. Cette application nous permettra d'adresser avec des contacts métalliques à l'échelle nanométrique les NFs.



Figure 4.4 : Schéma d'injection de gaz GIS de l'équipe NSE de l'institut IM2NP. (a) colonne de GIS à l'intérieur de la chambre à vide de FIB ; (b) réservoir du GIS à l'extérieur de la chambre.

4.2.2. Microscopie électronique à balayage MEB (SEM scanning electron microscopy) :

Le principe de fonctionnement du MEB est basé sur l'émission d'électrons générés par une source (cathode) et la détection des signaux provenant de l'interaction de ces électrons avec l'échantillon pour former l'image d'un objet. Sous vide, les électrons sont accélérés sous une tension dans une colonne, afin de pénétrer profondément dans l'échantillon situé dans une chambre contenant les détecteurs. Les électrons du faisceau vont perdre leur énergie à cause des collisions multiples avec le matériau et génèrent de nombreux phénomènes (figure (4.5)) :

- Absorption d'électrons.
- Elévation de la température locale.
- Réémission d'électrons et photons.
- Vibration du réseau.

En générale le MEB contient trois capteurs, un pour les électrons secondaire, un pour les rayons X et un pour les électrons rétrodiffusés. Les émissions non détectées vont être dissipées dans les parois de la chambre d'échantillon ou sont mises à la terre.

- Les électrons secondaires ont une faible énergie (<50 eV), sont créés par le passage d'électron incident près d'un atome, qui peut transmettre une partie de son énergie à un ou plusieurs électrons de la bande de conduction et provoque une ionisation

par éjection de ces derniers. Seul les électrons créés proche à la surface (<10nm) peuvent sortir de l'échantillon pour être captés par le détecteur. La densité des électrons secondaires collectés varie en fonction de la topographie d'échantillon et donne des informations sur la surface de ce dernier.

- Une partie d'électrons du faisceau incident va être rejetés de façon élastique après collision avec les noyaux d'atomes de l'échantillon, ces électrons rétrodiffusion propagent dans toutes les directions avec une faible perte d'énergie et sont densité augmente avec le numéro atomique des atomes constituant la cible. Ce type d'irradiation peut fournir des informations sur une large profondeur contrairement aux électrons secondaires qui sont créés à la surface.

Lorsqu'un électron d'une couche profonde d'un atome est éjecté par le faisceau d'électron incident, un électron d'une couche supérieure comble le vide causé par cette éjection. Ces transitions des électrons provoquent l'émission des rayons X qui vont être captés et classés suivant sa longueur d'onde pour donner des informations sur la composition de l'échantillon.

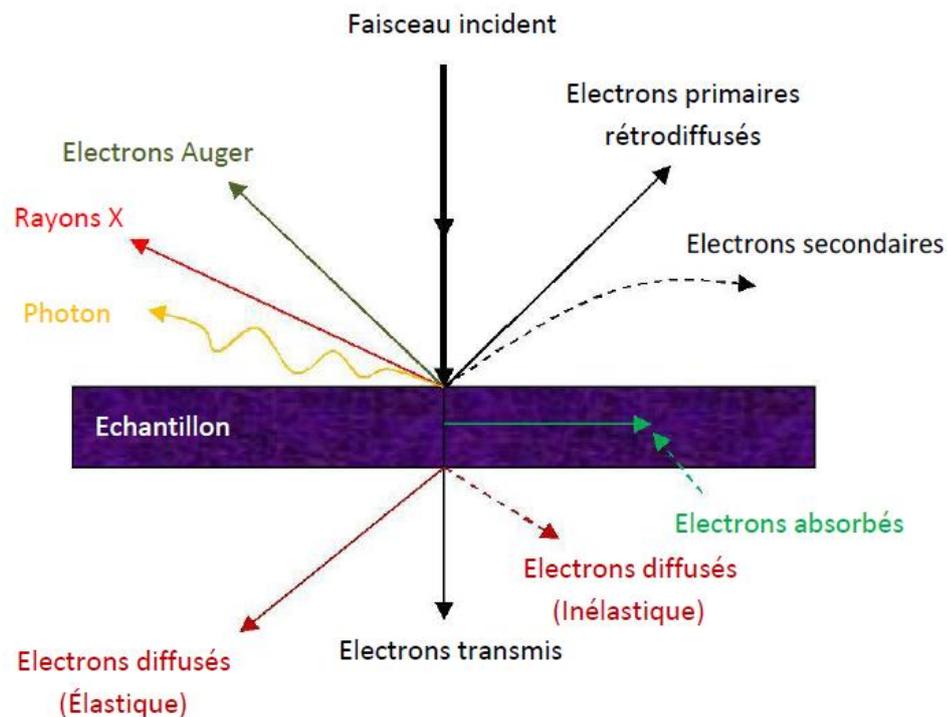


Figure 4.5 : Irradiations émises lors de l'interaction entre le faisceau d'électrons et l'échantillon [113].

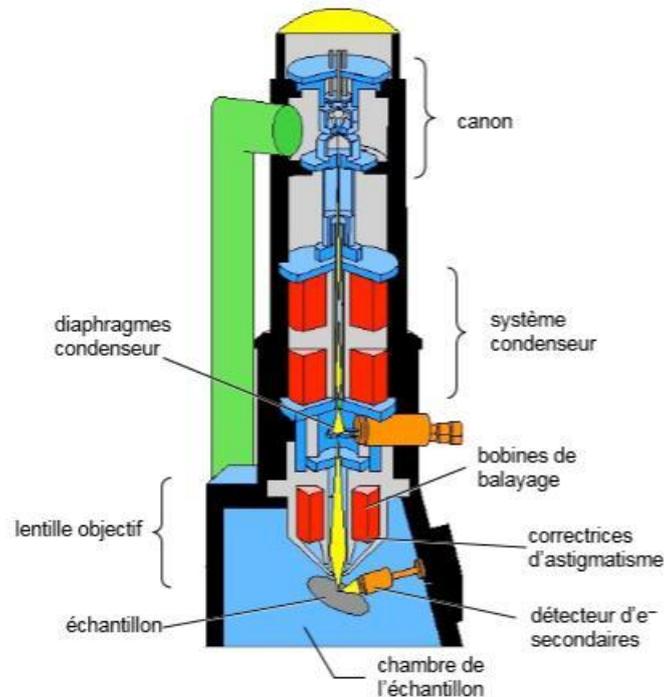


Figure 4.6 : Schéma synoptique d'un microscope électronique à balayage [114].

Le MEB est composé de deux parties essentielles comme il est clair dans la figure (4.6), canon à électron qui sert à extraire les électrons du matériau par l'effet thermoïonique et les accélérer sous forme d'un faisceau vers la colonne. Dans cette dernière le faisceau passe par une série de bobines et condensateurs afin d'atteindre l'échantillon situé dans une chambre à vide, une première bobine permet l'alignement du faisceau d'électrons primaires dans l'axe optique Z du microscope. Un double condensateur qui jouent le rôle d'une lentille convergente pour focaliser le faisceau sur un diaphragme afin d'avoir un spot très fin. A la sortie de diaphragme une deuxième lentille objectif refocalise le spot résultant sur l'objet, un déflecteur comporte des bobines électromagnétique qui assurent le déplacement du spot d'électrons primaires selon les axes X, Y. Ce balayage est synchronisé avec un écran de visualisation, et l'image est reconstitué point par point sur une ligne horizontale et ligne par ligne sur un plan vertical (X, Y).

Grace au dual beam (FIB/SEM) qui dispose deux type de détecteurs un pour les électrons rétrodiffusés et un autre pour les électrons secondaires, on a pu graver des paquets de nanofils de différents diamètres avec la colonne ionique et contrôler ces gravures via la colonne électronique.

4.2.3. Microscopie à force atomique (AFM atomic force microscopy):

Pour visualiser une surface d'un échantillon, la microscopie à force atomique (figure (4.7)) représente des images à haute résolutions, son principe de fonctionnement est basé sur les interactions (attraction/répulsion) entre les atomes de la surface d'échantillon et les atomes du sommet d'une pointe qui balaie la surface de ce dernier afin de construire une image de surface (figure (4.8)). La pointe fine est fixée à l'extrémité libre d'un nano levier flexible et grâce à un tube piézoélectrique, la pointe et le levier flexible peuvent se déplacer dans toutes les directions de l'espace. Au balayage, les flexions du levier permettent de mesurer les forces d'interaction, définir la topographie de la surface il y a trois façons d'utilisation de la pointe : mode contact, mode contact intermittent et mode non-contact.

❖ Mode contact :

Dans le mode contact, la pointe est appuyée sur la surface, et suivant la loi de Wolfgang Paul qui proposera que les électrons peuvent pas se retrouve dans le même endroit le même état quantique, du coup la pointe est repoussée et le levier se dévier. La rétroaction s'effectue sur la mesure de la direction de la déviation.

❖ Mode contact intermittent :

Dans le mode contact intermittent, le levier est vibré par un signal de fréquence égale à sa fréquence propre de résonance, l'interaction entre la pointe et la surface d'échantillon, change l'amplitude de vibration du levier, car la fréquence s'éloigne de la résonance. La rétroaction se fait alors sur l'amplitude d'oscillation du levier.

❖ Mode non-contact :

Dans le mode non-contact, la pointe est mise à une distance importante, ou les forces attractives sont très faibles, donc il faut préférablement travailler au froid et sous vide pour éviter l'humidité et l'agitation thermique. La rétroaction s'effectue sur la déviation de la fréquence de résonance.

Avec cette technique, on a pu déterminer la hauteur, la profondeur des gravures et le diamètre des nanofils qui est un paramètre très important pour déterminer les propriétés de transport dans les nanofils. Ainsi, on a pu de caractériser les contacts métalliques qu'on a réalisé par lithographie laser.

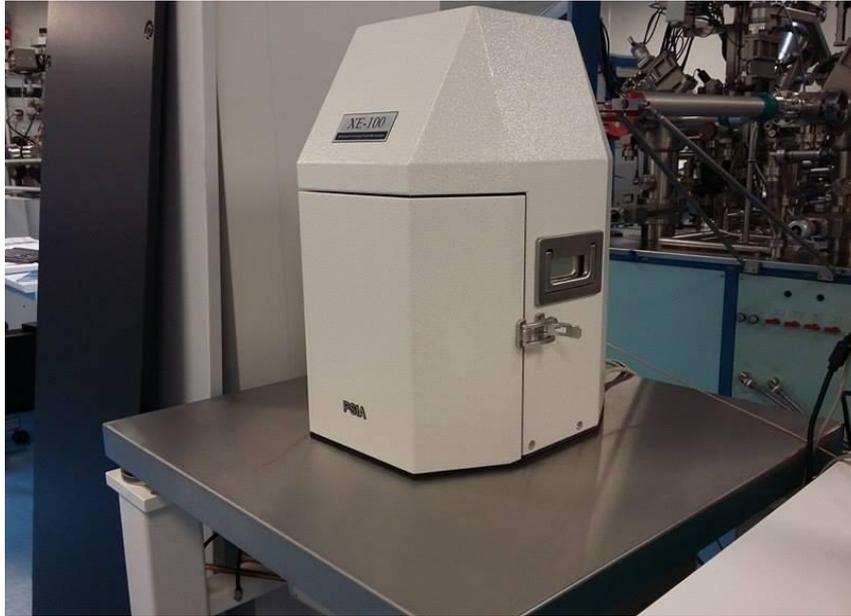


Figure 4.7 : Microscopie à force atomique (AFM) de type XE-100 PSIA de l'équipe NSE de l'institut IM2NP.

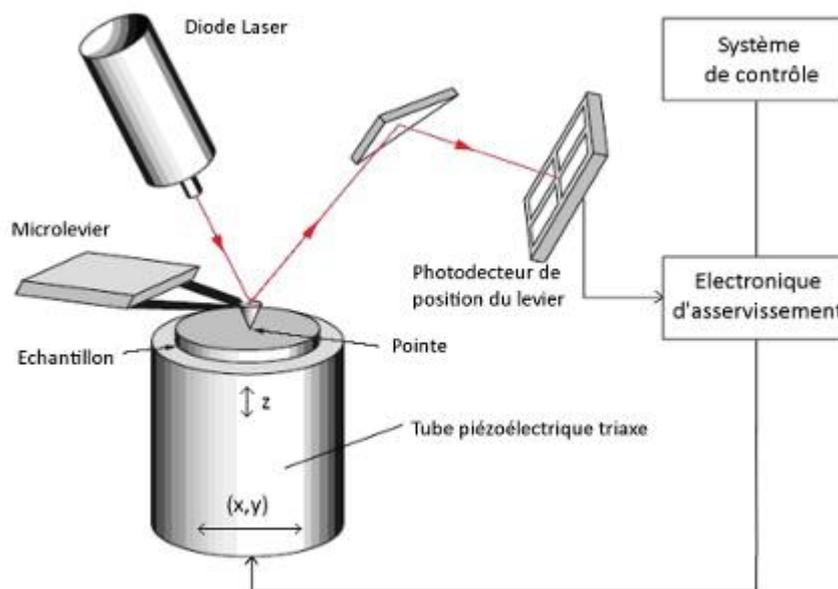


Figure 4.8 : Schéma de fonctionnement d'un microscope à force atomique [115].

4.2.4. Oxydation Thermique Rapids (RTO):

L'oxydation thermique est un procédé qui utilise l'énergie thermique pour oxyder des substances. Les buts de ce type de procédé sont assez divers : destruction de substances dangereuses avec formation de substances inertes, production d'énergie (l'oxydation est en général une réaction exothermique), traitement de surface afin de modifier les propriétés d'un matériau, etc. Avec cette machine on a pu de réaliser des couches mince d'oxyde SiO_2 utile

pour éviter l'amorphisation de la surface de l'échantillon lors la gravure par FIB et qui servent ainsi comme la couche coquille.

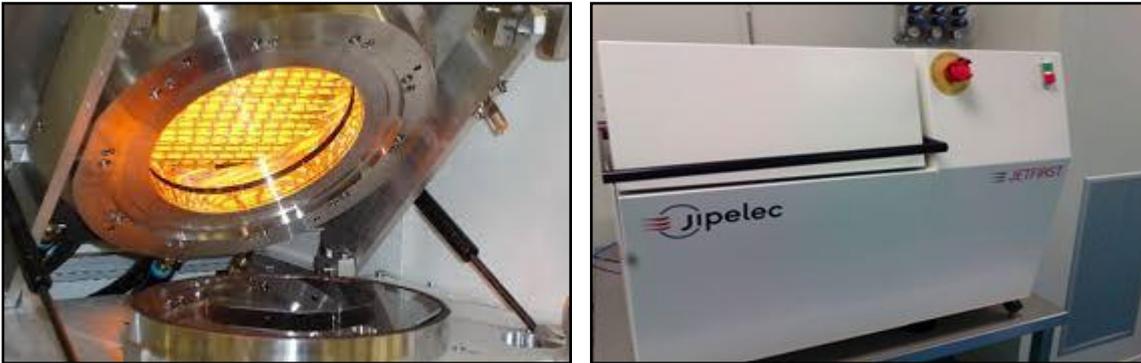


Figure 4.9 : Partie intérieure et extérieure de la machine RTO de type Jipelec Jetfirst de l'équipe NSE de l'institut IM2NP.

4.2.5. Lithographie laser:

Pour réaliser les contacts macroscopiques on a eu recours à la lithographie laser. Le dispositif qui permet de réaliser cette tâche au laboratoire est le Dilase 250 (Société KLOE de Montpellier France). Le système est constitué de platines linéaires motorisées de 100 mm de course sur les deux axes X et Y, avec des résolutions de déplacement sub-micrométrique. L'équipement est équipé d'une source laser à diode en standard. Le laser à diode émettant à 375 nm, 70 mW. Les systèmes Dilase sont tous équipés de deux modes d'écriture : mode scanning et mode Vectoriel et il est équipé de deux logiciels (Kloé Design et Dilase Soft) qui permettent le dessin des motifs et leur réalisation. L'avantage de la lithographie est qu'elle permet une écriture directe des motifs par balayage de l'échantillon sous le faisceau laser et donc ne nécessite pas de masque comme en lithographie optique standard [116]. Cette technique est donc particulièrement adaptée pour la réalisation de prototypes, où on peut réaliser des motifs géométriques à la demande. La résolution de gravure du système est $\leq 2\mu\text{m}$. Le système permet un réalignement, à l'aide de repères fabriqués (par exemple des croix) on pourra se repérer.

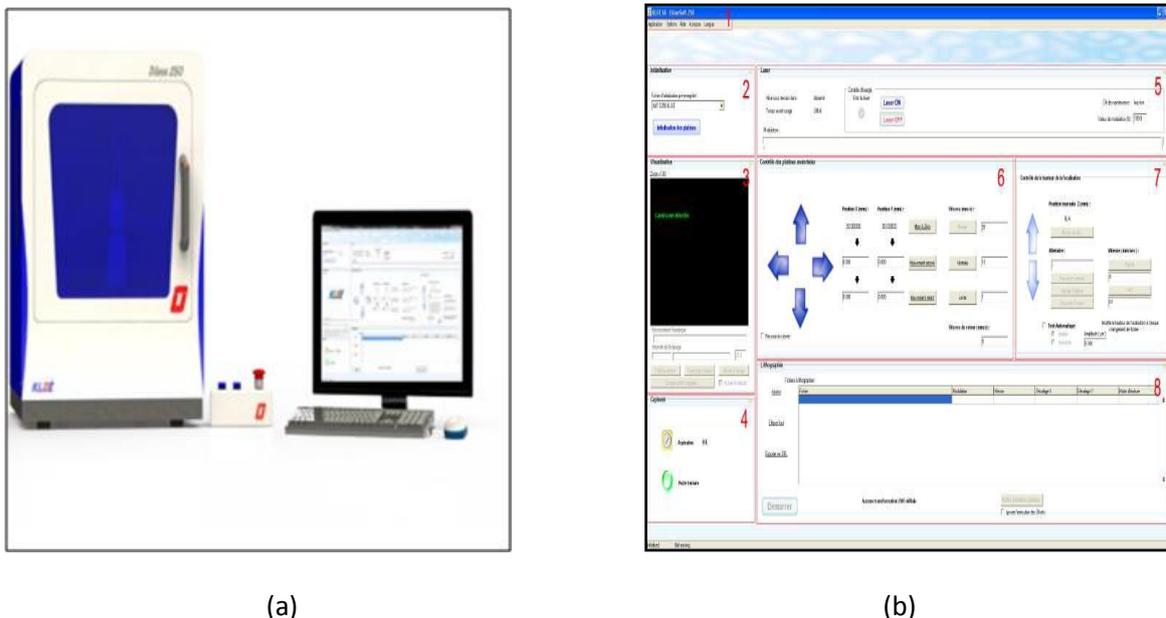


Figure 4.10 : Image de l'appareil Dilase 250 de IM2NP (a) avec son logiciel DilaseSoft 250 (b).

4.3. Procédés de fabrications des nanofils cœur/coquille Si/SiO₂:

4.3.1. Préparation des substrats : Nettoyage de l'échantillon :

La structure visée des échantillons consiste en un réseau de nanofils de silicium de dimensions (diamètres, longueur) variables sur substrat SOI (001), Silicon On Insulator, la première étape est la préparation des substrats et elle consiste en un nettoyage chimique de la surface de ces substrat «ex-situ» par un procédé du type «SHIRAKI» [117] qui peut se résumer (voir tableau (4.1)) à une série d'oxydations avec de l'acide nitrique (HNO₃) bouillant et de désoxydations à l'acide fluorhydrique (HF). Après ces étapes d'oxydation et de désoxydation, un oxyde chimique propre dit «chimique» d'une épaisseur autour d'un nanomètre va être formé en trempant l'échantillon dans une solution chauffée contenant de l'eau oxygénée (H₂O₂) et de l'ammoniac (NH₄OH).

Tableau 4.1 : Procédure de nettoyage chimique employée pour les substrats de SOI (001)

Etapes	Solutions	Temps
oxydation	HNO ₃	10 min
Rinçage	H ₂ O	3 min
Désoxydation	HF (30%) + H ₂ O (70%)	1 min
Rinçage	H ₂ O	2 mn

Après cette étape de nettoyage une fine couche d'oxyde supplémentaire est réalisée par oxydation thermique dans le four RTO pour améliorer la qualité d'isolation électrique de l'oxyde et pour éviter l'amorphorisation de la surface après la gravure par les ions de l'or. Ces étapes sont montrées dans la figure (4.11).

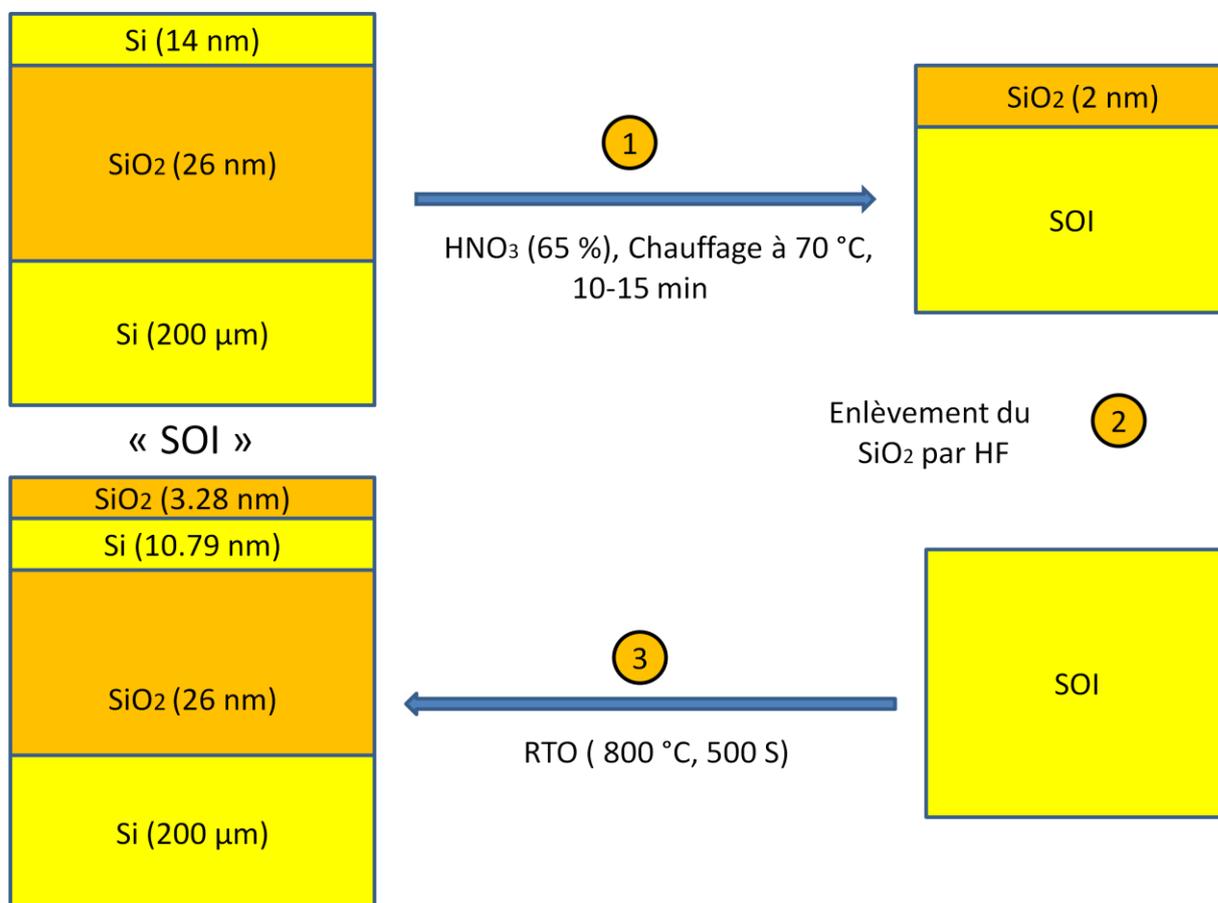


Figure 4.11 : Etapes de préparation de l'échantillon pour la gravure des nanofils par FIB.

4.3.2. Fabrication des nanofils cœur/coquille Si/SiO₂ : utilisation du «Faisceau d'ions focalisé» (FIB) :

4.3.2.1. Calibrage de l'équipement :

Les NFs sont fabriqués par une méthode « top-down », en partant d'une couche plane de silicium qui sera gravée à l'échelle nanométrique en utilisant le FIB pour la formation de NFs (cœur), par la suite une couche de SiO₂ sera déposé par RTO qui sert comme la coquille selon le schéma donné dans la figure (4.12).

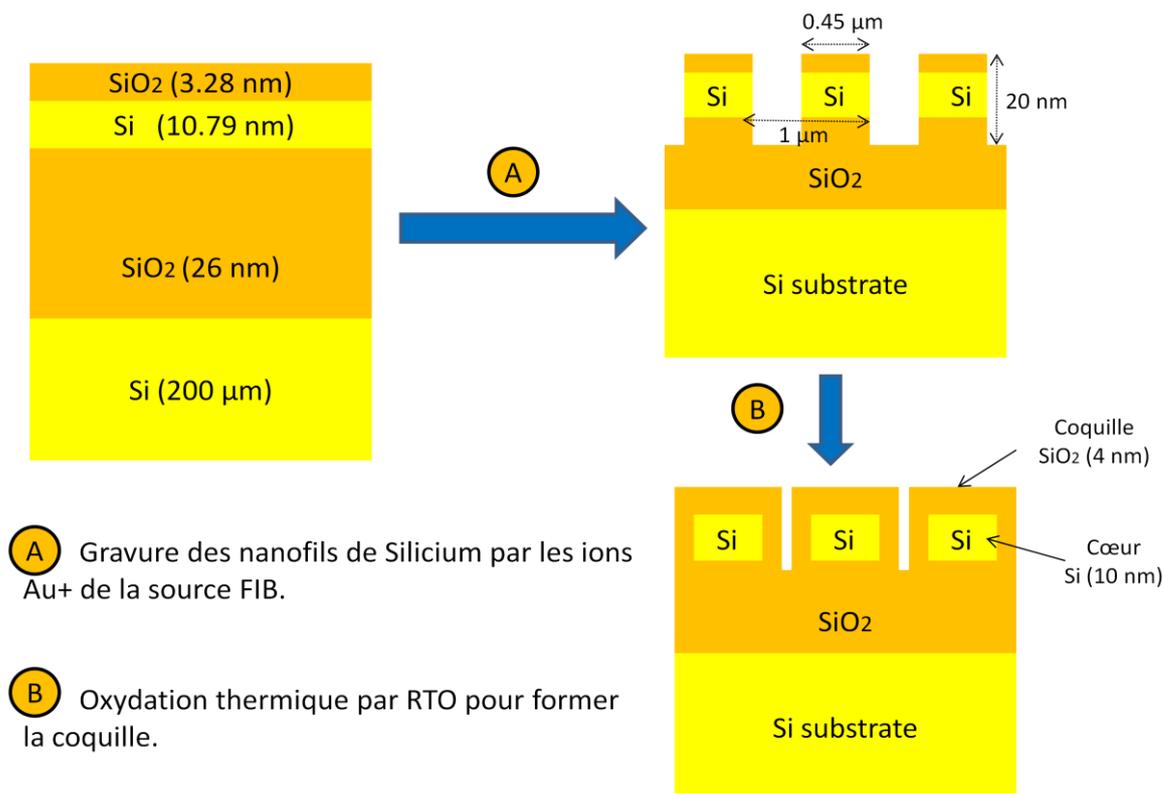


Figure 4.12 : Etapes de la gravure des nanofils cœur/coquille Si/SiO₂ par FIB au sein de NSE de l'IM2NP.

Pour réaliser une gravure bien précise avec notre colonne ionique on a du faire plusieurs tests pour aboutir à un calibrage adéquat de l'équipement qui nous permette d'obtenir des mesures réelles des nanofils très proches de celles demandées sur le logiciel. On a commencé d'abord par la réalisation des différentes gravures en changeant les paramètres suivants indiqués sur la figure (4.13) et dans le tableau (4.2). Les ions utilisés étaient Au^+ (ions lourds), pour lesquels le courant de sonde est plus important et les taux de gravure sont élevés, ce qui nous a permis de réaliser ces tests dans des temps relativement courts.



Figure 4.13 : Paramètres utilisées dans les gravures introduites dans le logiciel de FIB.

Tableau 4.2 : Valeurs des paramètres FIB utilisés pour chaque motif de tests.

Paramètre/motif	A	B	C	D	E	F	G	H
Courant I (pA)	18.9	18.9	19	19	12.38	10.99	10.84	12.47
Profondeur de gravure Z (nm)	20	20	20	20	20	20	20	20
Le période (µm)	0.6	0.6	0.6	0.5	0.4	0.35	0.5	0.55
Longueur (µm)	6	6	6	6	6	6	6	6
Temps de gravure (min)	2.25	2.29	1.13	1.13	-	-	-	-
Largeur de gravure W (µm)	0.3	0.3	-	-	-	-	0.2	0.25
Type de gravure	rectangle	rectangle	lignes	lignes	lignes	lignes	rectangle	rectangle
Nombre de NF	20	20	20	20	20	20	20	20

Les analyses MEB des structures obtenues sont montrées dans la figure (4.14) et les mesures AFM correspondantes sont données dans la figure (4.15).

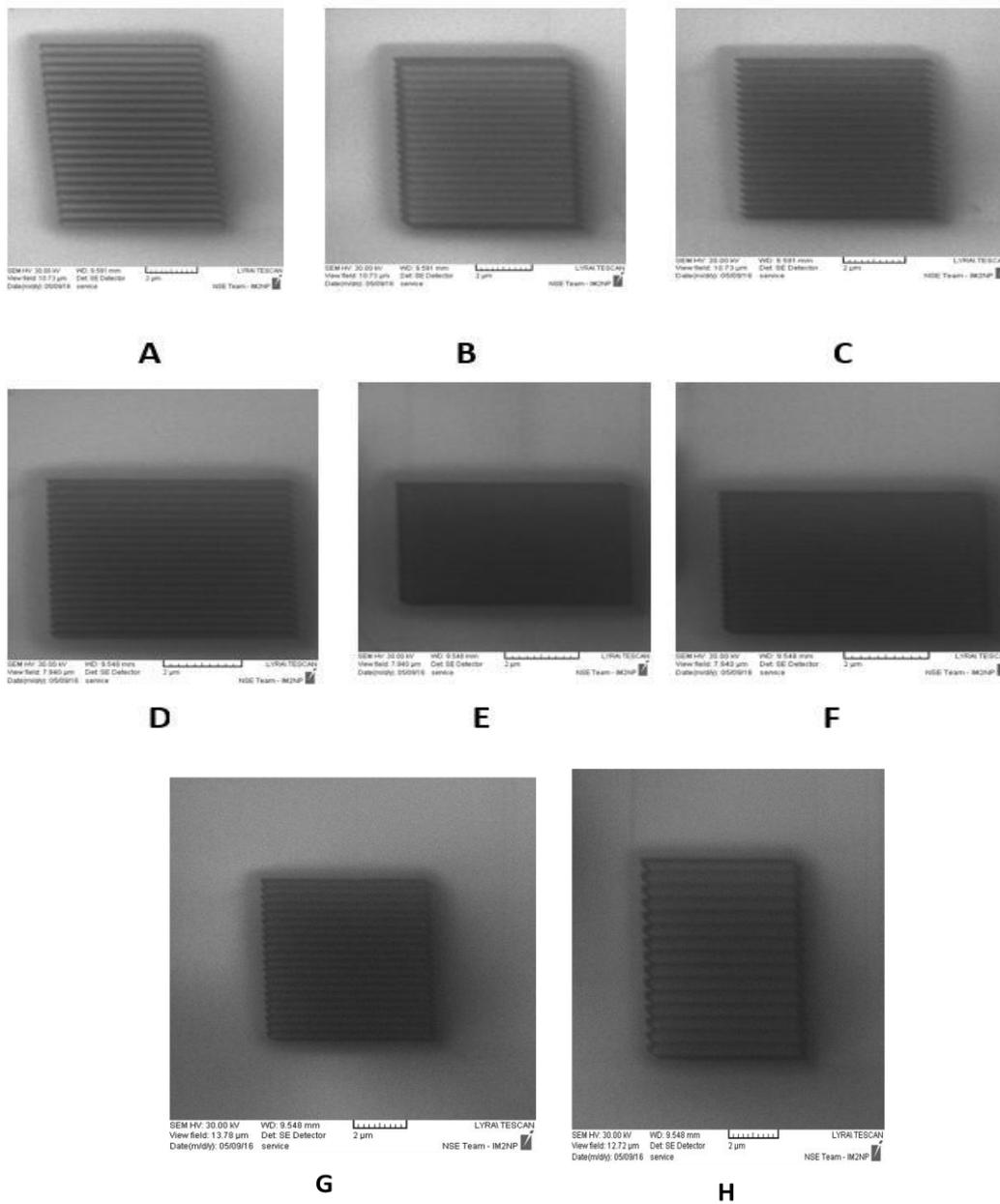


Figure 4.14 : Images MEB des différents motifs de tests réalisés au sein de NSE de l'institut IM2NP.

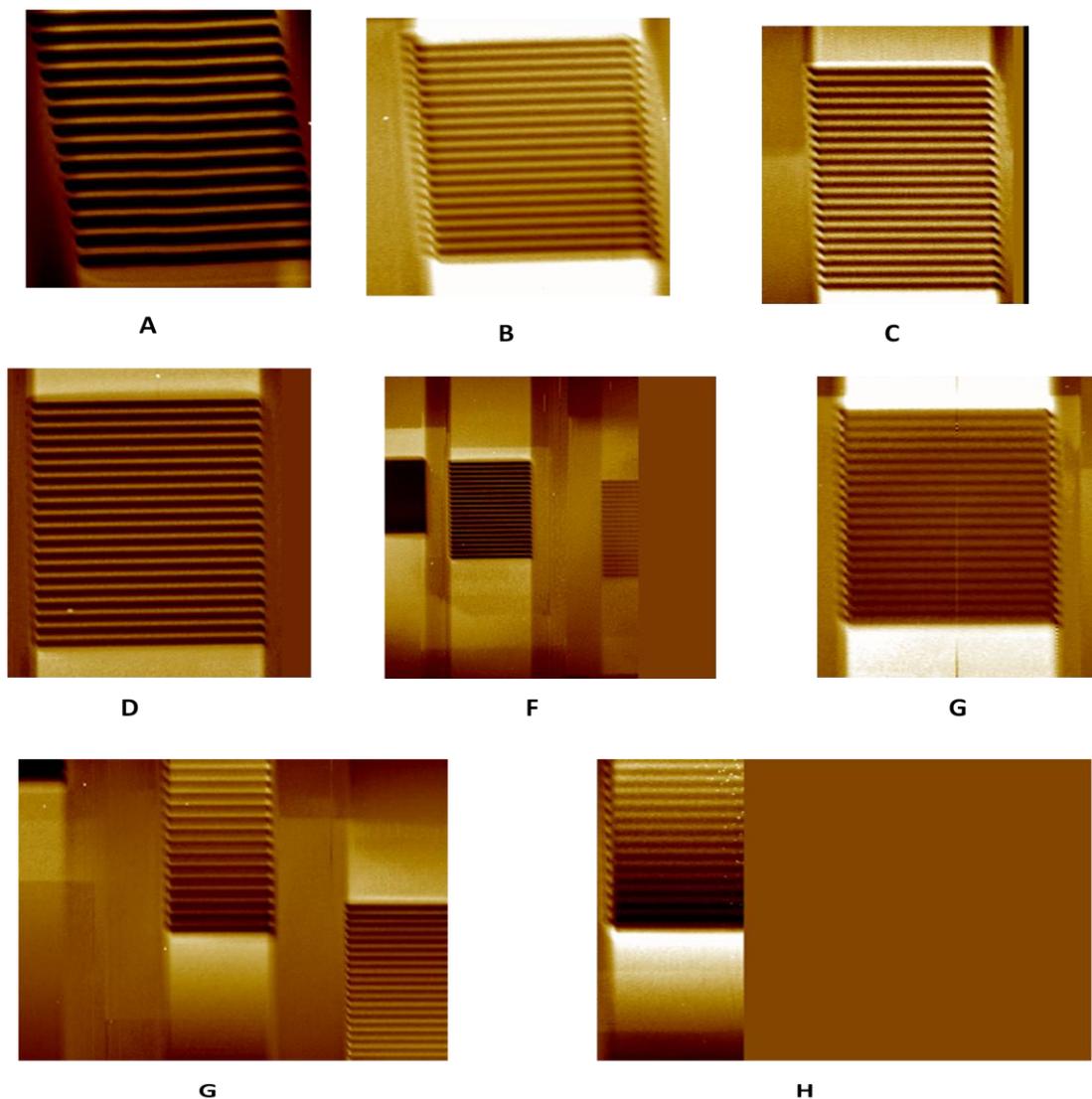


Figure 4.15 : Images AFM des différents motifs de tests réalisés au sein de NSE de l'institut IM2NP.

L'analyse de ces dernières images nous a permis de choisir les paramètres de motif A pour continuer par la suite la gravure des nanofils de différents diamètres. En effet, dans ce cas les profondeurs gravées obtenues sont conformes à celles demandées comme il est évident dans le tableau (4.3), et également les profils AFM montrent que les contours et profils des NFs sont mieux définis, avec une rugosité plus faible.

Tableau 4.3 : Comparaison entre les paramètres FIB et AFM du motif A.

Paramètres	AFM	FIB
Profondeur de gravures Z (nm)	19.6	20
Largeur de gravures W (μm)	0.352	0.3
Le période (μm)	0.6	0.6

4.3.2.2. Gravure des nanofils à diamètres variables par les ions de Au^+ :

En utilisant les paramètres qu'on a obtenu dans la phase de calibration, on commence à graver nos nanofils (toujours avec les ions de Au^+) pour trois diamètres différents de nanofils : 450 nm, 300 nm, et 150 nm et pour une longueur constante de 50 μm . Les images MEB et AFM ainsi les profils AFM des nanofils avec les différentes diamètres sont montrés dans la figure (4.16), (4.17) et (4.18), respectivement.

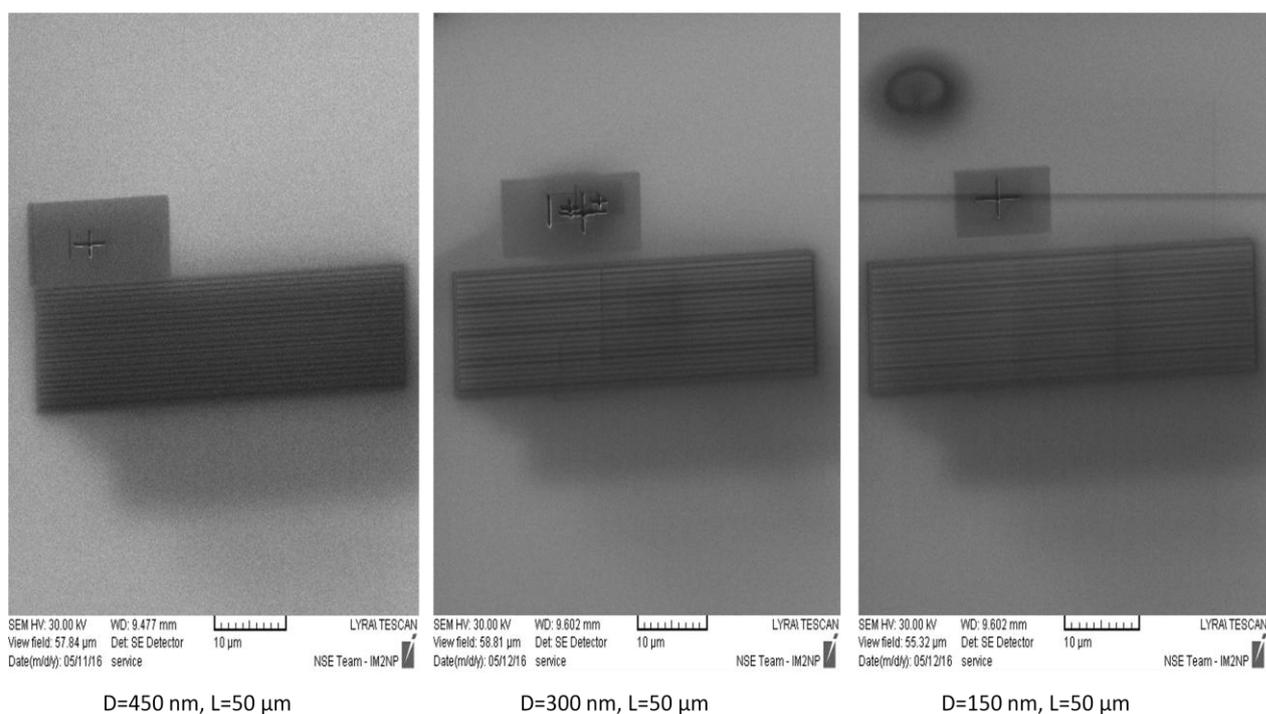


Figure 4.16 : Images MEB de nanofils de Si gravé par les ions de Au^+ pour différents diamètres obtenus au sein de NSE de l'institut IM2NP.

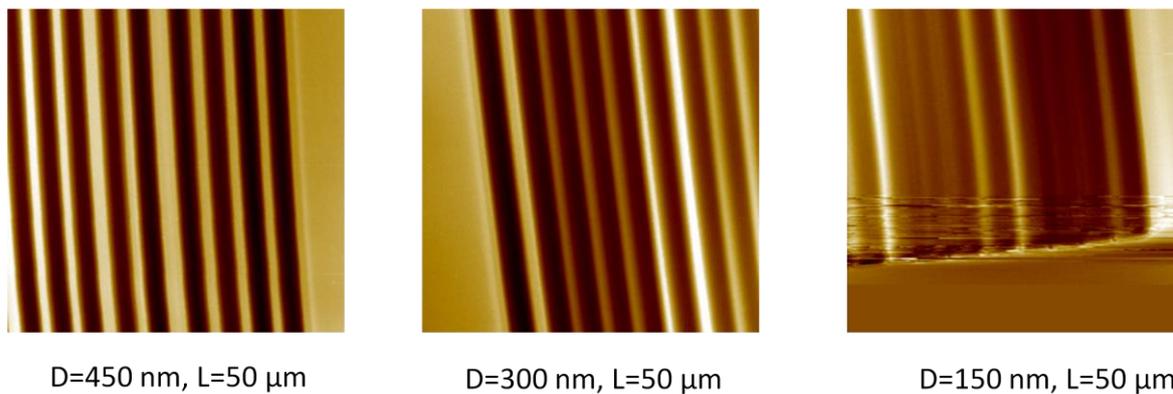
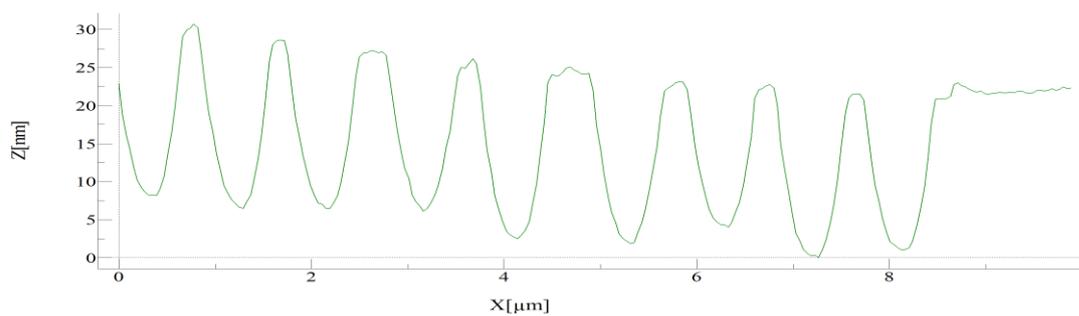
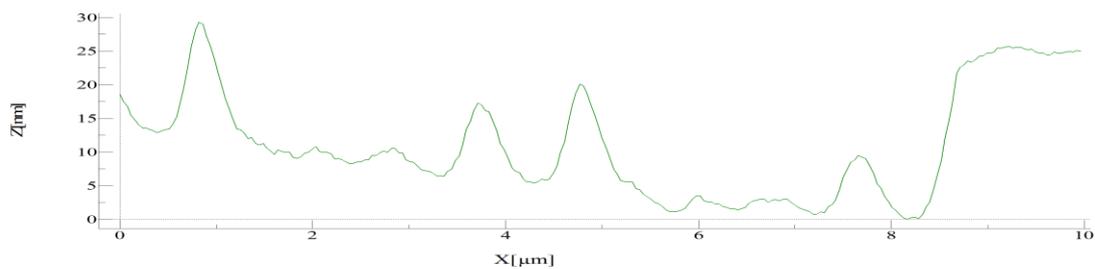


Figure 4.17 : Images AFM de nanofils de Si gravé par les ions de Au^+ pour différents diamètres obtenus au sein de NSE de l'institut IM2NP.

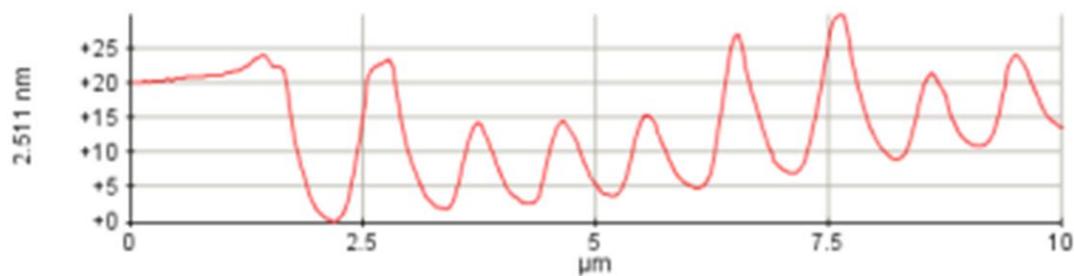


D=450 nm, L=50 μm



D=150 nm, L=50 μm

Line Profile: Red



D=350 nm, L=50 μm

Figure 4.18 : Profils de AFM de nanofils de Si gravé par les ions de Au^+ pour différents diamètres.

Les paramètres de FIB utilisés pour les gravures avec Au^+ sont rassemblés dans tableau (4.4) :

Tableau 4.4 : Valeurs des paramètres FIB utilisés lors la gravure de nanofils de Si par Au^+ .

Paramètre	A	B	C
I (pA)	18.32	20.51	20.59
Z (nm)	20	20	20
Période (μm)	1	1	1
L (μm)	50	50	50
t (min)	38	42	50.14
W (μm)	0.58	0.73	0.88
type	rectangle	rectangle	rectangle
Nombre	20	20	20

Les résultats MEB et surtout AFM montrent que les diamètres et profondeurs gravées obtenus sont cohérents avec ceux qui étaient demandés ($Z > 16\text{nm}$) surtout dans le cas des nanofils de diamètre 450 nm. On constate cependant à certains endroits un élargissement du diamètre de NFs (voir profil figure (4.18)). Ceci pourrait s'expliquer par un effet lié à la coupure d'émission de la source. En effet nous avons eu tout au long de ce stage un problème de stabilité de la source d'ions AuSi qui arrêta d'émettre très fréquemment (toutes les 10-15 minutes), ce qui a très fortement perturbé la réalisation des motifs, dont la durée dépasse souvent ces 15 minutes. Quand après une coupure la source redémarre et se restabilise, on peut certainement avoir un décalage dans les motifs en cours de gravure qui peut expliquer l'élargissement ou la diminution des NF à certains endroits.

Les nanofils ont été réalisés par bombardement des ions Au^+ . En effet, à cause des problèmes de stabilité de source, pour pouvoir réaliser des motifs si possible entre deux coupures on devait travailler dans des conditions de vitesse de gravure importantes ce qui est le cas pour l'or par rapport au silicium.

Après la gravure par FIB/SEM, les nanofils de Si avec un diamètre de 450 nm et une longueur de 50 μm sont recouvertes par une couche de SiO_2 (coquille) d'une épaisseur de 4 nm en utilisant le RTO.

4.3.3. Mise des contacts métalliques :

La structure finale des contacts qu'on veut obtenir est illustrée dans la figure (4.19) qui consiste en une métallisation microscopique en utilisant l'appareil lithographie laser Dilase 250 présenté précédemment.

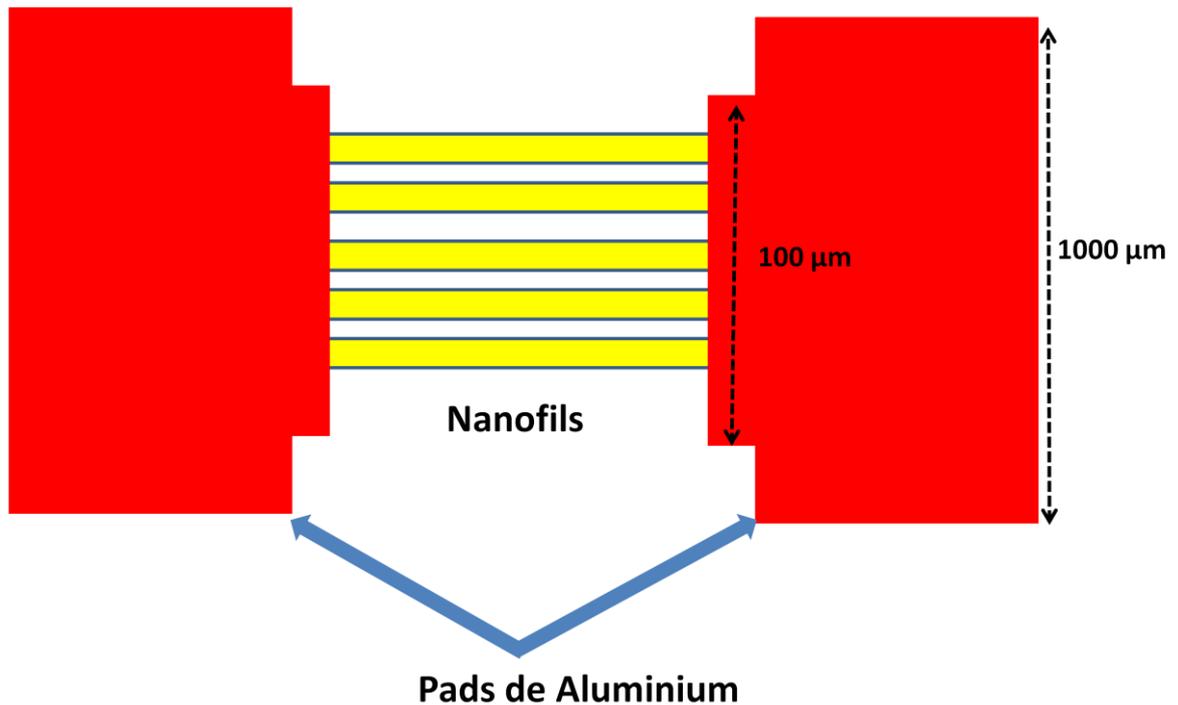


Figure 4.19 : Structure finale envisagée.

Les étapes de la lithographie laser sont décrites dans la figure (4.20). Dans une première étape (1) on place notre échantillon sur une tournette qui tourne dans une vitesse constante et on ajoute quelques gouttes de résine 1805 (résine positive) pendant 30 secondes jusqu'à ce que la résine s'étale sur toute la surface d'une manière homogène. On obtient donc une couche de résine sur la surface de notre échantillon. On place après l'échantillon dans un four de température 100 °C pendant une minute pour durcir la résine (2). On place l'échantillon dans l'équipement Dilase 250 où on a déjà programmé notre motif (là où on veut exposer aux rayons laser ultras violet) à l'aide du logiciel Kloé Design puis on lance l'exposition au laser (3). On obtient donc une partie de résine qui a été exposé au rayonnement UV (4). On trempe l'échantillon dans un solvant MF319 pour enlever la résine exposée aux rayons UV, et on obtient donc la forme dessiné au logiciel, puis on fait la vérification avec le microscope (5).

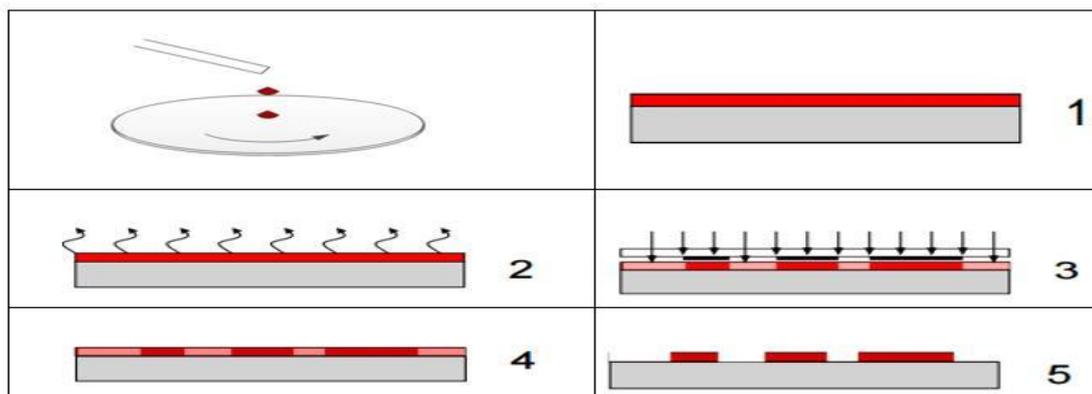


Figure 4.20 : Procédés de gravure en lithographie Laser.

L'étape suivante consistera à déposer une couche de métal (Aluminium) sur toute la surface puis tremper une autre fois l'échantillon dans un autre solvant pour enlever la résine (technique du « lift-off ») et on obtient donc les contacts métalliques envisagés.

L'image du microscope optique des NFs cœur/coquille Si/SiO₂ contacté par des pads d'Aluminium microscopique sont montrés dans la figure (4.21).

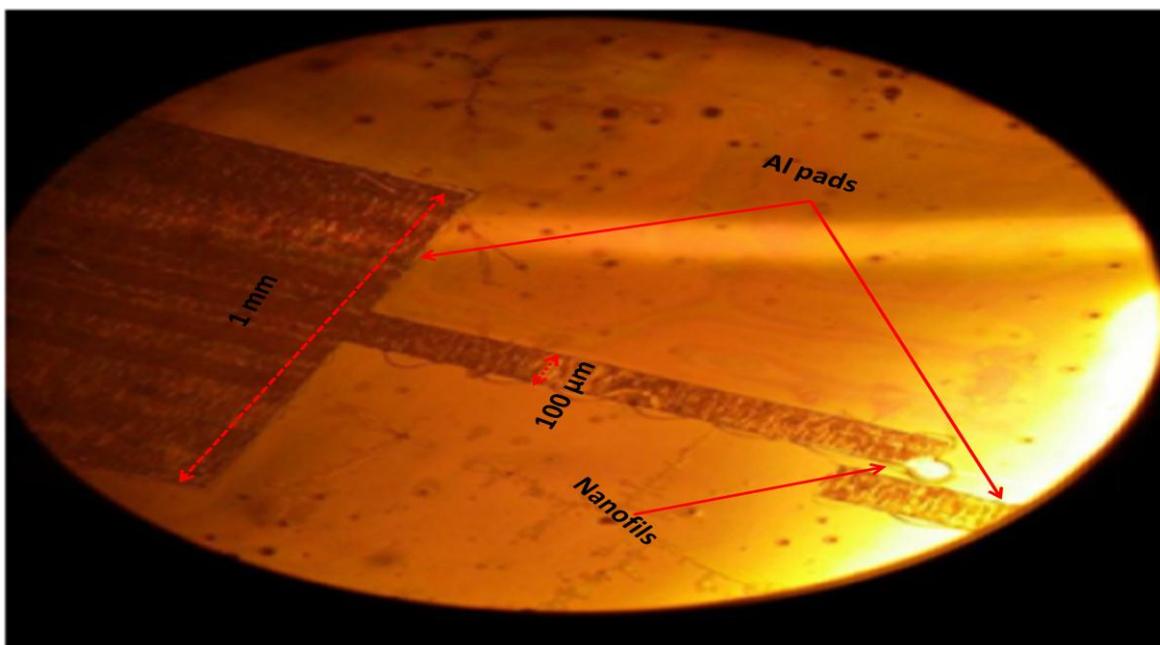


Figure 4.21 : Image de microscope optique des NFs cœur/coquille contactés par des pads d'Aluminium obtenue au sein de NSE de l'institut IM2NP.

4.4. Conclusion:

Nous avons présenté dans ce dernier chapitre la partie pratique que nous effectuons dans l'équipe NSE du laboratoire IM2NP à l'université d'Aix-Marseille en France. Les différentes étapes de la réalisation des nanofils cœur/coquille de Si/SiO₂, ainsi l'étape de la mise en contact métalliques ont été montrés.

CONCLUSION GENERALE

Dans ce travail de thèse, nous avons montré l'avantage de l'insertion des nanostructures de basse dimensionnalité comme BQs, PQs, et NFs dans les cellules solaires conventionnelles. Ce travail a permis d'étudier et d'optimiser plusieurs structures de cellules solaires à base de nouveaux matériaux BQs, PQs et même NFs en se basant sur la modélisation et la simulation par SILVACO ATLAS. L'influence de différentes grandeurs physiques et géométriques comme le nombre de couches et périodes de BQs et PQs, l'épaisseur de BQs et PQs, le rayon et la longueur des NFs, la température, la fraction molaire de matériaux ternaires utilisés comme de BQs et PQs sur les caractéristiques électriques et optiques a été examiné. D'autre part, notre travail a permis de fabriquer des NFs cœur/coquille de Si/SiO₂ et de les mettre en contact par une nouvelle technique qui est la lithographie laser. Les conclusions spécifiques aux grandes étapes de ces travaux de thèse sont décrites ici.

Dans un premier temps, des structures de cellules solaires à nouveaux matériaux III-V et IV de BQs, PQs et NFs comme GaSb/GaAs, InSb/GaAs, InAsP/GaAs, InAsP/Si, InGaN/GaN, et SiGe/Si ont été étudié, optimisé et comparé avec des résultats expérimentaux disponibles pour la validation. Pour chaque étude, la caractéristique J-V et P-V, la courbe de l'efficacité quantique EQE, la courbe du coefficient d'absorption, et dans certains cas le spectre de la photoluminescence PL ont été présentés.

Dans un second temps, la comparaison faite entre ces différentes structures de cellules solaires, nous a permis de sélectionner les bonnes structures qui donnent les meilleurs rendements de conversion. Nous avons vu que l'utilisation de GaAs comme un matériau barrière et substrat est un très bon choix pour former les cellules solaires à nanostructures quantiques. Concernant les matériaux nanostructures, nous avons trouvé que GaSb est un excellent matériau binaire BQ à employer sur une matrice de GaAs, avec un rendement de conversion de 22.46 % obtenu. InAsP est un bon matériau parmi les autres matériaux III-V étudiés qui donne un meilleur rendement de conversion de 16.6 %, si on le croît sur substrat GaAs. Pour la structure InGaN/GaN, nous avons vu que le nombre de couches ou bien périodes maximal à ne pas dépasser c'est cinq couches ou bien périodes pour avoir un rendement de conversion optimal. Avec cinq couches de BQs d' $\text{In}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}/\text{GaN}$, nous avons obtenu un rendement de 19.61 %. Finalement pour la structure à nanofils cœur/coquille

de Si/SiGe, nous avons trouvé qu'avec une longueur de nanofils de 10 μm et un rayon fixe de 0.19 μm , le rendement de conversion de la cellule solaire à NFs de Si a augmenté de 6.48 % à 10.46 %. En addition, qu'avec cette longueur optimale de NFs et un rayon de 0.28 μm , le rendement de conversion a remonté de 10.46 % à 13.23 %.

Enfin, des NFs cœur/coquille de Si/SiO₂ ont été fabriqués, caractérisés et mis en contact par la machine de gravure FIB et lithographie laser pour les applications photovoltaïques.

Les perspectives de ce travail sont en effet le développement de nouvelles structures de cellule solaires à des matériaux nanostructures plus performants surtout les matériaux quaternaires et quinaires pour atteindre des rendements de conversion élevés d'une part, et d'autre part le développement et l'intégration de nouvelles modèles physiques spécifiques aux nanostructures quantiques dans SILVACO ATLAS dans le but de perfectionner la simulation. Finalement, l'objectif ultime est de caractériser les nanofils cœur/coquille Si/SiO₂ réalisés par la photoluminescence PL, afin d'évaluer la densité de pièges et les défauts, dans le but de réaliser des cellules solaire à nanofils cœur/coquille Si(p)/Si(n) recouvertes par une couche de SiO₂ qui sera utile pour améliorer les performances de la cellule solaire.

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

1. Mason, Nigel., “Impact of Materials Prices on Cost of PV Manufacture”, SMEET II Workshop, London 27 Feb 2013.
2. Green, M., 2017. Corrigendum to “Solar cell efficiency tables (version 51)”, *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, vol 26 (4), pp 3–12.
3. Xu, Y., Gong, T., and N. Munday, J., “The generalized Shockley-Queisser limit for nanostructured solar cells”, *Nature, Sci. Rep*, vol 5, p 13536, 2015.
4. Kevin, L. Schulte., Ryan, M. France., and John, F. Geisz., “Highly Transparent Compositionally Graded Buffers for New Metamorphic Multijunction Solar Cell Designs”, *IEEE Journal of Photovoltaics*, vol 7, pp 347 – 353, 2017.
5. D. Guimard, J. Tatebayashi, M. Nishioka, T. Yang, S. Tsukamoto, et Y. Arakawa. *Techniques de l’ingénieur. Electronique*, 1, (2006).
6. Caroff, P., “Croissance de boîtes quantiques d’InAs/InP(113) B pour les applications en télécommunications optiques”, *Thèse de Doctorat Physique*, INSA de Rennes, 2005.
7. A. W. Walker, O. Theriault, J. F. Wheeldon, et K. Hinzer. *The Effects of Absorption and Recombination on Quantum Dot Multijunction Solar Cell Efficiency* *IEEE J. Quantum Electron.* 3(3), 1118–1124 (2013).
8. Okada, Y., Ekins-Daukes, N. J., Kita, T., Tamaki, R., Yoshida, M., Pusch, A., Hess O., Phillips, C. C., Farrell, D. J., Yoshida, K., Ahsan, N., Shoji, Y., Sogabe, T., and Guillemoles, J.F., “Intermediate band solar cells: Recent progress and future directions”, *Applied Physics Reviews*, 2, p 021302, 2015.
9. Marti, A., Cuadra, L., and Luque, A., “QUANTUM DOT INTERMEDIATE BAND SOLAR CELL”, *IEEE 28th International Conference on Photovoltaic Specialists Conference*, Sep 2000.
10. Baskaran, A., and Smereka, Peter., “Mechanisms of Stranski-Krastanov growth”, *J. App. Phy*, vol 111, p 044321, 2012.
11. Mertens, K., “*Photovoltaics: fundamentals, technology and practice*”, John Wiley & Sons, Inc., publication, 2014.
12. Chapin, D.M., Fuller, C.S. and Pearson, G.L., “A new silicon p-n junction photo- cell for converting solar radiation into electrical power”, *Journal of Applied Physics*, vol 25(5), pp 676–677, 1954.

13. Lincot, D., “*La conversion photovoltaïque de l'énergie solaire*”, Découverte, vol 344-345, pp 47-65, 2007.
14. SZE, S. M., “*Physics of Semiconductor Devices*”, John Wiley & Sons, 1981.
15. Beiser, A., “*Physique Appliquée : Cours et Problèmes*”, McGrawHill, série Schaum, 1979.
16. Sari-Ali, I., Benyoucef, B., et Chikh-Bled, B, “*Etude de la jonction PN d'un semi-conducteur à l'équilibre thermodynamique*”, Journal of Electron Devices, vol 5, pp 122–126, 2007.
17. Frensey, W. R. and Einspruch, N. G, Ch. 1 of “*Heterostructures and Quantum Devices*”, a volume of VLSI Electronics: Microstructure Science, Academic Press, San Diego
Publication date: March 25, 1994.
18. Equer, B., “*Energie solaire photovoltaïque : Physique et technologie de la conversion photovoltaïque*”, Ecole Polytechnique, UNESCO, 1991.
19. Desrues, T., “*Développement de cellules photovoltaïques à hétérojonctions silicium et contacts en face arrière*”, Thèse de Doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 2009.
20. Sayad, Y., “*Détermination de la longueur de diffusion des porteurs de charge minoritaires dans le silicium cristallin par interaction lumière matière*”, Thèse de Doctorat, Institut national de sciences appliquées de Lyon, 2009.
21. Hall, R. N., “*Electron-Hole Recombination in Germanium*”, Phys Rev, vol 87, p 387, 1952.
22. Altermatt, P. P., Schmidt, J., Heiser, G., Aberle, A.G, “*Assessment and parameterization of Coulomb-enhanced Auger recombination coefficients in lowly injected crystalline silicon*”, J. Appl. Phys, vol 82, pp 4938-4944, 1977.
23. Veschetti, Y., “*Modélisation, caractérisation et réalisation de nouvelles structures Photovoltaïques sur substrat de silicium mince*”, Thèse de Doctorat, Université Louis Pasteur Strasbourg, 2005.
24. Morales, R. A. L., “*Performance of advanced triple-junction (ATJ) solar cells*”, Thèse de Doctorat, Pontificia Universidad Catolica de Chile, 2005.
25. Markvart, T. et Castaner, L., Ch. 1 of “*Solar cell: Material, Manufacture and Operation*”, First Edition, pp 6-15, 2005.
26. Oleksiy, N., “*Simulation, fabrication et analyse de cellules photovoltaïques à contacts arrière interdigités*”, Thèse de Doctorat, Institut national des sciences appliquées de Lyon, 2005.

27. Ouled Salem, M., “ *Analyse, Modélisation et Simulation des Pertes dans un Module Photovoltaïque à Base de Silicium Monocristallin* ”, Mémoire de Magister en Physique énergétique et matériaux, Université de Abou Bekr Belkaid Tlemcen, 2009.
28. Petibon, M.S., “ *Nouvelles architectures distribués de gestion et de conversion de l'énergie pour les applications photovoltaïques*”, Thèse de doctorat, Université de Toulouse III, Janvier 2009.
29. Bimberg, D., Grundmann, M., et Ledentsov, N.N, “ *Quantum Dot Heterostructures*”, John Wiley and Sons, 1999.
30. Arakawa, Y. et Sakaki, H., “ *Multidimensional quantum well laser and temperature dependence of its threshold current*”, Applied Physics Letters, 40(11), p 939–41, 1982.
31. Zribi, J., “ *Croissance et caractérisation des boîtes quantiques InAs/GaAs pour des applications photovoltaïques*”, Thèse de Doctorat en physique, Université de Sherbrooke, 2014.
32. Dupuy, E., “ *Croissance et spectroscopie de boîtes quantiques diluées d’InAs/InP(001) pour des applications nanophotoniques à 1.55 μm* ”, Thèse de Doctorat, Université de Sherbrooke, 2009.
33. Balaguru, R. J. B., Jeyaprakash, B. G., “ *Quantum Wells, Quantum Wires, Quantum Dots, Quantum Limit of Conductance, Quantum Capacitance & Quantum HALL Effect*”, NPTEL, Electrical & Electronics Engineering, Semiconductor Nanodevices.
34. Harrison, P., “ *Quantum Wells, Wires and Dots Second Edition: Theoretical and Computational Physics of Semiconductor Nanostructures*”, John Wiley & Sons, second edition, 2005.
35. Fafard, S., Leonard, D., Merz, J.L., et Petroff, P.M., “ *Selective excitation of the photoluminescence and the energy levels of ultra small InGaAs/GaAs quantum dots*”. Applied Physics Letters, vol 65, pp 1388–1390, 1994.
36. Leon, R., Petroff, P.M., Leonard, D., et Fafard, S., “ *Spatially-resolved visible luminescence of self-assembled*”, Science, vol 267 (5206), pp.1966–8, 1995.
37. Baira, M., “ *Propriétés optiques et modélisation des structures à base de boîtes quantiques pour l'émission à 1.3 μm* ”, Thèse de Doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 2009.
38. Stranski, I. N. et Krastanow, L., “ *Abhandlungen der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Klasse Iib*”, Akademie der Wissenschaften Wien, 1938.
39. Goldstein, L., Glas, F., Marzin, J.Y., Charasse, M.N., et Le Roux, G. “ *Growth by molecular beam epitaxy and characterization of InAs/GaAs strained-layer superlattices*”, Applied Physics Letters, vol 47(10), pp 1099–1101, 1985.

40. Oura, K., Lifshits, V.G., Saranin, A.A., Zotov, A.V., Katayama, M., “*Surface Science: An Introduction*”, Berlin: Springer, 2003.
41. Pimpinelli, A., Villain, J., “*Physics of Crystal Growth*”, Cambridge: Cambridge University Press, 1998.
42. Joyce, P.B., Krzyzewski, T.J., Bell, G.R., et Jones, T.S., “*Surface morphology evolution during the overgrowth of large InAs–GaAs quantum dots*”, Applied Physics Letters, vol 79(22), pp 3615–3615, 2001.
43. Al-Jassim, M., Norman, A., and Hanna, M, “*Intermediate Band Quantum Dot Solar Cells*”, National Center for Photovoltaics, National Renewable Energy Laboratory NREL, Golden, Colorado.
44. Nasi, L., Ferrari, C., Lazzarini, L., et Clarke, G., “*Role of strain on the wavy growth onset in strain-balanced InGaAs-based multiquantum wells*”, Journal of Applied Physics, vol 92(12), pp 7678–80, 2002.
45. Aissat, A., El bey, M., Bestam, R., Vilcot, J.P, “*Modeling and simulation of $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As/InP$ quaternary structure for photovoltaic*”, International Journal of Hydrogen Energy, vol 39, pp 15287-15291, 2014.
46. Oshima, R., Komiyama, H., Hashimoto, T., Shigekawa, H., et Okada, Y., “*Fabrication of Multi-layer Self-assembled InAs Quantum Dots for High-Efficiency Solar Cells*”, Conference Record of the 2006 IEEE 4th World Conference on Photovoltaic Energy Conversion, WCPEC-4, vol 1, pp 158–161, 2006.
47. Alonso-Alvarez, D., Taboada, A.G., Gonzalez, Y., Ripalda, J.M., Alen, B., Gonzalez, L., Garcia J.M., Briones, F., Marti, A., Luque, A., Sanchez, A.M., et Molina, S.I, “*Stress compensation by GaP monolayers for stacked InAs/GaAs quantum dots solar cells*”, Dans Conference Record of the IEEE Photovoltaic Specialists Conference, 2008.
48. Tatebayashi, J., Nuntawong, N., Wong, P.S., Xin, Y.C., Lester, L.F., and Huffaker, D.L, “*Strain compensation technique in self-assembled InAs/GaAs quantum dots for applications to photonic devices*”, Journal of Physics D: Applied Physics, Vol 42 (7), 2009.
49. Dehimi, S., “*Etude de lasers à base des composés semi-conducteurs (InP, GaAs, GaP)*”, mémoire de magister, Université El Hadj Lakhdar, Batna, 2011.
50. Davies, J.H., “*The physics of low-dimensional semiconductors*”, Cambridge University Press, Cambridge 1997.
51. Silvaco Atlas User’s Manual, Device simulation software, p 1545, 2014.

52. Vurgaftman, I., Meyer, J.R., and Ram-Mohan, L.R., “*Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys*”, J. Appl. Phys, vol 89, p 5815, 2001.
53. Wright, A.F., “Elastic properties of zinc-blende and wurtzite AlN, GaN, and InN”, Journal of Applied Physics, vol 82 (6), pp 2833–2839.38, 1997.
54. Jenks S.E., “*Selecting Semiconductor Materials for the Quantum Dot Intermediate Band Solar Cell*”, Thèse de doctorat en physique, Université de Drexel, 2012.
55. Vegard, L., “*Die Konstitution der Mischkristalle und die Raumfüllung der Atome*”, Z. Phys. A 5, 17, 1921.
56. Piprek, J., “*Semiconductor Optoelectronic Devices: Introduction to Physics and Simulation*”, UCSB: Academic Press, p 22, 2003.
57. Jasim, K.E., “*Dye Sensitized Solar Cells-Working Principles, Challenges and Opportunities*”, In: Solar Cells-Dye-Sensitized Devices Springer Science, Chap. 8, pp 171-204, 2011.
58. Buyanova, I.A., Chen, W.M., and Monemar, B., “*Electronic Properties of Ga(In)NAs Alloys*”, J. Nitride Semicond. Res, vol 6, 2, 2001.
59. Kuroiwa R., Asahi, H., Asami, K., Kim, S.J., Iwata, K., and Gonda, S., “*Optical properties of GaN-rich side of GaNP and GaNAs alloys grown by gas-source molecular beam epitaxy*”, Appl. Phys. Lett, vol 73, p 2630, 1998.
60. Geisz, J.F., Friedman, D.J., “*III–N–V semiconductors for solar photovoltaic applications*”, Semicond. Sci. Technol. vol 17, pp 677–769, 2002.
61. Ripalda, J.M., Granados, D., Gonzalez, Y., Sanchez, A.M., Molina, S.I., and Garcia, J.M., “*Room temperature emission at 1.6 μ m from InGaAs quantum dots capped with GaAsSb*”, Appl. Phys. Lett, vol 87, p 202108-3, 2005.
62. Harmand, J.C., Li, L.H., Patriarche, G., and Travers, L., “*GaInAs/GaAs quantum-well growth assisted by Sb surfactant: Toward 1.3 μ m emission*”, Appl. Phys. Lett. vol 84, p 3981, 2004.
63. Richter, M., “*MBE-overgrowth of quantum dots and FIB-written doping patterns*”, Thèse de Doctorat en physique, Ruhr-Universität Bochum, 2007.
64. Franchi, S., Trevisi, G., Seravalli, L., and Frigeri, P., “*Quantum dot nanostructures and molecular beam epitaxy*”, Progress in Crystal Growth and Characterization of Materials vol 47, p 166, 2003.
65. Saint-Girons, G., “*L'épitaxie*”, Ecole Centrale de Lyon.

66. Udhayasankara, M., Kumar, J., et Ramasamy, P., “*Growth and characterization of InGaAs(P) by CBE technique*”, Journal of Optoelectronics and Advanced Materials, vol 5(1), pp 75–87, 2003.
67. Silvaco Atlas User’s Manual 2016, page 31-38.
68. Bailey, C., “*Optical and mechanical characterization of InAs/GaAs quantum dot solar cells*”, Thèse de doctorat, Rochester Institute of Technology, January 2012
69. Benyettou, F., Aissat, A., Benamar, M., Vilcot, J., “*Modeling and simulation of GaSb/GaAs quantum dot for solar cell*”, Energy Procedia, vol 74:139, 2015.
70. Madelung O., “*Semiconductors: data handbook*”, Springer, 2004.
71. Aissat, A., Benyettou, F., Vilcot, J.P., “*Electrical and optical properties of InSb/GaAs QDSC for photovoltaic*”, International Journal of Hydrogen Energy, vol 42, pp 19518-19524, 2017.
72. Tsatsul’nikov, A.F., Ledentsov, N.N., Maksimov, M.V., Meltser, B.Ya., Volovik, B.V., Krestnikov, I.L., et al, “*Photoluminescence of InSb quantum dots in GaAs and GaSb matrices*”, Semiconductor, vol 31:55, 1997.
73. Li, T., Dagenais, M., “*Non-resonant below-bandgap two-photon absorption in quantum dot solar cells*”, Appl Phys Lett, vol 106:171101, 2015.
74. Glaser, E.R., Bennett, B.R., Shanabrook, B.V., Magno R., “*Photoluminescence studies of self- assembled InSb, GaSb, and AlSb quantum dot heterostructures*”, Appl Phys Lett, vol 68:3614, 1996.
75. Piprek, J., “*Semiconductor optoelectronic devices: introduction to physics and simulation*”, UCSB: Academic Press, p 22, 2003.
76. Saha, H., Swapan, K.D., “*Enhancement of performance of crystalline and amorphous silicon solar cells through optical engineering by nanostructured materials*”, Springer International Publishing, p 309, 2013.
77. Firsov, D.D., Komkov, O.S., Solv’ev, V.A., Kop’ev, P.S., Ivanov, S.V., “*Temperature-dependent photoluminescence of InSb/InAs nanostructures with InSb thickness in the above-monolayer range*”, J Phys D Appl Physic, vol 49:285108, 2016.
78. Zribi, J., “*Croissance et caractérisation des boites quantiques InAs/GaAs pour des applications photovoltaïques*”, Thèse de Doctorat en physique, Université de Sherbrooke, 2014.
79. Redaelli, L., Mukhtarova, A., Valdueza-Felip, S., Ajay, A., Bougerol, C., Himwas, C., et al, “*Effect of the quantum well thickness on the performance of InGaN photovoltaic cells*”, Appl Phys Lett, vol 105:31105, 2014.

80. Benyettou, F., Aissat, A., Benammar, M.A., Vilcot, J.P., “*InAs_{0.35}P_{0.65}/GaAs quantum dot solar cell*”, IEEE, 2016.
81. Adachi, S, “*Properties of Group IV, III-V, and II-VI Semiconductors*”, 2005.
82. Vurgaftman, I., Meyer, J.R., and Ram-Mohan, L.R., “*Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys*”, J Appl Phys, vol 89, p 5815, 2001.
83. Moon, R.L., Antypas, G.A, and James, L.W, “*Bandgap and lattice constant of GaInAsP as function of alloy composition*”, Journal of electronic materials, vol 3, 1974.
84. Huang, K.H and Wessels, B.W, “*Growth and properties of InAsP alloys prepared by organometallic vapor phase epitaxy*”, Journal of Crystal Growth, vol 92, pp 547-552, 1988.
85. Gobaut, B., Penuelas, J., Cheng, J., Chettaoui, A., Largeau, L., Hollinger, G., et al, “*Direct growth of InAsP/InP quantum well heterostructures on Si using crystalline SrTiO₃/SiSrTiO₃/Si templates*”, Appl Phys Lett, vol 97, p 201908, 2010.
86. Cheng1, J., El Akra, A., Bru-Chevallier, C., Patriarche, G., Largeau, L., Regreny P., et al, “*Optically active defects in an InAsP/InP quantum well monolithically integrated on SrTiO₃(001)*”, Mater Res Soc Symp Proc, p 1252, 2010.
87. Benyettou, F., Aissat, A., Djebari, M., Vilcot, J.P., “*Electrical properties of InAsP/Si quantum dot solar cell*”, International Journal of Hydrogen Energy, vol 42, pp 19512-19517, 2017.
88. Hubbard, S.M., Cress, C.D., Bailey, C.G., Wilt, D.M., “*Effect of strain compensation on quantum dot enhanced GaAs solar cells*”, Appl Phys Lett, vol 92:123512, 2008.
89. Deng Q., Wang X., Yang C. et al, “*Theoretical study on In_xGa_{1-x}N/GaN quantum dots solar cell*”, Physica B: Condensed Matter, vol 406, pp 73–76, 2011.
90. Xia, C. S., Li, Z. M. S., Lu, W., Zhang, Z. H., Sheng, Y., Hu, W. Da, and Cheng, L. W., “*Efficiency enhancement of blue InGaN/GaN light-emitting diodes with an AlGaIn-GaN-AlGaIn electron blocking layer*”, J Appl Phys, 111(9), p 094503, 2012.
91. Aissat, A., Benyettou, F., Vilcot, J.P., “*Modeling and simulation of InGaIn/GaN quantum dots solar cell*”, AIP conference proceeding, 2016.
92. Ambacher, O. et al, “*Two Dimensional Electron Gases Induced by Spontaneous and Piezoelectric Polarization in Undoped and Doped AlGaIn/GaN Heterosturctures*”, J Appl Phys, vol 87, pp 334-344, 2000.
93. Zhou, D., Sharma, G., Thomassen, S.F., Reenaas, T.W., et Fimland, B.O., “*Optimization towards high density quantum dots for intermediate band solar cells grown by molecular beam epitaxy*”, Applied Physics Letters, vol 96(6), p 061913, 2010.

94. Sugaya, T., Kamikawa, Y., Furue, S., Amano, T., Mori, M., et Niki, S., “*Multi-stacked quantum dot solar cells fabricated by intermittent deposition of InGaAs*”, *Solar Energy Materials and Solar Cells*”, vol 95(1), p 163–6, 2011.
95. Guimard, D., et al, “*Fabrication of InAs/GaAs quantum dot solar cells with enhanced photocurrent and without degradation of open circuit voltage*”, *Appl Phys Lett*, vol 96, p 203507, 2010.
96. Aissat, A., Benyettou, F., Nacer, S., Vilcot, J.P., “*Modeling and simulation of solar cells quantum well based on SiGe/Si*”, *International Journal of Hydrogen Energy*, vol 42, pp 8790-8794, 2017.
97. Benyettou, F., Aissat, A., Benamar, M.A., Vilcot J.P., “*Modeling of dynamics of carriers in InGaN/GaN Multiple- Quantum-Well MQWs solar cell*”, Dans 4th European Conference on Renewable Energy Systems ECRES TURKEY, 2016.
98. Marti, A., Stanley, C.R., and Luque, A., “*Intermediate Band Solar Cells (IBSC) Using Nanotechnology*”, *Nanostructured Materials for Solar Energy Conversion series*, pp 539-566, 2005.
99. Fabien, C. A. M., Moseley, M., Gunning, B., Doolittle, W. A., Fischer, A. M., Wei, Y. O., and Ponce, F. A., “*Simulations, practical limitations, and novel growth technology for InGaN-based solar cells*”, *IEEE J Photovoltaics*, vol 4, p 601, 2014.
100. Brown, G. F., Ager, J. W., Walukiewicz, W., and Wu, J., “*Finite element simulations of compositionally graded InGaN solar cells*”, *Sol Energy Mater Sol Cells*, vol 94, p 478 2010.
101. Matioli, E., Neufeld, C., Iza, M., Cruz, S.C., Al-Heji, A.A., Chen, X., Farrell, R.M., Keller, S., DenBaars, S., Mishra, U., Nakamura, S., Speck, J., and Weisbuch, C., “*High internal and external quantum efficiency InGaN/GaN solar cells*”, *Appl Phys Lett*, vol 98, p 021102, 2011.
102. Tanner, D.P., Caro, M.A., Reilly, E.P.O. and Schulz, S., “*Random alloy fluctuations and structural inhomogeneities in c-plane $In_xGa_{1-x}N$ quantum wells: theory of ground and excited electron and hole states*”, *RSC Advances*, vol 6, p 64513, 2016.
103. Sahoo, S.K., Sahoo, B.K., Sahoo, S., “*Piezoelectric Polarization effect and Phonon Relaxation Rates in Binary Wurtzite Nitrides*”, *Adv Mat Lett*, vol 5, p 80, 2014.
104. Dahal, R., Pantha, B., Li, J., Lin, J. Y., and Jiang, H. X., “*InGaN/GaN multiple quantum well solar cells with long operating wavelengths*”, *Appl Phys Lett*, vol 94, p 063505, 2009.

105. Benyettou, F., Aissat, A., Vilcot, J.P., “*Modeling and simulation of InAsP/GaAs quantum well solar cell*”, in the 3rd International Renewable and Sustainable Energy Conference IRSEC 2015 Marrakech, December 2015.
106. Law, M., Greene, L. E., Johnson, J. C., Saykally, R., and Yang, P., “*Nanowire dye sensitized solar cells*”, *Nature Mat*, vol 4, pp 455–459, 2005.
107. Kayes, B. M, Atwater, H. A., and Lewis, N. S., “*Comparison of the Device Physics Principles of Planar and Radial p-n Junction Nanorod Solar Cells*”, *J Appl Phys*, Vol 97, p 114302, 2005.
108. Benyettou, F., Aissat, A., Vilcot, J.P., Berbezier, I., “*Modeling and optimization of core/shell p-i-n Si/Si_{0.2}Ge_{0.8} nanowire for photovoltaic*”, *Optik*, vol 149, pp 246–251, 2017.
109. Giannuzzi, L.A., Stevie F.A., “*Introduction to Focused Ion Beams*”, Springer, New York, 2005.
110. Orloff, J., Utlaut, M., Swanson, L., “*High resolution Focused Ion Beams: FIB and its Applications*”, New York, 2002.
111. Drăghici, M., “*In-plane gate transistors fabricated by focused ion beam implantation in negative and positive pattern definition*”, Thèse de Doctorat, Université de Bochum, Allemagne, 2006.
112. Orloff, J., Swanson, L., Utlaut, M., “*High Resolution Focused Ion Beams: FIB and its Applications: The Physics of Liquid Metal Ion Sources and Ion Optics and Their Application to Focused Ion Beam Technology*”, Springer Science & Business Media, 2012.
113. Boufaa, N., “*Elaboration et caractérisation des nano poudres d’oxyde d’étain (SnO₂)*”, Thèse de Magister, Université de Mentouri de Constantine, 2012.
114. Reyntjens, S., Puers, R., "A review of focused ion beam applications in microsystem technology", *J. Micromech Microeng*, vol 11 (4), pp 287–300, 2001.
115. Emmanuel Dupuy, “*Croissance et spectroscopie de boîtes quantiques diluées d’InAs/InP(001) pour des applications nanophotoniques à 1.55 μm*”. Thèse de Doctorat, Université de Sherbrooke, (2009).
116. Ulrich, H., Wijnaendts-van-Resandt, R.W., Rensch, C., Ehrensperger, W., “*Direct writing laser lithography for production of microstructures*”, *Microelectronic Engineering*, vol 6 p 77, 1987.
117. Ishizaka, A. and Shiraki, Y., “*Low Temperature Surface Cleaning of Silicon and Its Application to Silicon MBE*”, *J Electrochem Soc*, vol 133, p 666, 1986.