

UNIVERSITE DE BLIDA 1

Faculté des Sciences

Département de Physique

THESE DE DOCTORAT

en Physique

Spécialité : Physique Fondamentale et Appliquée

ETUDE ET MODÉLISATION DES STRUCTURES À BASE DES BOITES QUANTIQUES POUR LA CONVERSION PHOTOVOLTAÏQUE.

Par

Abdelmoumene BENAHMED

Devant le jury composé de :

M.E.A.BENAMAR	Professeur, Université de Blida 1	Président
M.DERBAL	Professeur, Université de Blida 1	Examineur
M.ZAZOUI	Professeur, Université Hassan II (Maroc)	Examineur
K. RAHMOUN	Professeur, Université de Tlemcen	Examineur
A. AISSAT	Professeur, Université Blida 1	Rapporteur

Blida, Novembre 2017

RESUME

L'objectif de cette thèse est l'étude de la caractérisation des structures à base de boîtes quantiques pour des applications optoélectroniques et photovoltaïques. On a étudié le comportement de notre échantillon (InAs/GaAs), qui a été élaboré par le dispositif (EJM) 'Epitaxie par Jets Moléculaires', en utilisant la Microscopie Électronique à Balayage (MEB) et la Microscopie à Force Atomique (AFM) comme des techniques de caractérisation morphologique et microstructurale. Ensuite, nous avons analysé les états électroniques d'un point quantique d'InAs cultivés sur un substrat de GaAs, à l'aide de code de calculs COMSOL, avec chacun des types de géométrie (rectangulaire, sphérique et conique) en gardant les mêmes dimensions (l'épaisseur de la couche de mouillage, l'hauteur et le rayon de la boîte quantique), où nous avons constaté que l'énergie est inversement proportionnelle aux dimensions de la boîte quantique. Dans une autre partie, nous avons modélisé et simulé une cellule solaire de type (p-i-n) avec une mesure de croissance des boîtes quantiques dans la région intrinsèque jusqu'à 50 BQs, en utilisant à fois des formes rectangulaires ou elliptiques. Il a été pris en considération dans cette étude, l'influence du coefficient d'absorption, de l'énergie de transition et du rendement quantique externe. Nous avons montré que l'amélioration du rendement de cette cellule solaire a été obtenue par l'incorporation des boîtes quantiques et on a également constaté que le rendement de la structure elliptique est plus efficace que celui de la structure rectangulaire. Dans la dernière partie, nous avons apporté un échantillon (InAs(Sb)/GaAs), où nous avons fait des manipulations (Mesures de caractéristique électrique (Intensité - Tension)) qui ont donné de bons résultats. Nous avons accompli nos mesures avec une programmation pour l'extraction des paramètres électriques tels que : I_s (Intensité de saturation), I_{ph} (intensité de photocourant), R_s (résistances en série), R_{sh} (résistance shunt) et n (facteur d'idéalité), comme on a aussi étudié, analysé et discuté l'influence de ces paramètres sur les performances de notre cellule photovoltaïque.

ABSTRACT

The objective of this thesis was to study the characterization of structures based on quantum dots for optoelectronic and photovoltaic applications. It describes several analytical techniques for the study of the morphological and microstructural characterization of our sample with Scanning Electron Microscopy (SEM) and Atomic Force Microscopy (AFM). We then presented a study based on the analysis of the electron states of a quantum dot of InAs grown on a GaAs substrate for different geometries (rectangular, spherical, conic). We have made COMSOL calculations with each of the geometry types with the same dimensions (height, radius, thickness of the wetting layer). We have found that energy is inversely proportional to quantum box dimensions. In another part, we have modeled and simulated a (p-i-n) type solar cell with a measurement of growth of quantum dots in the intrinsic region up to 50 BQs, using both rectangular and elliptic shapes. In this study, the influence of the absorption coefficient, the transition energy and the external quantum efficiency were taken into consideration. We have shown in this study that the efficiency improvement of this solar cell was obtained by the incorporation of the quantum dots and it was also found that the efficiency of the elliptic structure is more efficient than the rectangular structure. In the last part we brought a sample (InAs (Sb) / GaAs), we have done the manipulations (Measurements of electrical characteristic (Intensity - Tention)) with good results and we carried out our measurements by programming for 1 Extraction of electrical parameters such as I_s (Saturation intensity), I_{ph} (photocurrent intensity), R_s (resistors in series), R_{sh} (shunt resistance) and n (ideality factor), as studied, analyzed and discussed the influence of these parameters on the performance of our photovoltaic cell.

ملخص

الهدف من هذه الأطروحة دراسة خصائص بعض الهياكل القائمة على أساس نقاط الكم للتطبيقات الإلكترونية وبصرية و الضوئية. العديد من التقنيات التحليلية تم إستعراضها لدراسة الوصف المورفولوجي والمجهري من عينة لدينا مع المجهر الإلكتروني الماسح و مجهر القوة الذرية.

قدمنا أيضا دراسة تستند على تحليل الحالة الإلكترونية لنقطة الكم ذات هندسات مختلفة (مستطيلة ، كروية، مخروطية الشكل) نمت على ركيزة الغاليوم. لقد قمنا بإجراء حسابات على برمجية "كومسول" مع كل نوع من الهندسة و بنفس الأبعاد (الطول ، نصف قطرها ، سمك الشبكية). نجد أن الطاقة تتناسب عكسيا مع أبعاد نقطة الكم. و بعد ذلك قمنا ببرمجة ومحاكاة لنوع من الخلايا الشمسية مع تزايد نمو النقاط الكمية في المنطقة الجوهريّة إلى 50 نقطة وذلك باستخدام النقاط الكمية بالأشكال المستطيلة أو البيضاوية. و لقد أخذنا بعين الإعتبار في هذه الدراسة تأثير معامل الامتصاص، والطاقة التي تمر بمرحلة انتقالية، وكفاءة الكم الخارجي . قد أظهرنا في هذه الدراسة أن تحسين أداء هذه الخلايا الشمسية تم الحصول عليها من خلال دمج نقاط الكم وتبين أيضا أن المردود من هيكل بيضاوي الشكل هو أكثر فعالية من هيكل مستطيل.

وبالنسبة للجزء الأخير قمنا بأخذ العينة وحققنا مع خطواتنا نتائج جيدة بأخذ قياسات المميزة الكهربائية (المقاومة على التسلسل)، (المقاومة الفونونية)، (معامل المثالية)، (تيار الفتوني) و (تيار التشبع). وفي النهاية حققنا بنجاح عدة خصائص كهربائية لهذه العينة.

Remerciements

Je remercie d'abord mon DIEU.

J'aimerais tout d'abord remercier mon directeur de recherche, Monsieur Abdelkader AISSAT, Professeur à la faculté des technologies de Blida 1 qui m'a guidé tout au long de ma thèse avec sa patience, sa rigueur, et son soutien scientifique et moral.

Je tiens à exprimer ma profonde reconnaissance et remerciement à Mr Mohamed el Amine BENAMAR, Professeur à la faculté des sciences de Blida 1 et directeur du laboratoire "FUNDAPL", de m'avoir accueilli au sein de son laboratoire avec ses conseils avisés qui m'ont permis de réaliser ce travail dans les bonnes conditions, je tiens particulièrement à le remercier d'avoir accepté de présider le jury de thèse.

Je tiens aussi à exprimer mes sincères remerciements au Professeur Mr. DERBAL (faculté des sciences de Blida 1), Professeur Mimoun ZAZOUI (l'Université Hassan II (Maroc)), Professeur Khadidja RAHMOUN (Unité de Recherche Matériaux et énergies renouvelables - Université de Tlemcen) de m'avoir fait l'honneur d'examiner ce travail.

Je tiens à exprimer mes remerciements à tous nos collaborateurs, et en particulier au Monsieur Hassen MAAREF , professeur à la faculté des sciences de Monastir et directeur du LMON, pour nous avoir fourni des échantillons de très grande qualité, ce qui nous a permis d'obtenir des résultats intéressants. Également je tiens à remercier le Professeur Mimoun ZAZOUI pour son invitation pendant deux mois au laboratoire de Physique de la Matière Condensée & Énergies Renouvelables (LPM CER) de l'Université Hassan II (Maroc) et de m'avoir fait l'honneur d'examiner ce travail. Un grand merci au Pr. BENYOUNES OUKARFI le Responsable d'équipe de Systèmes des Automatismes Industriels et des Énergies Renouvelables au laboratoire d'Électronique, Électrotechniques, Automatique et traitement de l'information (EEA&TI) de la même université de Hassan II, Maroc pour son aide et son soutien scientifique.

Je tiens à remercier vivement Monsieur Toufik DOMAZ, enseignant-chercheur au Labo (FUNDAPL), Université de BLIDA1 ainsi que son épouse Djamilia DOMAZ, Maitre de conférence au centre de recherche (CDTA) Baba Hacén, Alger et je les suis reconnaissant pour tous ses conseils précieux, ses suivis et ses encouragements continus.

Je remercie Monsieur Mohamed Cherif MEZIANE, enseignant-chercheur au Labo (FUNDAPL) à l'Université de BLIDA1 pour l'aide qu'il m'a fourni pour la réalisation de belles images par la Microscopie Électronique à Balayage.

Un grand merci à Docteur Latifa. BABA AHMED, Université de BLIDA1 pour les discussions enrichissantes ainsi que pour le soutien scientifique et moral.

Je remercie vivement Monsieur Mohamed_SIDOUMOU, enseignant-chercheur et maître de conférences à l'Université de BLIDA1 pour son aide et leurs conseils précieux.

Je voudrais aussi remercier Messieurs K.A.BOUTELDJA, Ilyes.BABA AHMED enseignants-chercheurs à l'Université de BLIDA1 pour toute l'aide qu'ils m'ont apportée durant toutes ces années passées.

Je remercie également Dr Amine. SELLAM à l'Université Hassan II (Maroc) surtout au cours de mes séjours au Labo (LPMCER).

Je remercie aussi mon ami et frère, le doctorant Rachid. BESTAM pour son aide et son soutien (Université de BLIDA1) et je tiens à remercier aussi Dr KHMISSE Hammadi (Université des Bords du Nord - Arar, Arabie saoudite) et Dr Salah SAADAOUI (Université du Roi Khaled, Arabie saoudite) au cours de mes séjours au Labo (LMON).

Je remercie tous mes amis de Tlemcen et bien particulièrement (Dr Med Mostapha BOUZAKI et les doctorants Amina BOURICHE, Mourad MERAOUDI...) qui ayant contribué d'une manière directe ou indirecte à la réussite de ce travail.

Je remercie tous mes amis de Mohammedia (Maroc) et bien particulièrement les doctorants : Mohammed BOUABDELLAOUI, Mohamed ELYAZIDI, Noureddine BEN AFKIR, Nawal TAOUFIK et un merci bien particulier à la doctorante Amal TARBI pour son aide en me permettant de faire des mesures de I-V résolue.

Un grand merci à tous les permanents, les doctorants, les techniciens et les personnels du notre laboratoire (FUNDAPL).

Finalement, je tiens à remercier infiniment mes très chères PARENTS, mes SŒURS, mes FRÈRES et toute ma famille pour le soutien et les conseils durant toute la période de la préparation de ma thèse.

À la mémoire de mon défunt père.

TABLE DES MATIERES

RESUMÉ.....	2
REMERCIEMENTS.....	5
TABLE DES MATIERES.....	7
LISTE DES ILLUSTRATIONS, GRAPHIQUES ET TABLEAUX.....	11
INTRODUCTION GENERALE.....	14
1.LES SEMI-CONDUCTEURS ET L’EFFET PHOTOVOLTAÏQUE.....	18
1.1.Introduction	18
1.2. L’effet photovoltaïque.....	21
1.3. Principaux types de cellules solaires	22
1.3.1. Cellules photovoltaïques inorganiques	22
1.3.2.Cellules photovoltaïques organiques	23
1.4. Matériaux et Phénomènes de contact	23
1.4.1. Phénomènes transitoires	24
1.4.1.1 Principe de la structure en bande	25
1.4.1.2. Notion de gap direct, gap indirect	27
1.4.1.3 Masse effective	28
1.4.1.3.1. Masse effective des électrons	28
1.4.1.3.2. Masse effective des trous.....	29
1.4.1.4. Caractéristique spécifique aux matériaux à gap direct	29
1.4.1.4.1.Bande de conduction	30
1.4.1.4.2.Bande de valence	30
1.4.2. Les phénomènes électriques	31
1.4.2.1 Bilan électronique des semi-conducteurs :	31
1.4.2.2. La jonction p-n.....	31
1.4.2.3. La jonction p-n sous polarisation.....	32

1.4.2.4. Caractéristiques courant-tension.....	33
1.4.3. Phénomènes photovoltaïques	35
1.4.3.1 La jonction p-n sous éclairement.....	35
1.4.3.2 Photo-courant de génération.....	35
1.4.3.3 Circuit électrique équivalent d'une cellule solaire	36
1.4.3.4 Paramètres Photovoltaïques extraits de la caractéristique I-V	37
1.5. Spectre du rayonnement solaire	39
1.6. Constante d'illumination.....	40
1.7. Désaccord entre énergie du photon et énergie de gap.....	41
1.8 Conclusion.....	42
2. LES SEMI-CONDUCTEURS « III-V»ET LES BOITES QUANTIQUES....	43
2.1. Introduction	43
2.2. L'intérêt pratique des semi-conducteurs III-V.....	43
2.2.1. Structure cristalline.....	45
2.2.2. Structure des bandes d'énergie	46
2.2.3. Propriétés électroniques.....	49
2.2.3.1. Confinement des porteurs.....	49
2.3. les boîtes quantiques.....	52
2.3.1. Concepts généraux sur les boîtes quantiques	52
2.3.2. Croissance des boites quantiques	53
2.3.2.1. Les méthodes de croissances	54
2.3.2.1.1. La méthode lithographie.....	54
2.3.2.1.2. La méthode de croissance épitaxiale	54
2.3.2.2. Les techniques de croissance	55
2.3.3.La contrainte	56
2.3.4.Structure en énergie des boîtes quantiques.....	57
2.3.5. La contrainte sur le Gap d'énergie	59

2.3.6. Interpolation.....	61
2.3.6.1. Paramètre de maille	61
2.3.6.2. Désaccord paramétrique	62
2.3.6.3. L'épaisseur critique	63
2.3.6.4. Gap d'énergie sans contrainte.....	64
2.4 Conclusion.....	65
3. CARACTERISATION MORPHOLOGIQUE ET MICROSTRUCTURALE DES STRUCTURES A BOITES QUANTIQUES	66
3.1.Introduction	66
3.2. L'étude de caractérisation morphologique et microstructurale: Série S0301	66
3.2.1 Structure d'échantillon	66
3.2.2 Conditions de croissance	67
3.2.3 Etude surfacique de la structure.....	68
3.2.4 Décoration de nanoparticules suivant une observation perpendiculaire	70
3.2.5 Décoration de nanoparticule suivant une observation horizontale	72
3.3 Transitions optiques dans les boites quantiques.....	74
3.3.1 L'objectif de ce travail.....	74
3.3.2 Méthode	75
3.3.3 Résultats et discussions	77
3.4 Conclusion.....	82
4. MODELISATION ET SIMULATION DE BOITES QUANTIQUES POUR LES APPLICATIONS DE CELLULES SOLAIRES.....	84
4.1 Introduction	84
4.2 L'influence de l'incorporation de matériaux à l'échelle nanométrique (boites_	
quantiques) dans une cellule photovoltaïque	84
4.3 Approche de la théorie	85
4.4 Le coefficient d'absorption	86

4.5 Résultats et discussion.....	87
4.5 Conclusion.....	93
5. ETUDE DES PROPRIÉTÉS ELECTRIQUES DES CELLULES SOLAIRES	
À BASE DE BOITES QUANTIQUES D’InAs.....	94
5.1 Introduction.....	94
5.2 Procédure expérimentale.....	94
5.2.1 Présentation de l’échantillon.....	94
5.2.2 Principe de la caractéristique (I-V).....	96
5.3 Extraction des paramètres de la cellule solaire.....	97
5.3.1 Modèle de caractérisation.....	97
5.3.2 Méthode de Levenberg-Marquardt (LM).....	98
5.3.3 Extraction des paramètres.....	98
5.4 Processus d'identification.....	98
5.5 Application et simulation numérique:.....	99
5.5.1Caractéristiques courant-tension (I-V) et puissance-tension (P-V) de la cellule solaire(G2749-3):.....	99
5.5.1.1 Calcul de puissance maximale.....	100
5.5.1.2 Développement du circuit équivalent à la cellule PV.....	101
5.5.1.2.1 Effets de la résistance en série sur l'efficacité de conversion de puissance.....	101
5.5.1.2.2 Effets du facteur d'idéalité (n) sur l'efficacité de conversion de puissance.....	105
5.5.1.2 .3 Effets de la résistance shunt sur l'efficacité de conversion de puissance.....	106
5.6 Conclusion.....	108
CONCLUSION GENERALE.....	109
ANNEXE 1:.....	112
ANNEXE2:.....	113
BIBLIOGRAPHIE.....	1134

LISTE DES ILLUSTRATIONS, GRAPHIQUES ET TABLEAUX

Figure 1.1:	Capacité solaire d'électricité cumulée (2014)	20
Figure 1. 2:	Évolution des rendements record en laboratoire par technologie (source:NR-EL) http://en.wikipedia.org/wiki/File:Best_Research-Cell_Efficiencies.png .	20
Figure 1. 3:	Schema équivalent d'une photopile.	21
Figure 1. 4:	Principaux modes d'investigation en photoconduction.	24
Figure 1. 5:	Conductivité et résistivité pour différents types de matériaux.	25
Figure 1. 6:	Couplage des orbitales ns^2 et np^2 dans le cas d'un grand nombre d'atomes ; formation des bandes.	26
Figure 1. 7:	Transition inter bande d'électrons dans un semi-conducteur	28
Figure 1.8:	Schéma de la jonction p-n.	31
Figure 1. 9:	Schéma de principe d'une jonction P-N polarisée en direct et son diagramme de bande d'énergie	33
Figure 1. 10:	Schéma équivalent d'une diode idéale.	34
Figure 1. 11:	Schéma équivalent d'une diode réelle.	35
Figure 1. 12:	Schéma d'une cellule solaire avec la jonction P-N	36
Figure 1. 13:	Schéma électrique d'une photopile.	37
Figure 1.14 :	Caractéristique courant-tension (courbe bleue) et puissance d'une cellule photovoltaïque sous éclairement AM1.5 (courbe rouge) avec les grandeurs physiques associées.	38
Figure 1. 15:	Effet de l'énergie lumineuse sur les différentes bandes interdites	39
Figure 1. 16:	Le spectre solaire AM0, AM1 et AM 1.5	40
Figure 1. 17:	Description du nombre d'air masse	41
Figure 1. 18:	Types de recombinaison.	42
Figure 2. 1 :	Largeur de bande en fonction du paramètre cristallin pour les alliages III-V.	45
Figure 2. 2 :	Réseau cristallin dans la structure zinc-blende.	46
Figure 2. 3 :	Structures de bandes de InAs et GaAs.	47
Figure 2. 4 :	Première zone de Brillouin de la structure zinc blende.	47
Figure 2. 5 :	Surfaces iso-énergie dans la première zone de Brillouin de GaAs.	48
Figure 2. 6 :	Évolution de la densité d'états avec le niveau de confinement quantique.	52

Figure 2. 7 :	Vue au microscope AFM d'un plan ($0.5 \times 0.5 \text{ mm}^2$) de boîtes quantiques d'InAs sur substrat de GaAs avec un dopage de Si de $5.10^{11} \text{ cm}^{-2}$.	54
Figure 2. 8 :	Les trois modes de croissance épitaxiale	55
Figure 2. 9 :	Illustration des deux types de déformation.	55
Figure 2. 1 :	Illustration des deux types de déformation.	56
Figure 2. 10 :	a) Structure énergétique d'une boîte quantique b) Géométrie 2D d'une boîte quantique et d'une couche de mouillage.	58
Figure 2. 11 :	Spectre de luminescence d'une structure à boîtes quantiques InAs/GaAs à basse température.	58
Figure 2. 12 :	Evolution de l'énergie de bande interdite en fonction de l'état de contrainte d'une couche déposée sur un substrat.	59
Figure 2. 13 :	Potentiel de confinement des porteurs dans une boîte quantique.	61
Figure 2. 14 :	Variation du paramètre de maille de l' $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ en fonction de la concentration d'indium.	62
Figure 2. 15 :	Variation du désaccord paramétrique en fonction de la concentration d'indium de la structure $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As} / \text{GaAs}$	62
Figure 2. 16 :	Variation de l'épaisseur critique en fonction de la fraction d'indium.	64
Figure 2. 17 :	Évolution du gap d'énergie interdite de l' $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ en fonction de la concentration d'indium en introduisant le paramètre de courbure « b ».	65
Figure 3. 1 :	Schéma type de la structure des Boîtes quantiques InAs/GaAs.	67
Figure 3. 2 :	Images AFM ($1 \mu\text{m} \times 1 \mu\text{m}$) montrant l'évolution de densité surfacique des boîtes quantiques d'InAs déposée sur un substrat GaAs.	68
Figure 3. 3 :	Images MEB en section pour (a) (b) et (c) d'une structure InAs/GaAs pour différents agrandissements.	69
Figure 3. 4 :	Image MEB en section perpendiculaire des nanoparticules dans la structure S0301 suivant une densité volumique de 5.89 g/cm^3 .	70
Figure 3. 5 :	Profil en profondeur à l'intérieur de la couche dans l'échantillon de référence obtenu par EDX suivant une observation perpendiculaire.	70
Figure 3. 6 :	Spectre d'analyse EDX pour différents rayons des nanoparticules de la structure S0301 suivant l'axe perpendiculaire.	71
Figure 3. 7 :	Image MEB en section horizontale des nanoparticules dans la structure S0301 suivant une densité volumique de 6.63 g/cm^3 .	72

Figure 3. 8 :	Profil en profondeur à l'intérieur de la couche dans l'échantillon de référence obtenu par EDX suivant une observation horizontale.	72
Figure 3. 9 :	Spectre d'analyse EDX pour différents rayons des nanoparticules de la structure S0301 suivant l'axe Horizontale.	73
Figure 3. 10 :	Analyse cartographique EDX des nanoparticules Indium(In), Galium(Ga) et Arsenic(As) sur notre surface d'analyse de la structure S0301.	74
Figure 3. 11 :	Le principe de l'illustration de la structure de bande pour l'auto-organisation des boites quantiques	77
Figure 3. 12 :	Les valeurs de l'énergie pour la structure conique ($E = 1.05\text{eV}$)	78
Figure 3. 13 :	Les valeurs de l'énergie pour la structure elliptique ($E = 0.95\text{ eV}$)	78
Figure 3. 14 :	Les valeurs de l'énergie pour la structure rectangulaire ($E = 0.91\text{ eV}$)	79
Figure 3. 15 :	Les valeurs de l'énergie pour les changements dans le rayon	80
Figure 3. 16 :	Les valeurs de l'énergie pour les changements dans l'épaisseur	81
Figure 3. 17 :	Les valeurs de l'énergie pour les changements dans l'épaisseur de la couche de mouillage.	81
Figure 4. 1 :	Structure d'une cellule solaire avec des boites quantiques (InAs / GaAs)	86
Figure 4. 2 :	La forme rectangulaire et elliptique (a et b).	87
Figure 4. 3 :	La variation de l'énergie de transition en fonction du rayon de boites quantiques à base du InAs / GaAs pour les deux formes rectangulaire et elliptique.	88
Figure 4. 4 :	La variation de EQE en fonction de la longueur d'onde d'une structure p-i-n et les boites quantiques avec un certain nombre de $n = 20$.	90
Figure 4. 5:	La Variation du coefficient d'absorption en fonction de la longueur d'onde des formes rectangulaire et elliptique	90
Figure 4. 6 :	La variation de la puissance en fonction de la tension pour différentes formes de boites quantiques, pour des formes rectangulaire et elliptique.	91
Figure 4. 7 :	La variation du rendement de la structure en fonction du nombre de boites quantiques pour les deux formes rectangulaire et elliptique.	92
Figure 5. 1:	Schéma type de la structure des Boîtes quantiques(BQs) InAs/GaAs développée par MBE (G2749-3).	95
Figure 5. 2:	Échantillon(G2749) mis dans un cryostat (300°K).	95
Figure 5. 3:	Images de l'ensemble du montage expérimental pour les mesures I-V.	96

Figure 5. 4:	La variation de l'intensité (I) en fonction de la tension (V) pour la cellule de référence G2749).	96
Figure 5. 5:	Caractéristique $I=f(V)$ pour les deux cas expérimental et simulé.	99
Figure 5. 6:	Le montage de résistances en série (R_s) pour notre manipulation.	102
Figure 5. 7:	Effet de la variation de R_s sur les caractéristiques I-V pour la cellule (G2749)	103
Figure 5. 8:	La variation de la puissance maximale P_m en fonction de la résistance série R_s pour la cellule solaire (G2749).	104
Figure 5.9:	La variation de la caractéristique I-V pour différentes valeurs du facteur d'idéalité (n pour la cellule solaire (G2749).	105
Figure 5. 10:	La variation de la puissance maximale P_m en fonction du facteur d'idéalité (n) pour la cellule solaire (G2749).	106
Figure 5. 11:	La variation de la caractéristique I-V pour différentes valeurs de la résistance shunt (R_{sh} pour la cellule solaire (G2749-3).	107
Figure 5. 12:	La variation de la puissance maximal P_m en fonction de la résistance "shunt" R_{sh} pour la cellule solaire (G2749-3).	107
Tableau 2. 1:	Paramètres caractéristiques pour les principaux composés III-V.	44
Tableau 2. 2:	Caractéristiques (énergies interbandes et masses effectives) des structures électroniques utilisées pour l'ajustement des pseudopotentiels de GaAs/InAs.	49
Tableau 2. 3:	Les potentiels de déformation pour InAs et GaAs	60
Tableau 3. 1:	Les potentiels de déformation pour InAs et GaAs.	67
Tableau 3. 2:	Les niveaux d'énergies pour chaque géométrie dans l'état fondamental E_0 .	79
Tableau 4. 1:	Transition des niveaux d'énergies pour différentes valeurs du Rayon des boites quantiques.	89
Tableau 5.1 :	Paramètres des caractéristiques internes de la cellule (G2749).	99

INTRODUCTION GENERALE

La consommation d'énergie mondiale ne cesse d'augmenter. Elle est basée sur des ressources fossiles non renouvelables, coûteuses et donc rapidement épuisables. De plus, c'est une énergie polluante, elle est intimement liée au dérèglement climatique comme l'effet de serre. Les préoccupations mondiales environnementales font que le monde tente de s'orienter vers d'autres types d'énergies dites renouvelables, inépuisables et propres. Il existe plusieurs types d'énergies renouvelables, comme l'énergie solaire, éolienne, géothermique, biomasse et les énergies marines [1,2], etc.

Depuis plus de cinquante ans, les scientifiques et le monde industriel ont investi toutes ces formes d'énergies renouvelables. Mais comme le soleil est une source inépuisable et une source disponible à longueur d'année, et étant donné que le rayonnement solaire incident total sur la terre et au niveau de la mer est plus de 12500 fois la consommation d'énergie moyenne mondiale, il est intéressant d'utiliser l'immense potentiel de cette énergie pour la substitution des énergies fossiles dans le monde. Dès le début de la recherche, de nouvelles formes d'énergies (renouvelables) comme l'énergie solaire a immédiatement attiré l'attention de la communauté scientifique et les développeurs industriels avec un taux de croissance voisin de 60% en 2004 et avec une croissance annuelle moyenne de 30% durant ces dernières années[3-4].

Les cellules solaires sont un moyen de transformer l'énergie solaire en énergie électrique. Elles sont basées sur l'effet photoélectrique [5]. Elle est dite filière de conversion photovoltaïque. Les premières cellules étaient à base de Silicium, mais le développement technologique a fait naître plusieurs types de cellules de différents matériaux, ce qui a affecté plusieurs stratégies d'amélioration de la performance de ces cellules photovoltaïques.

Les coûts de production et l'efficacité des cellules solaires sont des facteurs importants pour faciliter la commercialisation des CPVs (cellules photovoltaïques). Les trois générations de cellules solaires combinent ces facteurs de manières différentes.

La première génération de ces cellules solaires sont des cellules solaires à base de silicium et un rendement expérimental de 24.7% sur une cellule de 4 cm² a pu être atteint en laboratoire en 1999 par Zaho et al. [6] puis d'autres technologies de deuxième génération moins courantes comprennent les cellules de silicium ruban , le silicium microcristallin, les cellules tandem micromorphes et les cellules HIT(hétérojonction avec une couche intrinsèque) qui réduisent le coût des matériaux, mais aussi réduisent l'efficacité. De même, d'autres technologies prometteuses de troisième génération à leur stade incluent des cellules de bandes intermédiaires[7], des cellules

de génération d'excitons multiples[8]; utilisant des nanotechnologies telles que les nanotubes, les boîtes quantiques et des technologies pour ajuster les propriétés optiques de la lumière incidente pour être en accord avec les capacités d'absorption des cellules photovoltaïques.

Aujourd'hui tout l'enjeu de cet axe de recherche est d'augmenter le rendement en minimisant les coûts de fabrication pour une plus large utilisation dans le futur. Ceci passe par la recherche de nouveaux matériaux.

Actuellement, différents types de structures sont développés à travers les laboratoires de recherche. Les plus en avance élaborent déjà des structures de cellules dites cellules solaires à bandes intermédiaires (IBSC)[7]. Ces cellules peuvent atteindre théoriquement des rendements très élevés qui dépassent de loin le rendement des cellules solaires mono-gap classiques [3,9]. Aussi, les améliorations engendrées par cette technologie passe par l'insertion de cristaux photoniques, de matériaux métamorphiques, de puits quantiques, de fils quantiques, de boîtes quantiques ... En effet, ceci améliore grandement le domaine d'absorption de la lumière par ces objets quantiques sus cités. Dans toutes ces disciplines on a réussi à manipuler des objets de taille nanométrique. On s'intéresse tout particulièrement aux cellules dites à base de semi-conducteurs III-V, où le GaAs représente le substrat et InAs les boîtes quantiques insérées, notés InAs/ GaAs. Le caractère 0D de la densité des états d'énergie a une influence marquée sur les propriétés optiques et électroniques de ces nanostructures. Ces boîtes quantiques sont des candidats de choix pour des applications aux sources laser et aux détecteurs infrarouges [9,10].

Ce travail qui s'inscrit dans ce contexte porte sur l'étude et la caractérisation des structures à base des boîtes quantiques pour des applications optoélectroniques et photovoltaïques. Le GaAs utilisé comme substrat d'une cellule a des avantages significatifs en comparaison au substrat Silicium. La vitesse de saturation et la mobilité des électrons sont plus élevées, de plus, le premier substrat présente un gap d'énergie direct à l'opposé du silicium qui présente un gap d'énergie indirect. Cet avantage signifie que les cellules solaires à base de GaAs peuvent être utilisées comme émettrices de la lumière de façon plus efficace.

En 1997, l'influence d'incorporation de matériaux à l'échelle nanométrique (BQs) dans une bande intermédiaire d'une cellule photovoltaïque a suscité un grand intérêt [11]. En 2013, une efficacité de conversion de 44.0% a été obtenue à l'aide d'une structure 3Js GaInP/GaAs/GaInNAs(Sb) [12] et en théorie, l'insertion d'une bande intermédiaire bien ajustée peut augmenter l'efficacité de conversion jusqu'à 63% [3].

De nos jours, plusieurs modèles de structures sont actuellement envisagés dans plusieurs laboratoires pour atteindre le rendement potentiel le plus efficace dans le terrain photovoltaïque,

l'objectif est d'augmenter le courant de court-circuit sans diminuer la tension de circuit ouvert du composant.

Ce travail a été réalisé au sein du Laboratoire de Physique fondamentale et appliquée (FUNDAPL) à la Faculté des Sciences de l'université BLIDA1. Il est présenté suivant cinq chapitres :

Le premier chapitre porte sur une synthèse des concepts généraux liés à une étude bibliographique sur l'effet et le principe de fonctionnement de la cellule photovoltaïque à base de semi-conducteur.

Le deuxième chapitre porte plus spécifiquement sur des notions générales sur les matériaux semi-conducteurs de base que nous avons utilisés le long de ce travail : les composés binaires (III-V) et ternaires.

Le troisième chapitre traite des méthodes d'analyses utilisées. En premier on y décrit plusieurs techniques d'analyses pour l'étude de la caractérisation morphologique et microstructurale de notre échantillon (série S0301). La Microscopie électronique à balayage (MEB) et l'analyse (EDX) ont été utilisées pour l'analyse élémentaire qualitative des nanoparticules (boîtes quantiques) déposées sur le substrat (GaAs). Cette partie décrit d'une part les résultats obtenus au laboratoire de physique fondamentale et appliquée (FUNDAPL), par le MEB environnemental Quanta 650 associé à l'EDX : BRUKER X flash 6I10, couplés à des études expérimentales de Microscope à Force Atomique (AFM) faites au laboratoire (LMON) au Monastir, Tunisie, en second lieu nous présenterons quelques résultats de l'étude générés par le logiciel de simulation Comsol, en considérant les transitions optiques dans les boîtes quantiques.

Dans le quatrième chapitre nous présenterons les résultats de l'étude des propriétés (structurales / optoélectroniques) des boîtes quantiques InAs cultivées sur un substrat GaAs dans une cellule photovoltaïque.

Le cinquième chapitre sera consacré à l'étude des propriétés électriques des cellules solaires à base des boîtes quantiques.

L'analyse de ces résultats nous permettra de voir l'impact de ces boîtes quantiques sur les cellules photovoltaïques. Nous cloterons ce manuscrit par une conclusion générale où nous résumerons l'essentiel du travail réalisé ainsi que les perspectives qui se dégagent par cette synthèse.

CHAPITRE 1

LES SEMI-CONDUCTEURS ET L'EFFET PHOTOVOLTAÏQUE

1.1.Introduction

La technologie photovoltaïque (PV) transforme l'énergie solaire en énergie électrique en utilisant des semi-conducteurs. C'est une technologie qui nécessite un grand potentiel, pour le développement technique.

Cette technologie est à la base des cellules solaires photovoltaïques qui ont commencé à être étudiées dès les années 1950. La première cellule solaire à base de silicium cristallin a été développée dans les laboratoires Bell avec un rendement de 6% [13].

La découverte de l'effet photovoltaïque est communément attribuée au physicien Edmond Becquerel, qui observa un photo-courant quand des électrodes en platine, recouvertes de bromure d'argent ou de chlorure d'argent, sont illuminées dans une solution aqueuse. Il a trouvé que certains matériaux pouvaient produire une petite quantité de courant sous l'effet de la lumière. Par la suite, pour expliquer les résultats de l'effet photoélectrique, Albert Einstein a introduit l'aspect de la lumière qui en plus de son caractère ondulatoire, son énergie[5]. Ainsi, plus la longueur d'onde est courte, plus l'énergie du photon est grande. Cette découverte valut à Albert Einstein le prix Nobel en 1905 [14].

En 1873 et 1876, Smith et Adams ont déposé, respectivement, les premiers rapports sur la photoconductivité en travaillant sur du silicium [15].

L'anthracène était le premier composant organique où la photoconductivité a été observée par Pochettinon en 1906 et Volmer en 1913. À la fin des années 1950, l'utilisation potentielle de matières organiques comme photorécepteurs de systèmes d'imagerie a été reconnue.

En 1954, la première cellule solaire inorganique a été développée dans les laboratoires Bell. Ainsi l'intérêt scientifique et le potentiel commercial ont conduit à l'accroissement de la recherche en photoconductivité [13].

En 1986, Tang publia la première hétérojonction organique, suivie cinq ans plus tard par Hiramoto qui a conçu la première structure interpénétrée à base de petites molécules par co-évaporation.

En 2001, Shmidt-Mende ont réalisé une cellule solaire auto-assemblée à base de cristaux liquides de hexabenzocoronene et pérylène[16], et quelques années plus tard, les avancées scientifiques et technologiques sont telles qu'en 2008, l'entreprise Fujikura (fabriquant de

composés électroniques) est parvenue à faire fonctionner une cellule photovoltaïque organique de type DSSC (Dye-Sensitized Solar Cell ou cellule Gratzel) en continu à une température, à un taux d'humidité de 85% pendant 1000 heures. Avec l'amélioration du rendement de conversion et la réduction des coûts de production, le marché photovoltaïque s'est considérablement développé durant ces dernières années, et la substitution du silicium par les matériaux organiques est considérée comme une alternative prometteuse pour diverses raisons: faible coût, matière première illimitée, facilité de mise en œuvre, technologie de basse température, grandes surfaces, dispositifs souples...

Cependant, les questions telles que la résistance série élevée aux taux de concentration élevés, la fabrication de jonctions tunnels, les mécanismes efficaces de gestion thermique actifs, l'effet d'ombrage, la précision de suivi et la durabilité, la photodégradation des composants exposés et le manque de données sur le terrain ont besoin de plus d'attention et de soutien financier afin de faciliter la commercialisation des CPVs [17].

Les projets de fermes PV à des coûts compétitifs se multiplient dans plusieurs pays du monde. L'Europe, et tout particulièrement l'Allemagne et l'Italie, a toujours été la région la plus dynamique : elle concentre la moitié de la capacité mondiale installée à la fin 2014.

Cependant, avec un ralentissement des investissements en Europe, les pays 'leaders' sont à présent la Chine avec plus de 10,6 GW installés en 2014. La Chine prévoit d'installer 85 GW pendant les 4 prochaines années, le Japon et les Etats-Unis, respectivement, 45 GW et 42 GW prévus d'ici 2019. L'Inde s'est fixé l'ambitieux objectif d'installer 100 GW d'ici 2022 et une quinzaine d'autres pays sont sur le point d'atteindre cette objectif réseau, comme l'Algérie, le Mexique ou le Maroc...

La figure.1.1 représente les pays choisis pour la capacité d'électricité solaire cumulée en 2014.

Le grand intérêt de l'énergie photovoltaïque a mené au développement de cinq technologies photovoltaïques concurrentes, qui diffèrent par le type de matériaux et de techniques de fabrication associées à ces matériaux.

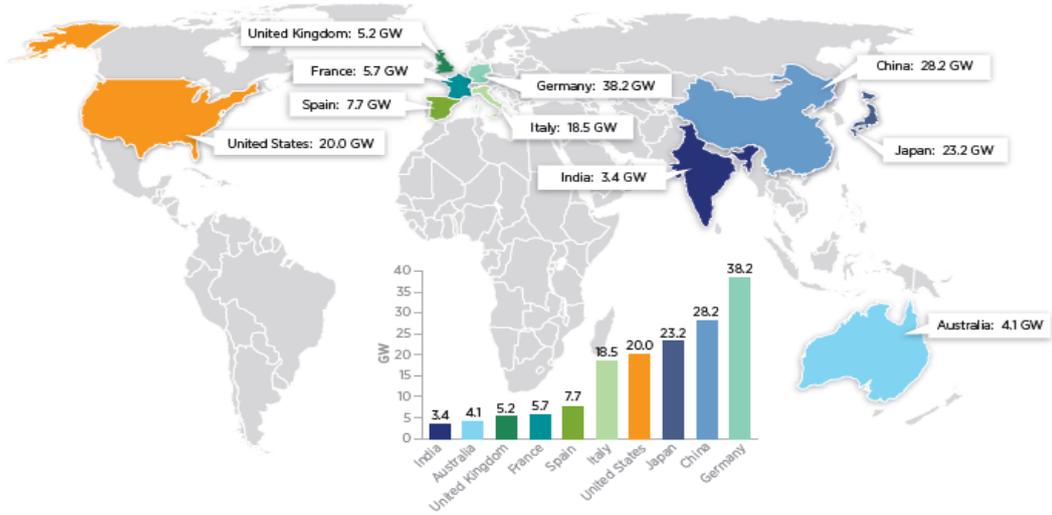


Figure 1.1: Capacité solaire d'électricité cumulée (2014) [18].

La Figure 1.2 montre l'évolution des rendements record des principales filières photovoltaïques actuelles. On y retrouve les différentes cellules au silicium monocristallin et polycristallin, les cellules au silicium amorphe, les cellules CIGS (di-Sélénure de Cuivre, d'Indium et de Gallium), les cellules CdTe (Tellure de Cadmium), mais aussi les cellules à base de composés III-V qui appartiennent à la catégorie des cellules multi-jonctions, les cellules organiques, les cellules tandem organiques et les cellules à base de boîtes quantiques.

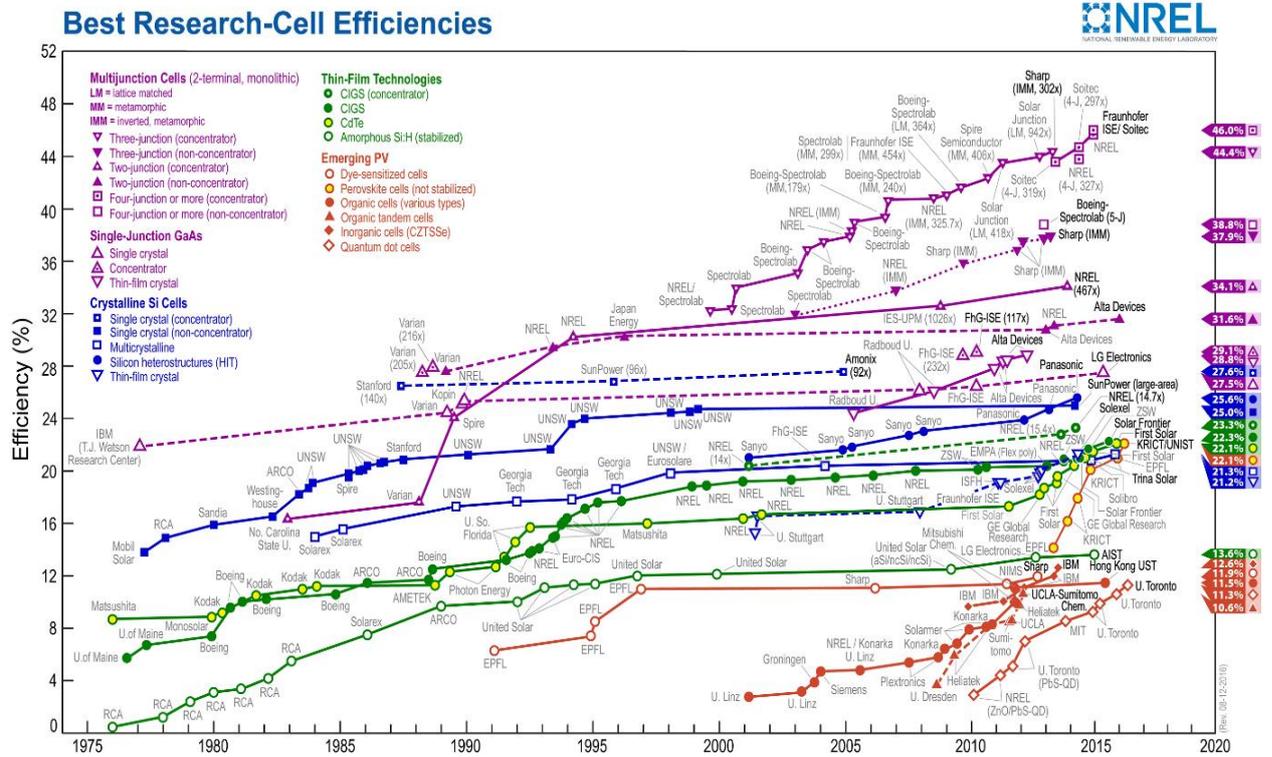


Figure 1. 2: Évolution des rendements record en laboratoire par technologie (source:NREL) http://en.wikipedia.org/wiki/File:Best_Research-Cell_Efficiencies.png.

1.2. L'effet photovoltaïque

L'effet photovoltaïque est un phénomène physique propre à certains matériaux appelés "semi-conducteurs", (le plus connu est le silicium utilisé pour les composants électroniques). Cet effet voltaïque a été découvert pour la première fois en 1839 par le physicien Alexandre-Edmond Becquerel [19]. Lorsque les "grains de lumière" (les photons) heurtent une surface mince de ces matériaux, ils transfèrent leur énergie aux électrons de la matière. Ceux-ci se mettent alors en mouvement, dans une direction particulière, créant ainsi un courant électrique qui est recueilli par des fils métalliques très fins. Ce courant peut être ajouté à celui provenant d'autres dispositifs semblables de façon à atteindre la puissance désirée pour un usage donné.



Figure 1. 3: Schéma équivalent d'une photopile [20].

L'effet photovoltaïque utilisé dans les cellules solaires permet de convertir directement l'énergie lumineuse des rayons solaires en électricité par le biais de la production et du transport dans un matériau semi-conducteur de charges électriques positives et négatives sous l'effet de la lumière. Ce matériau comporte deux parties, l'une présentant un excès d'électrons et l'autre un déficit en électrons, dites, respectivement, dopée de type n et dopée de type p. Lorsque la première est mise en contact avec la seconde, les électrons en excès dans le matériau n diffusent dans le matériau p. La zone initialement dopée n devient chargée positivement, et la zone initialement dopée p sera chargée négativement. Il se crée donc entre elles un champ électrique qui tend à repousser les électrons dans la zone n et les trous vers la zone p. Une jonction (p-n) a été formée. En ajoutant des contacts métalliques sur les zones n et p, une diode est obtenue. Lorsque la jonction est éclairée, les photons d'énergie égale ou supérieure à la largeur de la bande interdite communiquent leur énergie aux atomes, chacun fait passer un électron de la bande de valence vers la bande de conduction et laisse ainsi un trou capable de se mouvoir, engendrant ainsi une paire

électron-trou. Si une charge est placée aux bornes de la cellule, les électrons de la zone n rejoignent les trous de la zone p via la connexion extérieure, donnant naissance à une différence de potentiel : le courant électrique circule (figure.1.3).

Le silicium employé aujourd'hui dans la plupart des cellules a été choisi pour la présence de quatre électrons de valence sur sa couche périphérique (colonne IV du tableau de Mendeleïev). Dans le silicium solide, chaque atome – dit tétravalent – est lié à quatre voisins, et tous les électrons de la couche périphérique participent aux liaisons. Si un atome de silicium est remplacé par un atome de la colonne V (phosphore par exemple), un de ses cinq électrons de valence ne participe pas aux liaisons ; par agitation thermique, il va très vite passer dans la bande de conduction et ainsi devenir libre de se déplacer dans le cristal, laissant derrière lui un trou fixe lié à l'atome dopant. Il y a conduction par un électron, et le semi-conducteur est dit dopé de type n. Si au contraire un atome de silicium est remplacé par un atome de la colonne III (bore par exemple) il a trois électrons de valence, il en manque un pour réaliser toutes les liaisons, et un électron peut rapidement venir combler ce manque et occuper l'orbitale vacante par agitation thermique. Il en résulte un trou dans la bande de valence, qui va contribuer à la conduction, et le semi-conducteur est dit dopé de type p. Les atomes tels que le bore ou le phosphore sont donc des dopants du silicium. Les cellules photovoltaïques sont assemblées pour former des modules [20].

1.3. Principaux types de cellules solaires

1.3.1. Cellules photovoltaïques inorganiques

À l'heure actuelle, les cellules photovoltaïques présentant les meilleurs rendements de photoconversion reposent sur l'utilisation de matériaux inorganiques. Il convient d'en distinguer plusieurs types :

❖ **Les cellules à base de silicium** : On distingue au sein même de cette famille, plusieurs types de cellules utilisant des “ qualités ” de silicium différentes: les cellules à base de Si mono-cristallin, leur rendement est de l'ordre de 25% avec un coût de fabrication élevé, les cellules à base de Si poly-cristallin, leur rendement est de l'ordre de 20% mais avec un coût de fabrication moindre et les cellules à base de Si amorphe, leur rendement et leur coût sont plus faibles que le mono ou le poly-cristallin[21].

❖ **Les cellules à base d'arséniure de gallium** : Il convient de distinguer deux types de cellules incorporant l'arséniure de gallium. D'un côté, les cellules de type III.V dont le composant principal est l'arséniure de gallium avec un rendement de l'ordre de 18 à 25%. De l'autre côté, les cellules

multijonctions de type GInP/GaAs/Ge constituent les cellules les plus efficaces avec un rendement de l'ordre de 32% mais présentant un coût de mise en oeuvre très élevé [22].

- ❖ **Les cellules CIS ou CIGS** : Les premières sont composées de diséléniure de cuivre et d'indium CuInSe_2 alors que les deuxièmes font intervenir en plus du gallium. Ce type de cellules présente un faible coût de fabrication [23].
- ❖ **Les cellules à base de tellure de cadmium (CdTe)** : L'avantage de ces cellules réside dans la forte absorption du tellure de cadmium, cependant la toxicité du matériau freine le développement de cette technologie. Les rendements obtenus sont de l'ordre de 17% [24].

1.3.2. Cellules photovoltaïques organiques

Face à la technologie utilisant les matériaux inorganiques, les cellules solaires à base de composés organiques connaissent un développement considérable [25].

Les cellules organiques peuvent être de plusieurs types:

- ❖ **Les cellules de type Schottky** : Ce type de cellule utilise un semi-conducteur de type p (ou n) pris en sandwich entre deux électrodes de métal. La zone active pour la conversion photovoltaïque se situe entre une des électrodes métalliques et le semi-conducteur.
- ❖ **Les cellules hétérojonction de type bicouche** : Deux semi-conducteurs, un de type p et l'autre de type n, sont en contact formant une jonction p-n. La zone active se trouve à l'interface entre les deux semi-conducteurs.
- ❖ **Les cellules hétérojonction de type réseaux interpénétrés** : Dans ce type de cellule, des semi-conducteurs p et n sont mélangés intimement au sein d'une même couche. La surface de contact entre les semi-conducteurs p et n est multipliée par plusieurs ordres de grandeur par rapport aux cellules bicouches, ce qui permet d'augmenter le nombre d'excitons dissociés.
- ❖ **Les cellules hybrides sensibilisées par un colorant** : Elles sont communément appelées DSSC (Dye-Sensitized Solar Cells) ou cellules Graetzel. Dans ces cellules, une couche de dioxyde de titane TiO_2 , semi-conducteur de type n recouvert d'un colorant organique qui absorbe la lumière, est mis en contact avec un électrolyte (solution aqueuse contenant un couple redox).

1.4. Matériaux et Phénomènes de contact

Le comportement électrique des semi-conducteurs est généralement modélisé à l'aide de la théorie des bandes d'énergie. Dans cette théorie, un matériau semi-conducteur possède une bande interdite suffisamment petite pour que des électrons de la bande de valence puissent facilement rejoindre la bande de conduction. Si un potentiel électrique est appliqué à ses bornes, un faible courant électrique apparaît, provoqué à la fois par le déplacement de tels électrons et celui des « trous » qu'ils laissent dans la bande de valence.

Le fonctionnement des cellules photovoltaïques est étroitement lié aux propriétés d'hétérostructures des matériaux différents. En effet, le contact de deux matériaux différents donne naissance à des effets, dits de jonction, dont l'étude permet de caractériser les matériaux photoconducteurs.

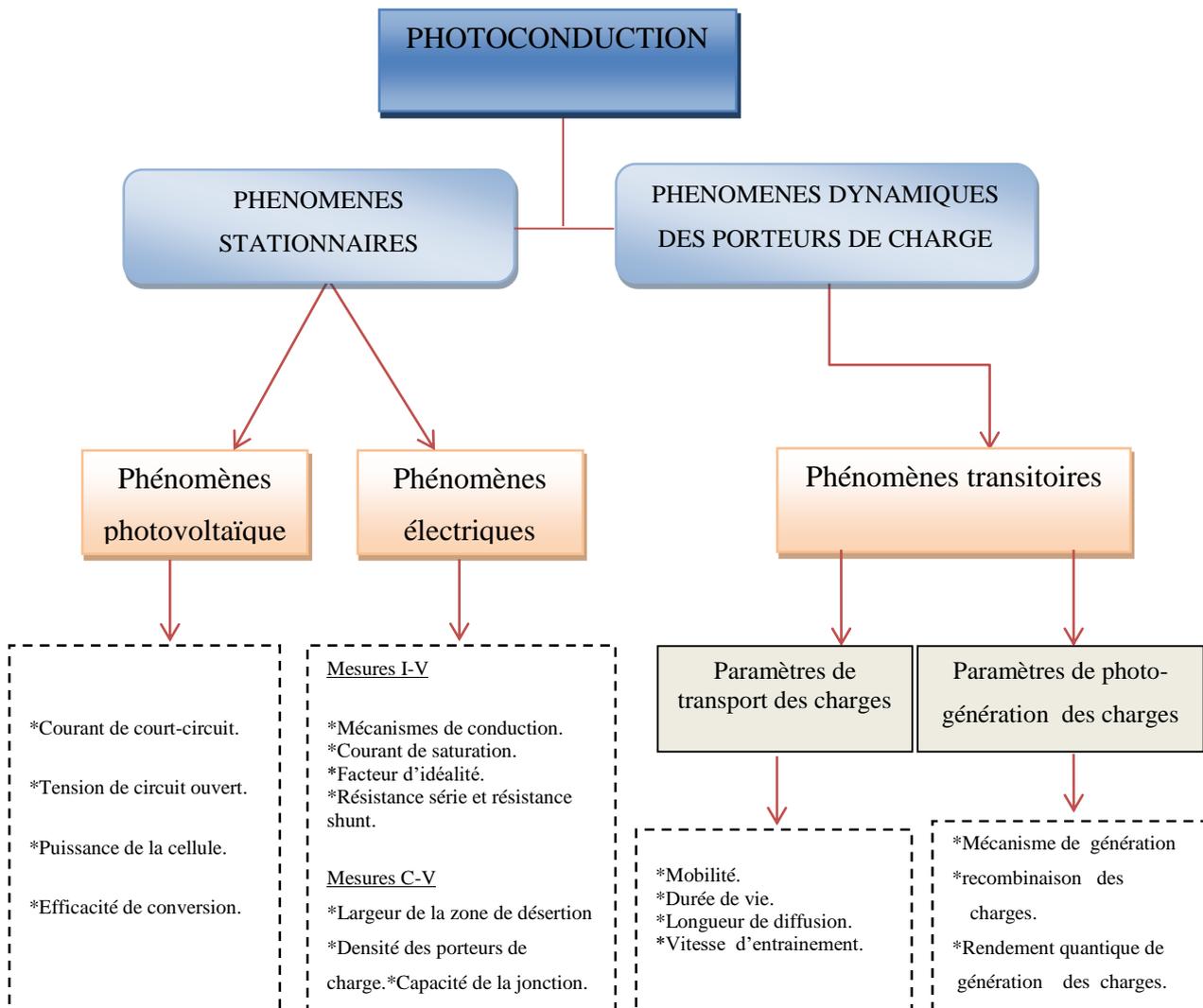


Figure 1.4: Principaux modes d'investigation en photoconduction [26].

1.4.1. Phénomènes transitoires

La conductivité électrique des semi-conducteurs peut être contrôlée par le dopage, en introduisant une petite quantité d'impuretés dans le matériau afin de produire un excès d'électrons ou un déficit. Des semi-conducteurs dopés différemment peuvent être mis en contact afin de créer des jonctions, permettant de contrôler la direction et la quantité de courant qui traverse l'ensemble.

Cette propriété est à la base du fonctionnement des composants de l'électronique moderne : diodes, transistors, etc

Le silicium est le matériau semi-conducteur le plus utilisé, du fait et de ses bonnes propriétés, de son abondance naturelle, il existe également des dizaines d'autres semi-conducteurs utilisés, comme le germanium, l'arséniure de gallium ou le carbure de silicium.

Le classement d'un matériau se fait par le biais de ses propriétés électriques. Selon le niveau de la résistivité d'un élément, il peut être classé par catégorie comme isolant, conducteur ou semi-conducteur. La figure 1.5 montre la gamme typique des conductivités pour des isolants, des conducteurs et des semi-conducteurs.

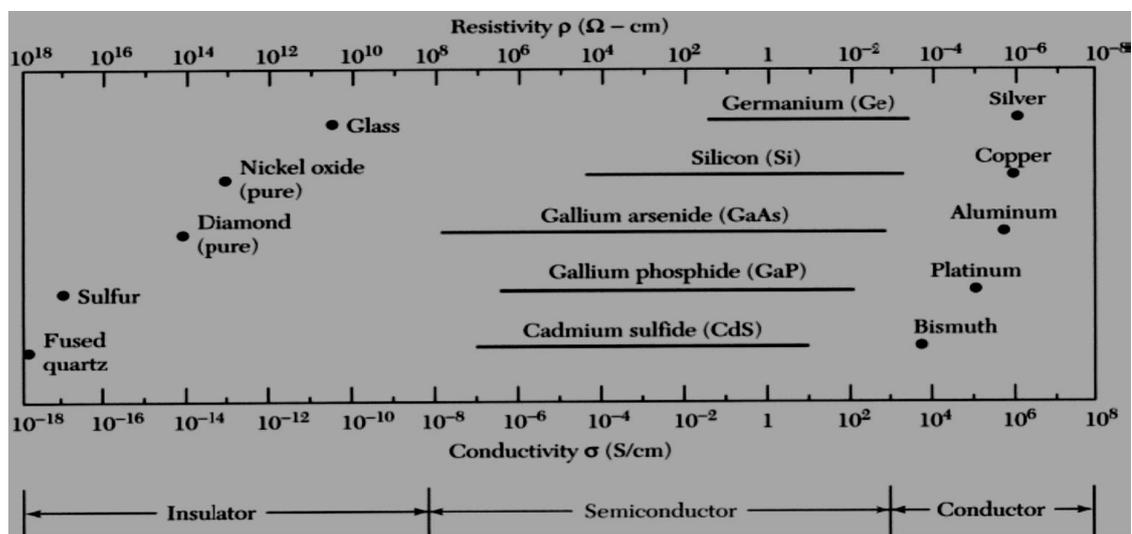


Figure 1.5: Conductivité et résistivité pour différents types de matériaux [27]

1.4.1.1 Principe de la structure en bande

Le comportement des semi-conducteurs, comme celui des métaux et des isolants est décrit via la théorie des bandes. Ce modèle stipule qu'un électron dans un solide ne peut prendre que des valeurs d'énergie comprises dans certains intervalles que l'on nomme « bandes », plus spécifiquement bandes permises, lesquelles sont séparées par d'autres « bandes » appelées bandes interdites. Il y a donc 2 places sur une orbitale s, 6 places sur une orbitale p, 10 places sur une orbitale d, ...

La configuration électronique d'un atome est la liste des couches et sous-couches occupées avec le nombre d'électrons qui s'y trouvent (figure 1.6). [28,29].

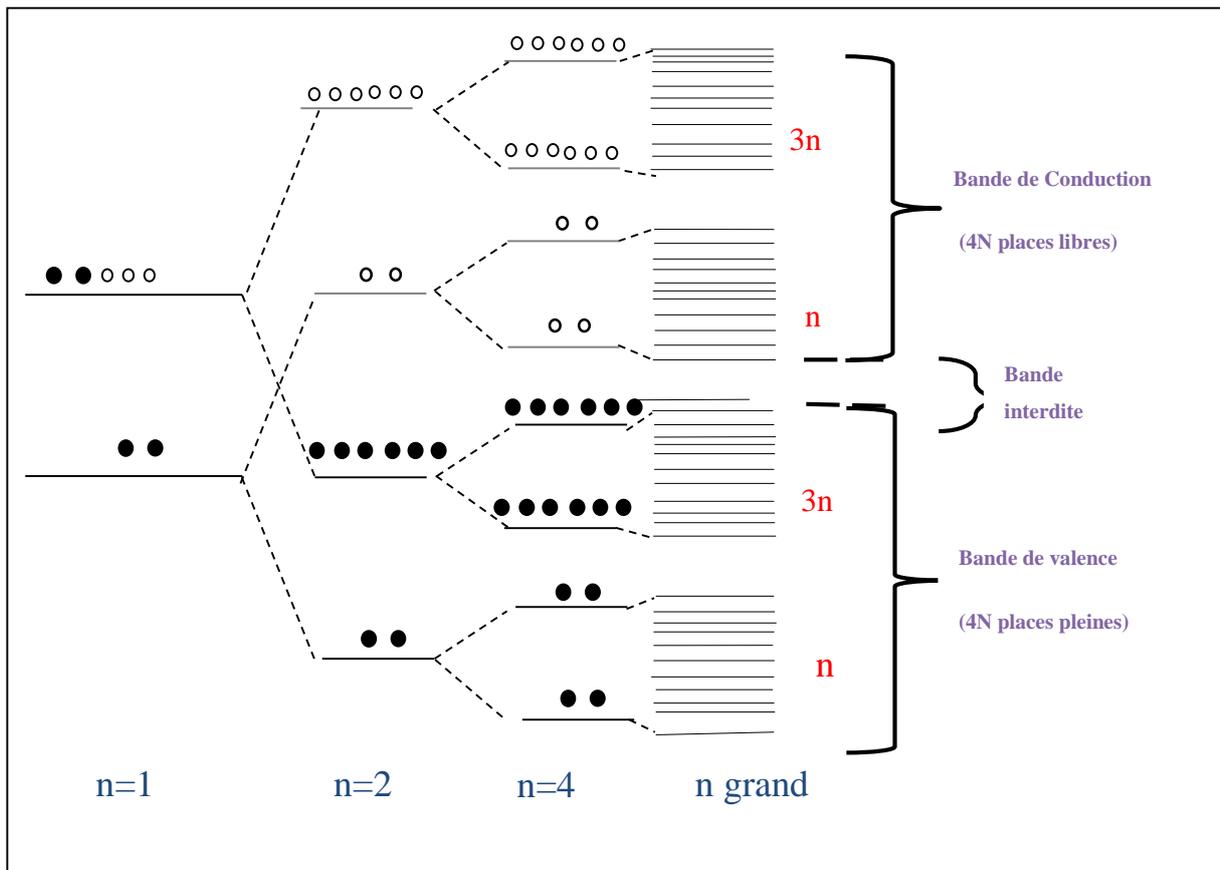


Figure 1.6: Couplage des orbitales ns^2 et np^2 dans le cas d'un grand nombre d'atomes ; formation des bandes.

Lorsque la température du solide tend vers le zéro absolu, deux bandes d'énergie permises jouent un rôle particulier:

- Les orbitales liantes offrent $4n$ places et sont donc entièrement occupées ; elles forment la bande de valence.
- Les orbitales anti-liantes offrent également $4n$ places qui sont donc entièrement vides ; elles forment la bande de conduction.
- La bande de conduction et la bande de valence sont séparées par une bande interdite.

La bande de valence est riche en électrons mais ne participe pas aux phénomènes de conduction (pour les électrons). La bande de conduction, quant à elle, est soit vide (comme aux températures proches du zéro absolu dans un semi-conducteur) soit semi-remplie (comme dans le cas des métaux) d'électrons. Cependant c'est elle qui permet aux électrons de circuler dans le solide.

Dans les conducteurs (métaux), la bande de conduction et la bande de valence se chevauchent. Les électrons peuvent donc passer directement de la bande de valence à la bande de conduction et circuler dans tout le solide.

Dans un semi-conducteur, comme dans un isolant, ces deux bandes sont séparées par une bande interdite, appelée couramment « gap ». L'unique différence entre un semi-conducteur et un isolant est la largeur de cette bande interdite, largeur qui donne à chacun ses propriétés respectives.

Dans un isolant cette valeur est si grande (aux alentours de 6 eV pour le diamant par exemple) que les électrons ne peuvent passer de la bande valence à la bande de conduction: les électrons ne circulent pas dans le solide.

Dans les semi-conducteurs, cette valeur est plus petite (1,12 eV pour le silicium, 0,66 eV pour le germanium, 2,26 eV pour le phosphore de gallium). Si on fournit cette énergie (ou plus) aux électrons, par exemple en chauffant le matériau, ou en lui appliquant un champ électromagnétique, ou encore dans certains cas en l'illuminant, les électrons sont alors capables de passer de la bande de valence à la bande de conduction, et de circuler dans le matériau. Dans ces semi conducteurs il existe deux types de conceptions : la conduction par électron et la conduction par trou. Lorsque dans un cristal certaines liaisons entre atomes se cassent, les électrons sont libres de se déplacer, l'emplacement de la liaison cassée est appelé trou. Sous l'effet du champ électrique les électrons se déplacent dans le sens inverse du champ et les trous se déplacent dans le sens de champ.

1.4.1.2. Notion de gap direct, gap indirect

La famille des matériaux semi-conducteurs, isolants à bande interdite de l'ordre de 1eV, peut être divisée en deux groupes : les matériaux à gap direct, comme la plupart des composés issus des colonnes III et V du tableau périodique des éléments chimiques, et les matériaux à gap indirect, comme le silicium colonne IV (Figure.1.7).

La notion de gap direct et indirect est liée à la représentation de la dispersion énergétique d'un semi-conducteur: Diagramme E(Energie)-k(Vecteur d'onde). Ce diagramme permet de définir spatialement les extrema des bandes de conduction et de valence. Ces extremas représentent dans un semi-conducteur à l'équilibre, des domaines énergétiques où la densité de porteurs type p pour la bande de valence et du type n pour la bande de conduction sont importantes.

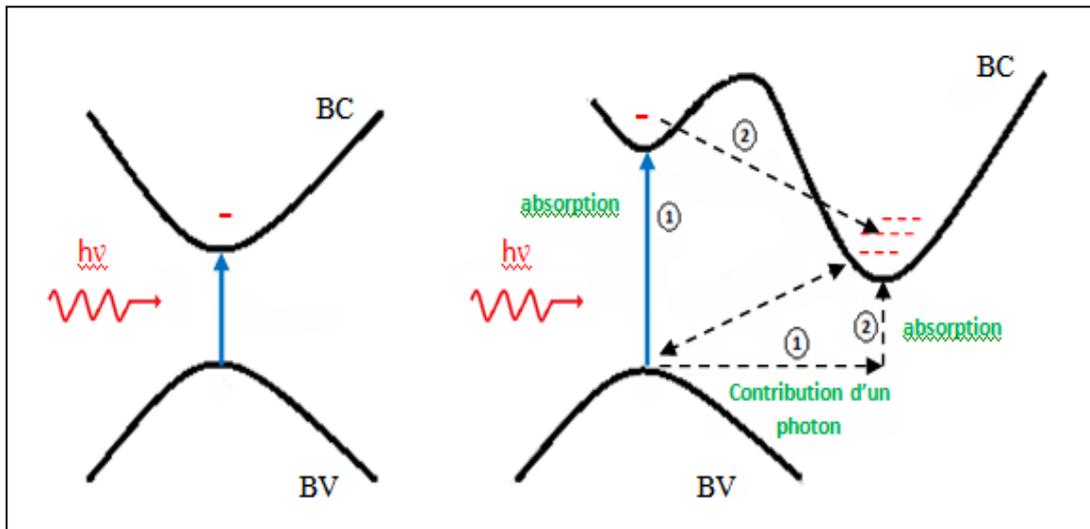


Figure 1.7: Transition inter bande d'électrons dans un semi-conducteur [22].

On parle de semi-conducteur à gap direct, un semi-conducteur dont le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction se situent à valeur voisine du vecteur d'onde k sur le diagramme $E(k)$. On parle de semi-conducteur à gap indirect, pour un semi-conducteur dont le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction se situent à des valeurs distinctes du vecteur d'onde k sur le diagramme $E(k)$.

Dans le cadre des applications en émetteur de lumière (interaction lumière/matière), on privilégie les matériaux à gap direct. Leurs extremums de bandes étant situés à des valeurs de k semblables, les probabilités de recombinaisons radiatives des porteurs sont plus importantes en terme de rendement quantique interne car elles sont en accord avec le principe de conservation de la quantité de mouvement et donc du vecteur d'onde k .

1.4.1.3 Masse effective

- Dans le cas d'un semi-conducteur à bande interdite directe (GaAs), la bande de conduction est isotrope au voisinage de $k=0$ (état s) : la mobilité électronique dans le cristal sera constante quelle que soit la direction de propagation (Voir la figure 2.3).
- Dans le cas d'une bande interdite indirecte (Si), la bande de conduction n'est plus isotrope. La surface $E(k) = Cte$ n'est plus une sphère comme dans le cas précédent, mais une série d'ellipsoïdes orientés selon les trois directions de l'espace.

1.4.1.3.1. Masse effective des électrons

De Broglie étendit le concept dualistique de la lumière à toute particule possédant une quantité de mouvement ; dans le cas de l'électron, la longueur de cette onde est dans le vide :

$$\lambda_{\epsilon}^{\text{vide}} = \frac{h}{p} \quad (1)$$

Dans le cas d'un semiconducteur, le potentiel perçu par l'électron est périodique, ce qui se traduit par un simple changement de masse, dite effective :

$$\lambda_{\epsilon}^{\text{cristal}} = \frac{h}{p} \quad (2)$$

La masse effective d'un électron dans les semi conducteurs étant : $m_e^* \approx 0.01m_e$ [31].

1.4.1.3.2. Masse effective des trous

La masse effective des trous est définie comme celle des électrons, mais la bande de valence des semi-conducteurs cubique est composée de deux branches dégénérées en $K=0$.

Les énergies des trous sont comptées positivement vers le bas. La bande de plus grande courbure, bande inférieure, correspond à des trous de masse effective inférieure (bande des trous légers) et la bande de plus faible courbure, bande supérieure, correspond à celle des trous lourds.

$$m_{hh} = m_{hh}^*/(\gamma_1 + 2\gamma_2) \quad (3)$$

$$m_{lh} = m_{lh}^*/(\gamma_1 - 2\gamma_2) \quad (4)$$

Où : γ_1 et γ_2 sont les paramètres de Luttinger [32].

Les expressions (3) et (4) permettent de définir des masses effectives isotropes. Elles ont pu être calculées pour la plupart des semi-conducteurs.

1.4.1.4. Caractéristique spécifique des matériaux à gap direct

Dans le domaine de l'optoélectronique, un paramètre essentiel à la compréhension des phénomènes de porteurs générations / recombinaisons est la notion de coefficient d'absorption, il a deux caractères communs à l'ensemble des semi-conducteurs à gap direct. En première approximation il présente un comportement assimilable à une marche d'escalier. Ainsi pour une énergie incidente inférieure à l'énergie de bande interdite, le matériau est "transparent" au rayonnement incident, et le coefficient d'absorption est très faible. A partir d'une valeur proche de l'énergie de bande interdite, ce coefficient présente une valeur constante aux alentours de $\alpha \approx 10^4 \text{ cm}^{-1}$. On parle ainsi de seuil d'absorption optique [27].

La détermination de la structure de bande d'un cristal, c'est de trouver la correspondance entre énergie et vecteur d'onde en tout point de la première zone de Brillouin. Plusieurs méthodes de calcul, essentiellement numériques, ont été développées pour les cristaux réels. La description des extremas des bandes de valence et de conduction est une donnée de base pour l'étude des propriétés de transport, mais aussi des propriétés optiques des semiconducteurs.

1.4.1.4.1. Bande de conduction

Qualitativement, les structures de bande des semiconducteurs diffèrent essentiellement par la bande de conduction. En effet, tous les semiconducteurs ont le maximum de leur bande de valence au centre de la zone de Brillouin, ce qui n'est pas toujours le cas du minimum de la bande de conduction.

Pour le GaAs, le minimum de la bande de conduction se trouve au centre de la zone de Brillouin, c'est-à-dire en vallée Γ . Le gap est dit direct car un électron peut passer directement de la bande de valence à la bande de conduction.

Pour le Si, les minimas de bande de conduction se trouvent à 85% du bord de zone. Les électrons doivent changer de vecteur d'onde pour passer de la bande de valence à la bande de conduction.

1.4.1.4.2. Bande de valence

Il y a toujours 3 bandes de valence dont les maximas sont en Γ . Ces bandes sont issues des orbitales p-liantes triplement dégénérées. Cette dégénérescence est partiellement levée par l'interaction spin-orbite. La prise en compte de l'hamiltonien d'interaction spin-orbite décale de Δ_{so} une des 3 bandes de valence. On l'appelle bande « split-off ». Les 3 bandes présentent des courbures différentes, donc des masses différentes. Les 2 bandes qui restent dégénérées en $k = 0$ sont appelées bande de trous lourds (ou hh pour heavy holes) et bande de trous légers (ou lh pour light holes). Ce sont essentiellement ces deux bandes qui déterminent les propriétés de transport des trous dans le semiconducteur.

1.4.2. Les phénomènes électriques

1.4.2.1 Bilan électronique des semi-conducteurs :

Un semi-conducteur intrinsèque est un semi-conducteur non dopé, c'est à dire qu'il contient peu d'impuretés (atomes étrangers) en comparaison avec la quantité de trous et d'électrons générés thermiquement.

Le dopage consiste à implanter des atomes correctement sélectionnés nommés « impuretés » à l'intérieur d'un semi-conducteur intrinsèque afin d'en contrôler les propriétés électriques. La technique du dopage augmente la densité des porteurs à l'intérieur du matériau semi-conducteur. Si elle augmente la densité d'électrons, il s'agit d'un dopage de type N. Si elle augmente celle des trous, il s'agit d'un dopage de type P. Les matériaux ainsi dopés sont appelés semi-conducteurs extrinsèques[33]. Toutefois, l'effet de dopage est optimal pour les propriétés électriques de la matière, même à de très faibles concentrations[27, 33-36].

1.4.2.2. La jonction p-n

Une jonction p-n est créée par la mise en contact d'un semi-conducteur dopé n et d'un semi-conducteur dopé p.

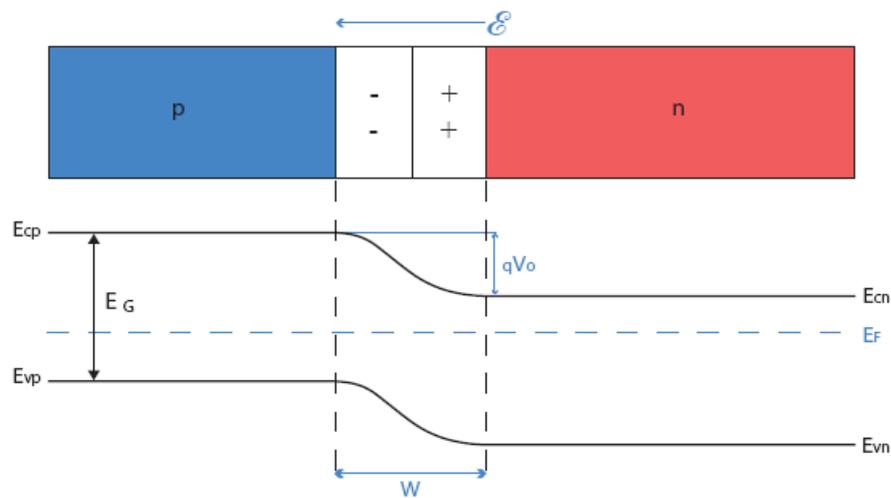


Figure 1.8: Schéma de la jonction p-n.

La région de charge d'espace de la largeur W est signalée en même temps que le champ électrique E , le haut-potentiel V_0 , la largeur de bande interdite E_G , l' E_F du niveau de Fermi et la séparation des bords de la bande de valence et de la bande de conduction dans le matériau de type p-n.

Le courant dû aux électrons dans une jonction, est défini par la somme du courant de diffusion des majoritaires J_{nn} de n vers p, et du courant des minoritaires J_{np} dans la zone p, tandis que les trous diffusent dans la direction opposée :

$$J_n = J_{nn} + J_{np} \quad (5)$$

De même pour les trous la densité de courant est :

$$J_p = J_{pp} + J_{pn} \quad (6)$$

La circulation des électrons depuis le matériau de type n à la zone de type p et le mouvement inverse de trous laisse les atomes dopants ionisés. Une région appauvrie en porteurs de charge libres nommée E, la région de charge d'espace se produit. La région de charge d'espace a une largeur W, elle est représentée sur la figure.1.8. Les charges électrostatiques forment un champ électrique E qui provoque un courant de saturation dans la direction opposée du courant de diffusion. Des expressions pour la densité de courant de diffusion total et de saturation pour les électrons et les trous sont généralement administrées en tant que :

$$J_D = J_{nn} + J_{pp} \quad (7)$$

$$J_S = J_{np} + J_{pn} \quad (8)$$

Si aucune polarisation et aucune perturbation extérieure ne sont appliquées à la jonction

$$E_{FN} = E_{FP}, \text{ d'où,}$$

$$J_s = J_D = J_0 \exp\left(-\frac{qV_{bo}}{KT}\right) \quad (9)$$

1.4.2.3. La jonction p-n sous polarisation

La jonction entraîne l'égalisation des niveaux de Fermi par décalage des bandes (voir figure.1.9). Si l'on applique une tension positive du côté de la région p, les porteurs majoritaires positifs (les trous) sont repoussés vers la jonction. Dans le même temps, les porteurs majoritaires négatifs du côté n (les électrons) sont attirés vers la jonction. Arrivés à la jonction, soit les porteurs se recombinent (un électron tombe dans un trou) en émettant un photon éventuellement visible (LED), soit ces porteurs continuent leur course au travers de l'autre semi-conducteur jusqu'à atteindre l'électrode opposée : le courant circule avec une intensité qui varie en exponentielle de la tension. Si la différence de potentiel est inversée, les porteurs majoritaires des deux côtés s'éloignent de la jonction, bloquant ainsi le passage du courant à son niveau. Ce comportement asymétrique est utilisé notamment pour redresser le courant alternatif[35, 36].

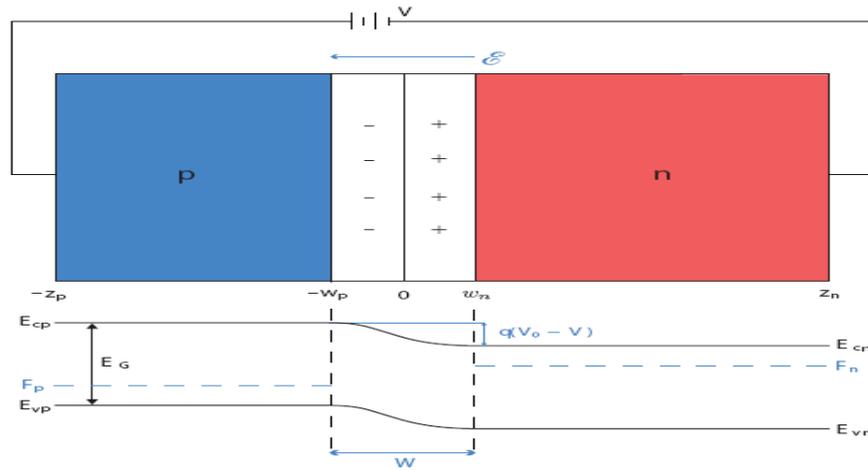


Figure 1. 9: Schéma de principe d'une jonction P-N polarisée en direct et son diagramme de bande d'énergie.

Pour ce type de polarisation, le courant des minoritaires J_s reste constant, mais J_D augmente du fait que la hauteur de la barrière du potentiel devient $(V_0 - V)$:

$$J_D = J_0 \exp\left(-\frac{qV_{b0} - qV_d}{KT}\right) = J_0 \exp\left(-\frac{qV_{b0}}{KT}\right) \exp\left(\frac{qV_d}{KT}\right) \quad (10)$$

Le courant total est ainsi donné par :

$$J = J_D - J_s = J_s \left(\exp\frac{qV_d}{KT} - 1 \right) \quad (11)$$

1.4.2.4. Caractéristiques courant-tension

Le fonctionnement des cellules solaires est basé sur l'effet photovoltaïque, d'où leur appellation cellules photovoltaïques. Nous allons décrire ici le comportement d'une diode photovoltaïque inorganique ou organique dans l'obscurité et sous illumination.

Dans l'obscurité, la cellule ne produit pas de courant ; le dispositif est passif. Une cellule solaire suit le comportement d'une diode classique. Si la tension appliquée est supérieure ou inférieure à une tension seuil, la diode est respectivement passante ou bloquante.

Lorsque la jonction p-n est allumée, un courant qui dépend de la lumière et des propriétés de la jonction pn incident est généré. L'objectif de cette section est de présenter une expression du courant en fonction de la tension sur la cellule solaire à l'état stationnaire. Le champ électrique est différent de zéro uniquement dans la région de charge d'espace. A l'équilibre, comme il a été mentionné précédemment, V_0 est la différence de potentiel à travers la zone de charge d'espace. En appliquant une polarisation V à travers la jonction, les changements des potentiels $(V_0 - V)$ et V

sont positifs lorsque le côté p est polarisé en direct par rapport au côté n, comme il est représenté sur la figure.1.10. L'absence de champ électrique en dehors de la région de déplétion entraîne le courant qui est du seulement à la diffusion. En dehors de la zone de charge d'espace des porteurs de charge majoritaires sont supposés varier sensiblement de leurs concentrations à l'équilibre. Cela signifie que seul le courant de diffusion des porteurs minoritaires déterminera le courant.

L'expression reliant le courant (I) à la tension (V) dans le cas d'une diode idéale (figure 1.10) est donnée par l'équation(11) de type Shockley [37].

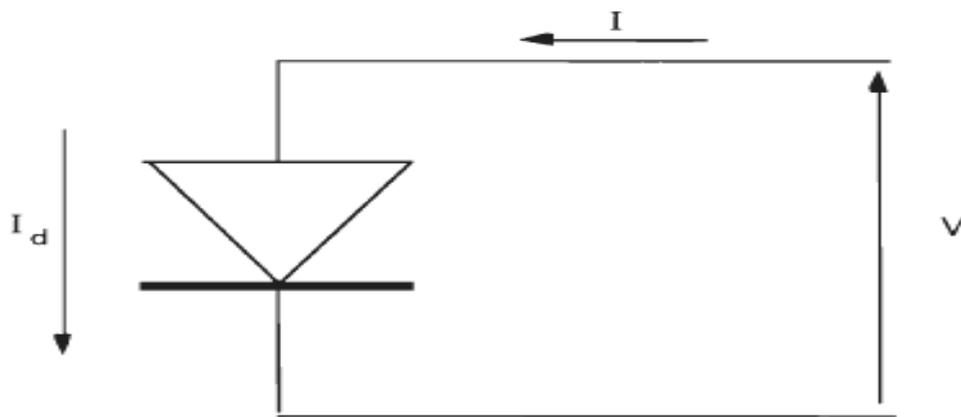


Figure 1. 10: Schéma équivalent d'une diode idéale [37].

Mais, en général, la caractéristique courant-tension doit tenir compte de la chute de tension dans la région de la charge d'espace et au contact ohmique.

Pour cela on introduit un facteur d'idéalité (n) et l'équation caractéristique devient [38] :

$$I = I_s (\exp^{qV/nkT} - 1) \quad (12)$$

D'autre part, pour tenir compte de l'impédance des électrodes et des fuites de courant qui peuvent avoir lieu dans la jonction, on introduit, dans le circuit électrique équivalent de la diode idéale (figure.1.10). Le tracé du circuit électrique équivalent tient [39,40] compte de la résistance interne R_s qui dépend de la résistivité du matériau [41], de celle des électrodes et du contact « sc-métal », ainsi que d'une résistance shunt (R_{sh}) en parallèle à la diode (figure.1.11) qu'on peut noter :

$$I_{sh} = \frac{V + R_s I}{R_{sh}} \quad (13)$$

L'équation caractéristique s'écrit, dans ce cas, sous la forme :

$$I = I_s \left[e^{\frac{q(V-R_S I)}{nkT}} - 1 \right] + \frac{V-R_S I}{R_{Sh}} \quad (14)$$

Le schéma équivalent de fonctionnement électrique:

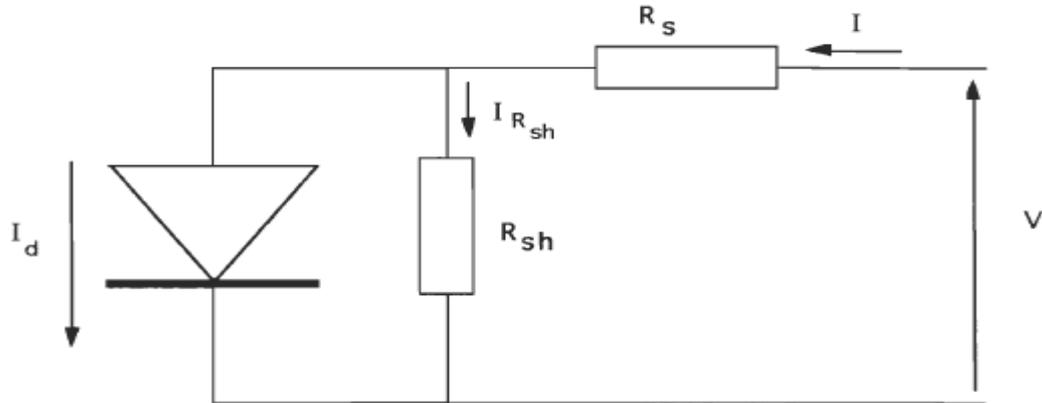


Figure 1. 11: Schéma équivalent d'une diode réelle[39,40].

1.4.3. Phénomène photovoltaïque

1.4.3.1 La jonction p-n sous éclairement

Ceux qui atteignent la région de charge d'espace sont propulsés par le champ électrique vers la région où ils deviennent majoritaires. Ces photo-porteurs contribuent donc au courant par leur diffusion, ils créent un photo-courant de diffusion. Dans la zone de charge d'espace, les paires électrons trous créées par les photons sont dissociées par le champ électrique, l'électron est propulsé vers la région de type n et le trou vers la région de type p. Les porteurs donnent naissance à un photo-courant de génération [42,43].

1.4.3.2 Photo-courant de génération

Le photo-courant (I_{Ph}) est donné par l'expression suivante [44,45]:

$$I_{Ph} = q \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} F(\lambda) EQE_{Total}(\lambda) d\lambda \quad (15)$$

avec:

q: charge élémentaire (c)

F(λ): spectre solaire.

λ : la longueur d'onde (m)

EQE (λ): efficacité quantique externe (%)

EQE représente le rendement quantique externe de la cellule, c'est-à-dire le rapport entre le nombre de porteurs générés sur le nombre de photons incidents. Pour une longueur d'onde donnée, le rendement quantique extérieur est égal à 1 si chaque photon génère un électron. Le rendement quantique externe est donné par la relation suivante :

$$EQE(\lambda) = [1 - R(\lambda)]. [1 - \exp(-\alpha w)] \quad (16)$$

Avec :

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

α : coefficient d'absorption (cm^{-1}).

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

1.4.3.3 Circuit électrique équivalent d'une cellule solaire

Le processus de photo-courant engendre une tension photovoltaïque car les charges séparées vont s'accumuler de part et d'autre de la jonction, induisant une autopolarisation de la jonction dans le sens passant.

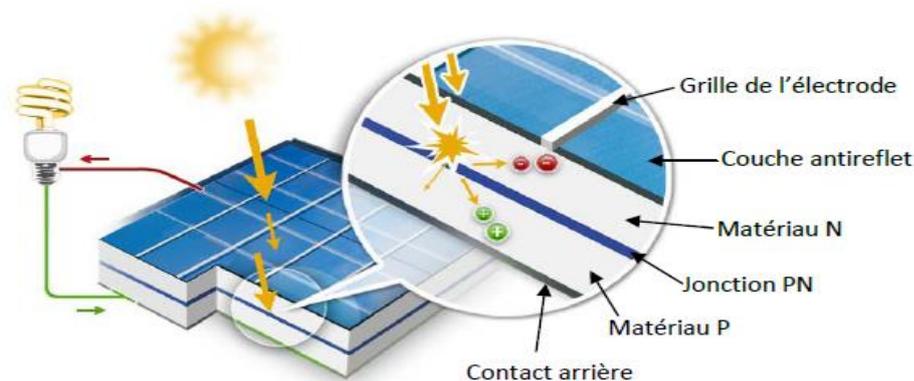


Figure 1. 12: Schéma d'une cellule solaire avec la jonction PN [46].

Cette autopolarisation induit un courant de diode $I_d(V)$ dans le sens direct opposé au photocourant (I_{ph}) [46]. De plus dans la pratique, d'autres phénomènes nuisibles se manifestent, «shuntant» la cellule, comme le courant de fuite par les bords, phénomènes qu'on exprime par une résistance de shunt R_{sh} et un courant I_{sh} . Finalement, il reste dans le circuit un courant I [47,48].

$$I = I_{ph} - I_d(v) - I_{sh} \quad (17)$$

Les photons d'énergie $\geq E_g$ provoquent un photocourant I_{ph} et une tension V aux bornes du récepteur.

Avec : I_s le courant de saturation sous polarisation inverse, $U_T = (K.T)/q$ Potentiel thermodynamique ≈ 26 mV à la température ambiante.

On a le schéma de fonctionnement électrique équivalent :

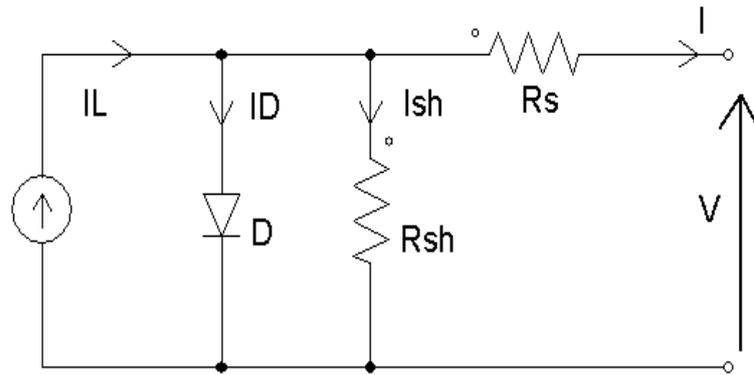


Figure 1. 13: Schéma électrique d'une photopile [39,49].

L'équation déterminant le courant est alors [50] :

$$I(V) = I_{ph} - I_s \left(\exp\left(\frac{V+R_s I}{U_T}\right) - 1 \right) - \frac{V+R_s I}{R_{sh}} \quad (18)$$

❖ Caractéristique idéale :

Lorsque $I_{sh} \approx 0$ (R_{sh} élevé), $R_s=0$, $I_{ph}=0$ dans ce cas $n=1$ et la cellule fonctionne comme une diode idéale. Le comportement physique de la cellule solaire est modélisé par la caractéristique I-V qui devient [51] :

$$I(V) = I_{ph} - I_s \left(\exp\left(\frac{V}{U_T}\right) - 1 \right) \quad (19)$$

1.4.3.4 Paramètres Photovoltaïques extraits de la caractéristique I-V

A partir de la caractéristique courant-tension, il est possible d'évaluer les performances et le comportement électrique de la cellule [37, 52, 53]. On définit ainsi, selon la figure.1.13 :

✓ la densité de courant de court circuit I_{cc} qui est obtenue sur la caractéristique pour une tension de 0V. Elle est proportionnelle à l'éclairement incident.

En faisant $V = 0$ dans l'équation (19) :

$$I_{cc} = I_{ph} \quad (20)$$

La tension en circuit ouvert V_{oc} mesurée sur la caractéristique à courant nul. En supposant qu'il n'y ait pas de perte de courant par recombinaison ou par piégeage des charges en faisant $I=0$ dans l'équation (19) :

$$V_{co} = \frac{nkT}{q} \ln\left(\frac{I_{ph}}{I_s} + 1\right) \quad (21)$$

✓ La puissance fournie sera donnée par la relation :

$$P = VI = V[I_{Ph} - I_s(e^{qV/nkT} - 1)] \quad (22)$$

Elle est maximale au point défini par :

$$\frac{dP}{dV} = 0 \quad (23)$$

I_{max} et V_{max} , coordonnées de la courbe courant-tension (I-V) maximalisent la puissance délivrée par la cellule

$$P_{max} = I_{max} V_{max}. \quad (24)$$

✓ Le Facteur de remplissage, ou facteur de forme (FF) est le rapport :

$$FF = \frac{V_{max}I_{max}}{V_{oc}I_{sc}} \quad (25)$$

✓ Le rendement de conversion: est le rapport entre la puissance maximale que peut délivrer une cellule solaire et la puissance du rayonnement solaire qu'elle reçoit [54].

Si P_i est la puissance du rayonnement solaire incident (en W/m^2), S la surface de la cellule en (m^2), le rendement de conversion η est alors [55]:

$$\eta = \frac{V_{max}I_{max}}{P_i} \quad (26)$$

Où P_i est la puissance incidente reçue avec :

$$P_i = A \int_0^\infty F(\lambda) \left(\frac{hc}{\lambda} \right) d\lambda \quad (27)$$

A est la surface totale, $F(\lambda)$ est le nombre de photons reçue par centimètre carré par seconde par bande passante $d\lambda$ pour chaque longueur d'onde λ , et (hc / λ) l'énergie de chaque photon de longueur d'onde λ .

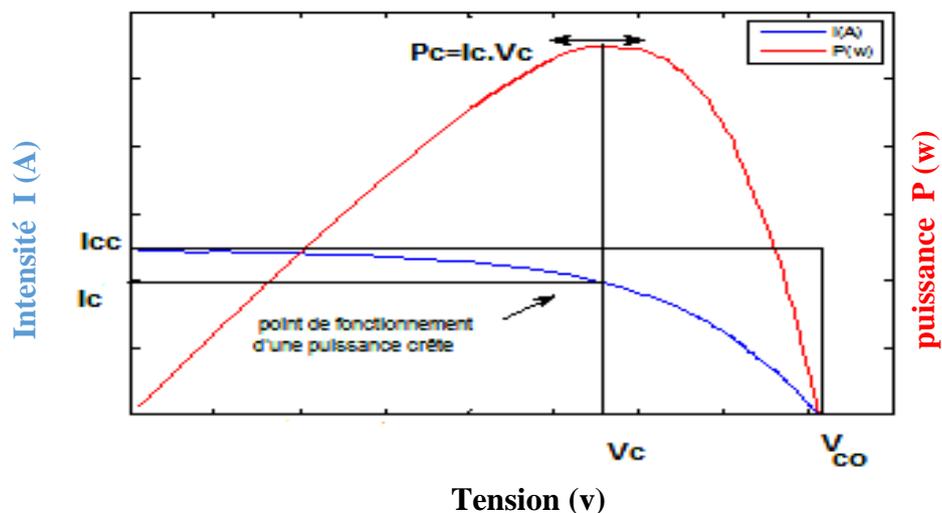


Figure 1.14 : Caractéristique courant-tension (courbe bleue) et puissance d'une cellule photovoltaïque sous éclairage AM1.5 (courbe rouge) avec les grandeurs physiques associées [56].

1.5. Spectre du rayonnement solaire

Le spectre solaire est la distribution spectrale (en fonction de la longueur d'onde ou de la fréquence) du rayonnement électromagnétique émis par le soleil qui est assimilé par un corps noir rayonnant à une température de 6000 °K dans l'intervalle des rayonnements radio jusqu'aux rayons X. Le rayonnement solaire global est le rayonnement émis par le soleil incident sur une surface donnée [57].

L'énergie en (eV) de chaque photon est reliée à la longueur d'onde λ par la formule suivante :

$$E = h \nu = h c / \lambda \quad [58] \quad (28)$$

Où :

ν : fréquence du rayonnement en s^{-1} .

λ : est la longueur d'onde en mètres.

h : est la constante de Planck. ($h = 6,62 \times 10^{-34}$ J.s).

c : est la vitesse de la lumière. ($c = 3 \times 10^8$ m.s $^{-1}$).

Pour la création des paires électrons-trous, il faut que l'énergie transportée par les photons arrivant sur le dispositif soit supérieure ou égale à la bande interdite du matériau semi-conducteur utilisé ; soit $E \geq E_g$.

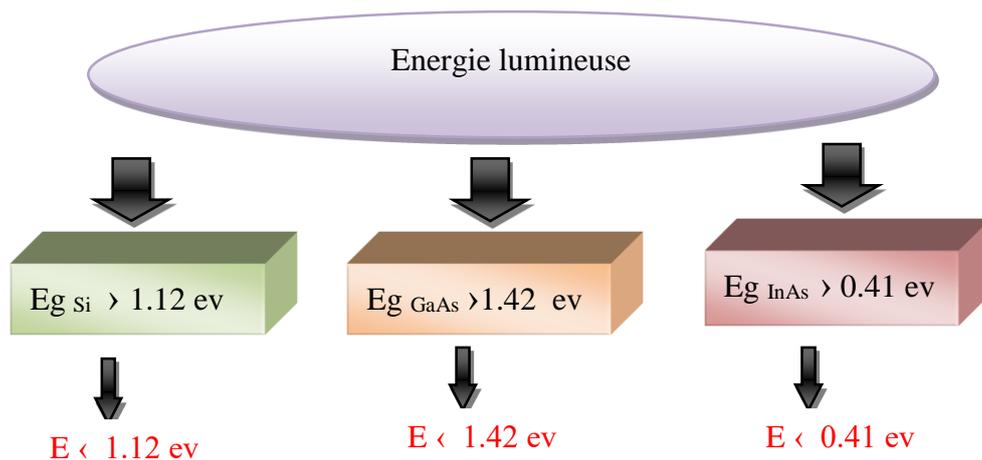


Figure 1. 15: Effet de l'énergie lumineuse sur les différentes bandes interdites [59].

A la surface de la terre, le spectre solaire n'est pas le même que dans l'espace, car il est pondéré par l'absorption des molécules présentes dans l'atmosphère (O_3 , CO_2 , H_2O ...), les conditions climatiques ainsi que la présence des particules influencent la valeur réelle du spectre.

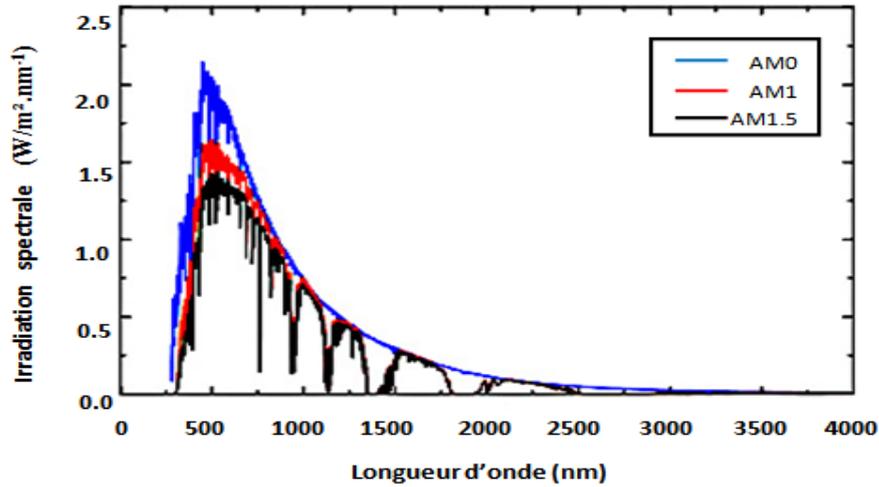


Figure 1. 16: Le spectre solaire AM0, AM1 et AM 1.5 [60]

1.6. Constante d'illumination

La constante d'illumination est l'intensité lumineuse issue du soleil normalement incidente sur la surface de la Terre. Cette constante a une valeur approximative de 1,4 kW/m^2 au-dessus de la couche atmosphérique, elle est réduite sur la terre à 1 kW/m^2 par la réflexion et l'absorption des particules présentes dans la couche atmosphérique [61].

De manière générale, l'indice m associé à la masse d'air (AM_m) est calculé comme suit :

$$AM_m = 1/\sin(\theta) \quad (29)$$

θ étant l'angle entre l'incidence des rayons lumineux et l'horizontale à la terre (voir figure.1.17).

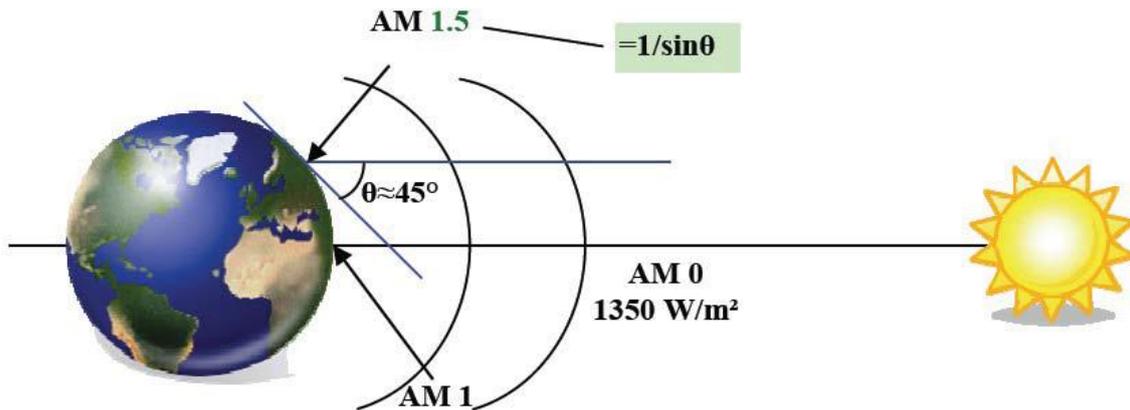


Figure 1. 17: Description du nombre d'air masse [62].

1.7. Désaccord entre énergie du photon et énergie de gap

Dans les cellules solaires, une paire électron - trou peut être générée et le plus important processus de génération d' une paire électron- trou est l'absorption de photons ayant une énergie supérieure à l'énergie de génération d'une paire électron-trou. Les photo-porteurs se recombinent avant d'être collectés.

Les mécanismes de recombinaison peuvent être différents. Ces processus indiqués sont : La recombinaison radiative, la recombinaison non radiative par les états pièges et la non radiative recombinaison Auger. La recombinaison radiative a lieu uniquement dans la limite des matériaux parfaits, elle a lieu quand un électron et un trou se recombinent en émettant un photon [63].

La recombinaison non radiative par les états pièges a lieu quand un électron se déplace à partir de la bande de conduction à un état d'énergie dans la bande interdite sans émission de photons, comme indiqué sur la figure 1.18 b. Ces états apparaissent en raison de défauts ou d'impuretés dans le cristal. L'énergie est libérée sous forme de chaleur pour le réseau, c'est-à-dire il y a émission de phonons. Le second mécanisme de recombinaison non radiative est la recombinaison Auger. Il est important dans des matériaux à faible bande interdite et à forte densité de porteurs et il est important dans les matériaux à bande interdite indirecte où la recombinaison radiative est supprimée en raison de la nécessité de phonons dans le processus de recombinaison, l'effet du processus de recombinaison Auger est négligeable dans notre cas.

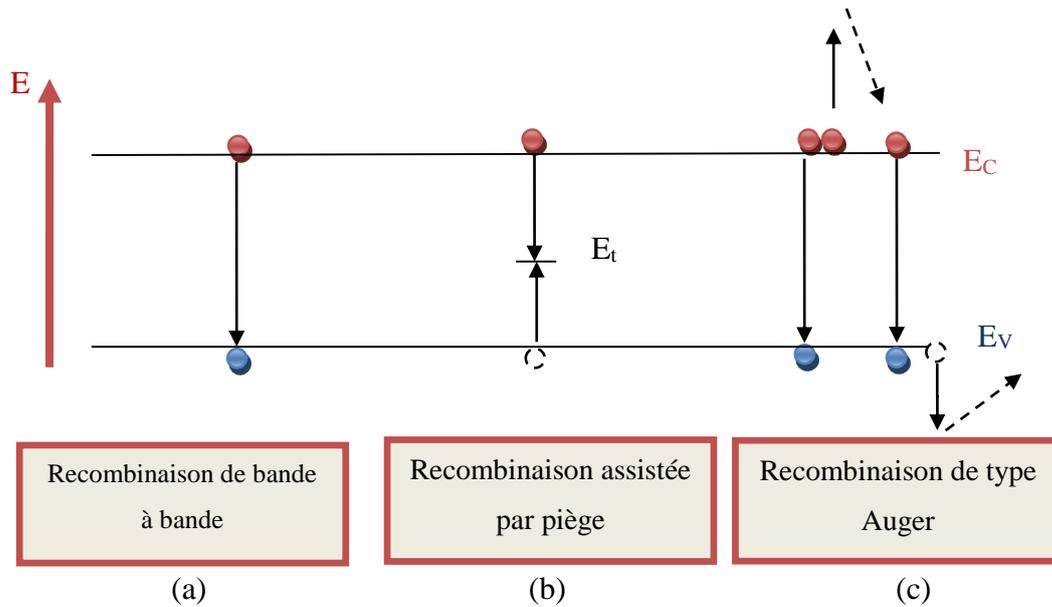


Figure 1. 18: Types de recombinaison [33].

1.8 Conclusion

Dans ce chapitre, des rappels théoriques sur l'effet photovoltaïque et les principaux types des cellules solaires ont été évoqués. Nous avons présenté les différents principaux modes d'investigation en photoconduction, nous avons montré que le fonctionnement des cellules photovoltaïques est étroitement lié aux propriétés d'hétéro structures réalisées par la juxtaposition de matériaux différents, dont l'étude permet de caractériser les matériaux photoconducteurs.

Ce chapitre constitue une base théorique pour la jonction métal semi-conducteur et pour le principe de fonctionnement des cellules solaires.

Aussi, nous avons choisi de présenter un petit rappel sur le rayonnement solaire et les mécanismes de recombinaisons.

CHAPITRE 2

LES SEMI-CONDUCTEURS « III-V » ET LES BOITES QUANTIQUES

2.1. Introduction

La première partie de ce chapitre décrit l'intérêt d'utiliser des boites quantiques dans les composants optoélectroniques à base de semi-conducteurs. Nous étudierons les intérêts, potentialités et les principales applications des boites quantiques. La deuxième partie présente le principe de croissance des boites quantiques et explique comment choisir le matériau adapté à l'application voulue. Ces applications sont soumises à des contraintes strictes sur la longueur d'onde utilisée et sur les signatures optiques des boites quantiques.

Les hétéro-structures à base de semiconducteurs III-V avec un gap direct, comme l'InAs, le GaAs, et l'InP sont des constituants clés des composants optoélectroniques, comme les diodes, ou les barrettes lasers utilisées dans les lecteurs CD ou DVD et dans les réseaux de télécommunications par fibre optique sur lesquels l'internet est basé. Les alliages III-V cités précédemment sont souvent préférés à d'autres alliages comme l'alliage II-VI, ou aux semi-conducteurs du groupe IV comme le silicium, ou l'alliage SiGe qui ont un gap indirect.

Les matériaux semi-conducteurs III-V sont des composés formés à partir d'un élément de la colonne III et d'un élément de la colonne V de la classification périodique. Parmi tous les composés binaires possibles, tous n'ont pas le même inter potentiel. L'étude de leurs propriétés et en particulier de la structure de bandes, montre que les éléments les plus légers donnent des composés à large bande interdite, dont les propriétés se rapprochent de celles des isolants et à structure de bande indirecte. Les composés incluant du bore, de l'aluminium, ou de l'azote et le phosphore de gallium GaP entrent dans cette catégorie; ils ont en général peu d'intérêt pour l'électronique rapide [64] qui demande des semi-conducteurs à forte mobilité de porteurs, ou pour l'optoélectronique où une structure de bande directe est nécessaire pour que les transitions opaques soient efficaces [65]. On considérera donc essentiellement les composés à base de gallium (GaAs, GaSb), ou d'indium (InP, InAs, InSb) dont les propriétés nous paraissent des plus intéressantes.

2.2. L'intérêt pratique des semi-conducteurs III-V

L'intérêt pratique des semi-conducteurs III-V est encore considérablement renforcé par la possibilité de réaliser des alliages par substitution partielle de l'un des éléments par un autre

élément de la même colonne. On sait par exemple obtenir des alliages ternaires du type $Ga_xAl_{1-x}As$, $Ga_xIn_{1-x}As$, ou quaternaires comme $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$. La figure.2.1 représente les variations de la largeur de bande interdite de l'alliage en fonction du paramètre de maille cristallin qui varie lui-même avec la composition. Ce diagramme montre qu'il est possible d'obtenir des matériaux dont la largeur de bande interdite et donc les propriétés optiques varient dans une large gamme. Il existe cependant une contrainte importante pour la fabrication de ces matériaux, qui sont réalisés en couches minces par croissance épitaxiale sur un substrat binaire: le paramètre cristallin doit être très proche de celui du substrat.

Tableau 2. 1: Paramètres caractéristiques pour les principaux composés III-V.

Composé III-v	E_g (eV)	$\lambda_g(\mu m)$	m^*/m_0	$a_0(\text{Å})$	Structure de la bande interdite
BN	-7,5	0,17		3,615	indirecte
AlP	2,45	0,51		5,463	
AlAs	2,16	0,57	0,12	5,661	
AlSb	1,58	0,75	0,82	6,138	
GaP	2,26	0,55		5,449	
GaAs	1,42	0,87	0,063	5,653	directe
GaSb	0,72	1,85	0,08	6,095	
InP	1,35	0,92	0,023	5,868	
InAs	0,36	3,44		6,058	
InSb	0,17	7,30	0,014	6,479	

Où E_g : Énergie de bande interdite; λ_g : Longueur d'onde du seuil d'absorption ; m^* : Masse effective des électrons et a_0 le paramètre de maille du cristal [66].

Le tableau.2.1 résume quelques paramètres pour différents matériaux de la famille III-V et le diagramme de la figure.2.1 permet de connaître la composition de tout alliage ternaire susceptible d'être épitaxié en couche mince sur les substrats binaires.

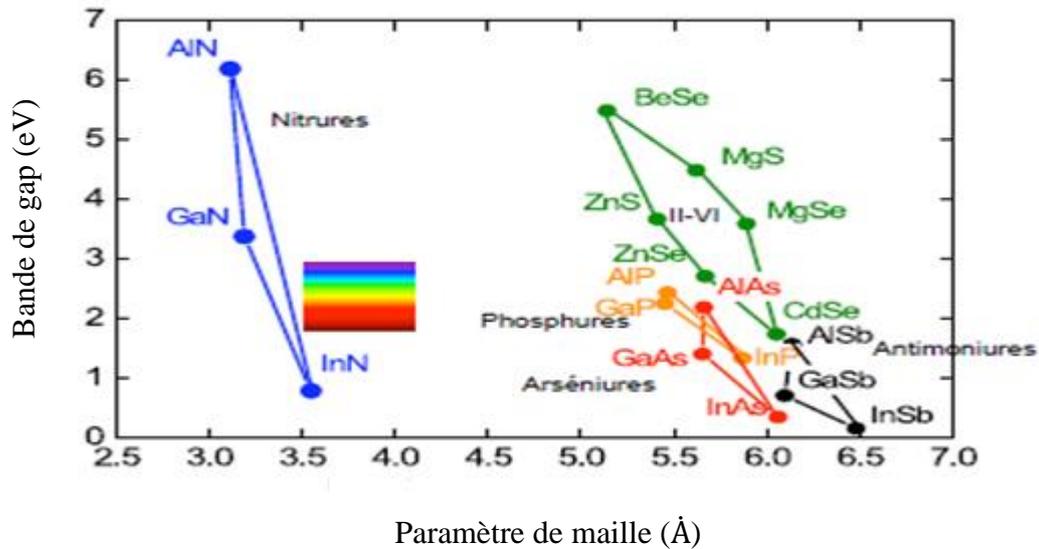


Figure 2.1: Largeur de bande interdite (E_g) en fonction du paramètre cristallin pour les alliages III-V [67].

Les matériaux III-V offrent donc de multiples possibilités, aussi bien pour la microélectronique rapide que pour l'optoélectronique, par la grande variété des composés réalisables et l'ouverture qu'ils donnent sur la conception de dispositifs totalement nouveaux par l'ajustement des structures de bandes.

2.2.1. Structure cristalline

Les semi-conducteurs III-V formés à partir de Al, Ga, ou In d'une part, P, As, ou Sb d'autre part ont tous une structure de type zinc-blende [55]. Leur réseau cristallin peut se décomposer en deux sous réseaux cubiques à faces centrées interpénétrés, l'un étant constitué des atomes de l'élément III, l'autre des atomes de l'élément V (figure.2.2). Ces deux sous-réseaux sont décalés l'un par rapport à l'autre le long de la diagonale du cube, d'une quantité $(a_0/4, a_0/4, a_0/4)$, a_0 étant le paramètre cristallin, il représente la longueur de l'arête du cube élémentaire. Chaque atome se trouve donc au centre d'un tétraèdre régulier dont les sommets sont occupés par un atome de l'autre espèce. La maille élémentaire, à partir de laquelle on peut reconstituer le cristal entier par un ensemble de translations est formée par un atome de chaque type.

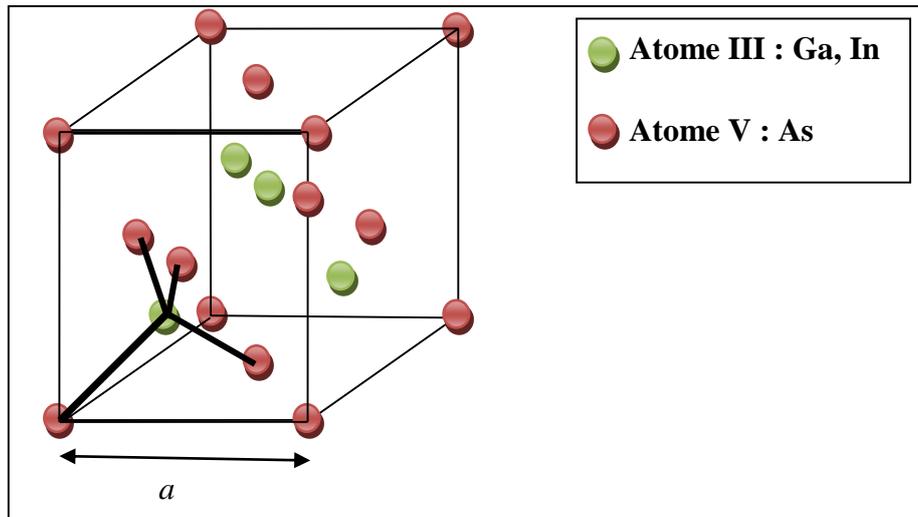


Figure 2. 2: Réseau cristallin dans la structure zinc-blende [68].

2.2.2. Structure des bandes d'énergie

Les bandes d'énergie donnent les états d'énergie possibles pour les électrons en fonction de leur vecteur d'onde. On les représente donc dans l'espace réciproque et pour simplifier, dans les directions de plus hautes symétries de la première zone de Brillouin. Elles se décomposent en bandes de valence et en bandes de conduction (Figure 2.3). La bande de valence est la plus haute, la bande de conduction la plus basse, la bande interdite qui les sépare détermine principalement les propriétés de transport du semi-conducteur et ce sont celles-ci que nous considérerons par la suite.

L'allure générale des bandes est la même pour tous les composés III-V considérés [64] dont la structure de bande est directe, c'est-à-dire pour lesquels le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont situés au centre de la zone de Brillouin, en $k=0$. Le minimum central de la bande de conduction correspond à des électrons de faible masse effective, donc très mobiles.

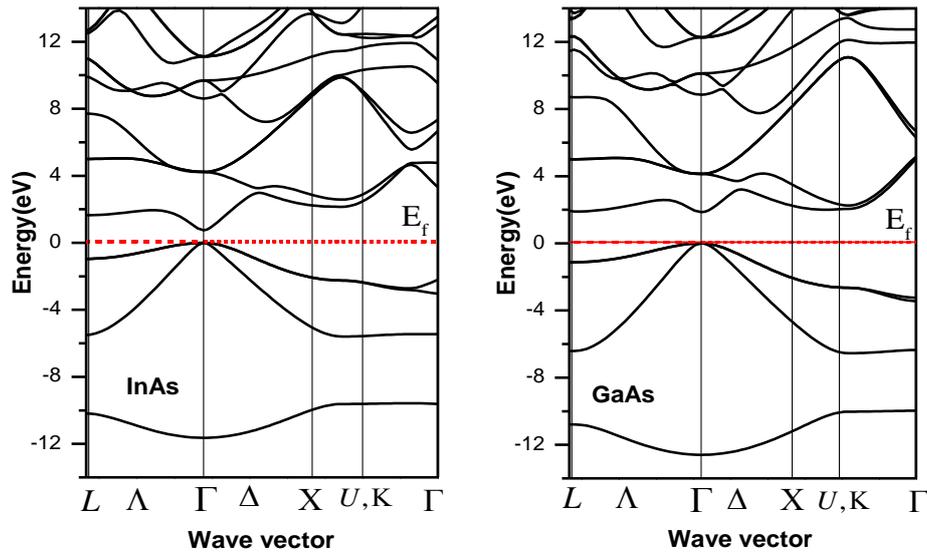


Figure 2. 3: Structures de bandes de InAs et GaAs [69,70].

Il existe par ailleurs des minima secondaires en bordure de la zone de Brillouin : quatre vallées L équivalentes, et trois vallées de type X. Ces minima sont beaucoup plus plats, les électrons y ont une masse effective beaucoup plus grande, et donc une faible mobilité. Le Tableau.2.2 donne les valeurs des masses effectives dans les différentes vallées et les écarts en énergie entre le minimum principal et les minima secondaires L et X . En effet, le réseau réciproque associé à la structure cristalline de type zinc-blende est cubique centré, sa maille élémentaire, qui correspond à la première zone de Brillouin de forme d'un octaèdre tronqué par les six faces d'un cube est représentée par la figure.2.4.

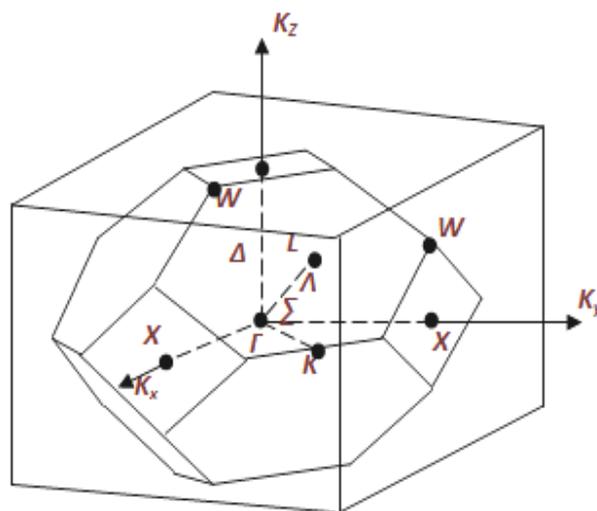


Figure 2. 4: Première zone de Brillouin de la structure zinc blende [71].

Avec :

Point Γ : centre de zone.

Direction Δ : direction $[1\ 0\ 0]$ et équivalentes.

Direction Λ : direction $[1\ 1\ 1]$ et équivalentes.

Direction Σ : direction $[1\ 1\ 0]$ et équivalentes.

Point X : bord (limite) de la zone dans la direction $[1\ 1\ 0]$.

Point L : bord de la zone dans la direction $[1\ 1\ 1]$.

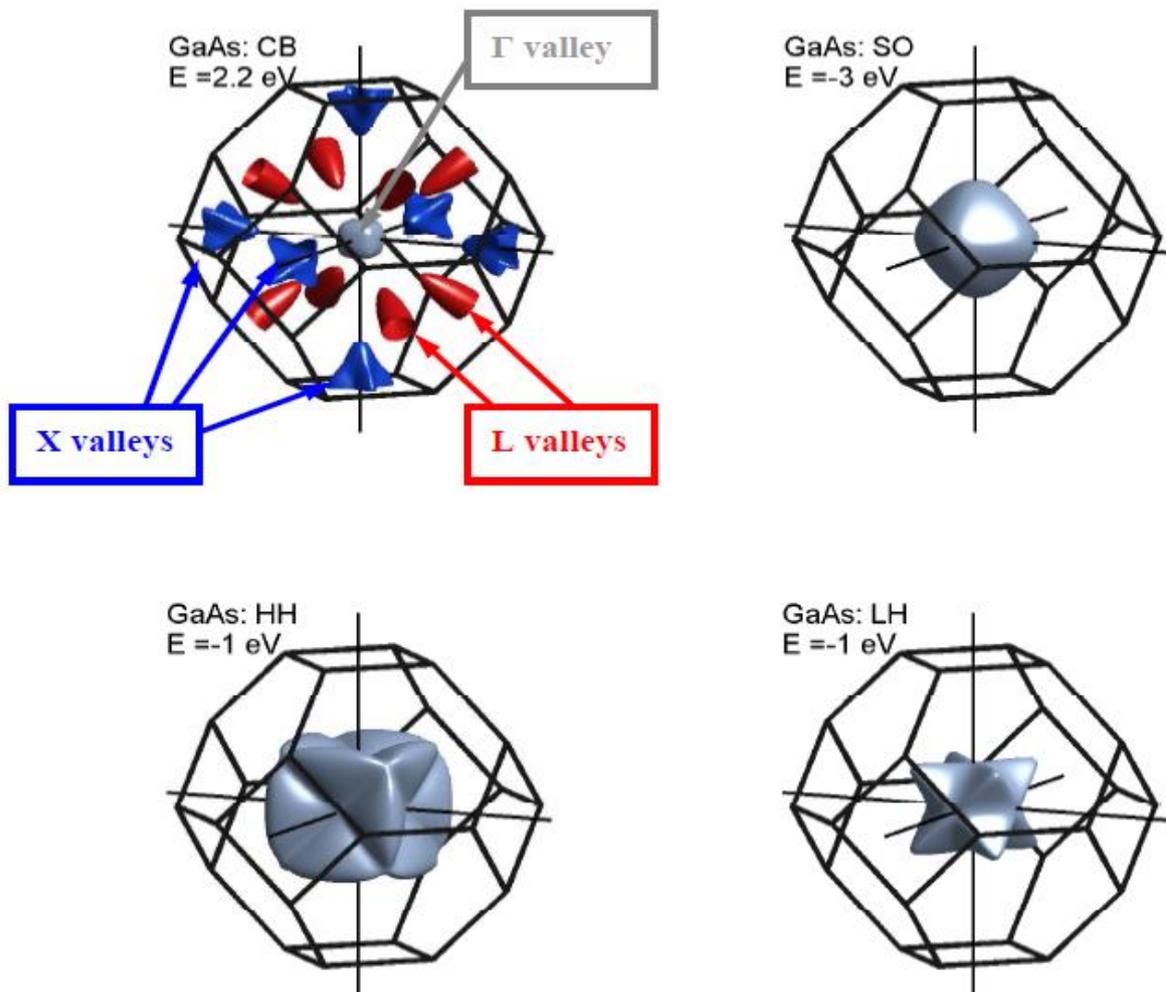


Figure 2. 5: Surfaces iso-énergie dans la 1ère zone de Brillouin de GaAs [72].

Tableau 2. 2: Caractéristiques (énergies interbandes et masses effectives) des structures électroniques utilisées pour l'ajustement des pseudopotentiels de GaAs, InAs [68,72].

Energie (eV) masse (m_0)	GaAs	InAs
E_0	1.519	0.417
Δ_0	0.341	0.390
$7c (E_0')$	4.546	4.390
$\Gamma 8c (E_0' + \Delta_0')$	4.716	4.580
$\Gamma 6v$	-13.0	-12.3
L6c	1.815	1.710
L6c+L45v (E_1)	3.038	2.610
L6c-L6v ($E_1 + \Delta_1$)	3.262	2.880
X6c	1.981	2.340
X6c-X6v (E_2)	4.974	4.470
X6c-X7v (E_2)	4.898	4.740
X7c	2.326	2.903
m_Γ	0.067	0.026
$m_{HH}[100]$	0.350	0.333
$m_{HH}[110]$	0.643	0.513
$m_{HH}[111]$	0.893	0.625

2.2.3. Propriétés électroniques

2.2.3.1. Confinement des porteurs

La longueur d'onde λ_β de De Broglie associée à l'électron de conduction, de masse effective m_e^* et d'énergie thermique kT s'écrit :

$$\lambda_{\beta} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_e^*k_{\beta}T}} \quad (30)$$

Si on restreint le mouvement de l'électron suivant une ou deux directions sur des distances inférieures ou égales à λ_{β} , les énergies des niveaux sont quantifiées suivant ces directions de confinement et peut s'écrire :

$$E = E_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*} \quad (31)$$

Où E_n est l'énergie quantifiée associée au système. Le second terme est l'énergie cinétique due au mouvement libre de l'électron dans les directions sans confinement et k le vecteur d'onde associé. $\hbar = h/2\pi$.

Si un matériau semi-conducteur ayant un gap optique E_{g1} appelé couche active est entouré par un matériau de gap E_{g2} plus grand, appelé barrière, ceci crée des zones dans lesquelles les porteurs (électrons et trous) sont confinés avec des énergies quantifiées. Cette quantification de l'énergie, différente selon le confinement, offre la possibilité de créer des objets aux caractéristiques très différentes. Ainsi on parle d'un confinement 2D dans une structure de puits quantiques. L'énergie des électrons dans ces structures est alors du type :

$$E(k_{\parallel}) = \frac{\hbar^2 k_{\parallel}}{2m^*} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left[k_x^2 + k_y^2 + \left(\frac{n_z}{l_z} \right)^2 \right] \quad (32)$$

n_z : nombre quantique.

Où \vec{k}_{\parallel} le vecteur d'onde dans le plan. La densité d'état, dans un système 2D, est une fonction en marche d'escalier dont l'expression est la suivante :

$$D(E) = \sum_n D_n(E) \quad (33)$$

Pour augmenter le confinement des porteurs des structures de type fil quantique dont deux dimensions correspondent à la longueur d'onde de Debroglie permettent un confinement des porteurs suivant deux directions de l'espace (y et z par exemple). La densité d'état est proportionnelle à : $\frac{1}{\sqrt{E-E_n}}$ [75] comme indiqué dans la figure 2.6.

$$D(E) = \sum_n D_n(E) = \sum_n \frac{1}{\sqrt{E-E_{n_z}-E_{n_y}}} \quad (34)$$

Pour $E - E_{n_z} - E_{n_y} > 0$

L'énergie des porteurs dans ces structures est de la forme :

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_e^*} = \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left[k_x^2 + \left(\frac{n_y}{l_y} \right)^2 + \left(\frac{n_z}{l_z} \right)^2 \right] \quad (35)$$

Où \vec{k}_x vecteur d'onde associé au mouvement libre unidimensionnel 1D.

n_y, n_z : nombres quantiques.

Et enfin de confinement 0D dans une structure de boîtes quantiques permet quant à elles de confiner les porteurs dans les trois directions de l'espace ; le spectre de la densité d'état est entièrement discrétisé en première approximation.

La densité d'états des boites quantiques s'écrit sous la forme suivante :

$$D(E) = \sum_n D(E) = \sum_n \delta(E - E_n) \quad (36)$$

Avec :

E_n : est l'énergie de confinement.

δ : est la fonction de Dirac.

L'énergie des porteurs dans ces structures est :

$$E_n(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\left(\frac{n_x}{l_x} \right)^2 + \left(\frac{n_y}{l_y} \right)^2 + \left(\frac{n_z}{l_z} \right)^2 \right] \quad (37)$$

n_x, n_y, n_z : nombres quantiques.

Le confinement électronique dans les boîtes quantiques engendre une modification radicale de la densité d'états électroniques par rapport aux matériaux massifs, puits quantiques ou encore fils quantiques. En effet la densité d'états électroniques présente un spectre discret sous l'action de ce confinement résultant de la discrétisation des niveaux d'énergie, comme il est présenté dans la figure.2.6.

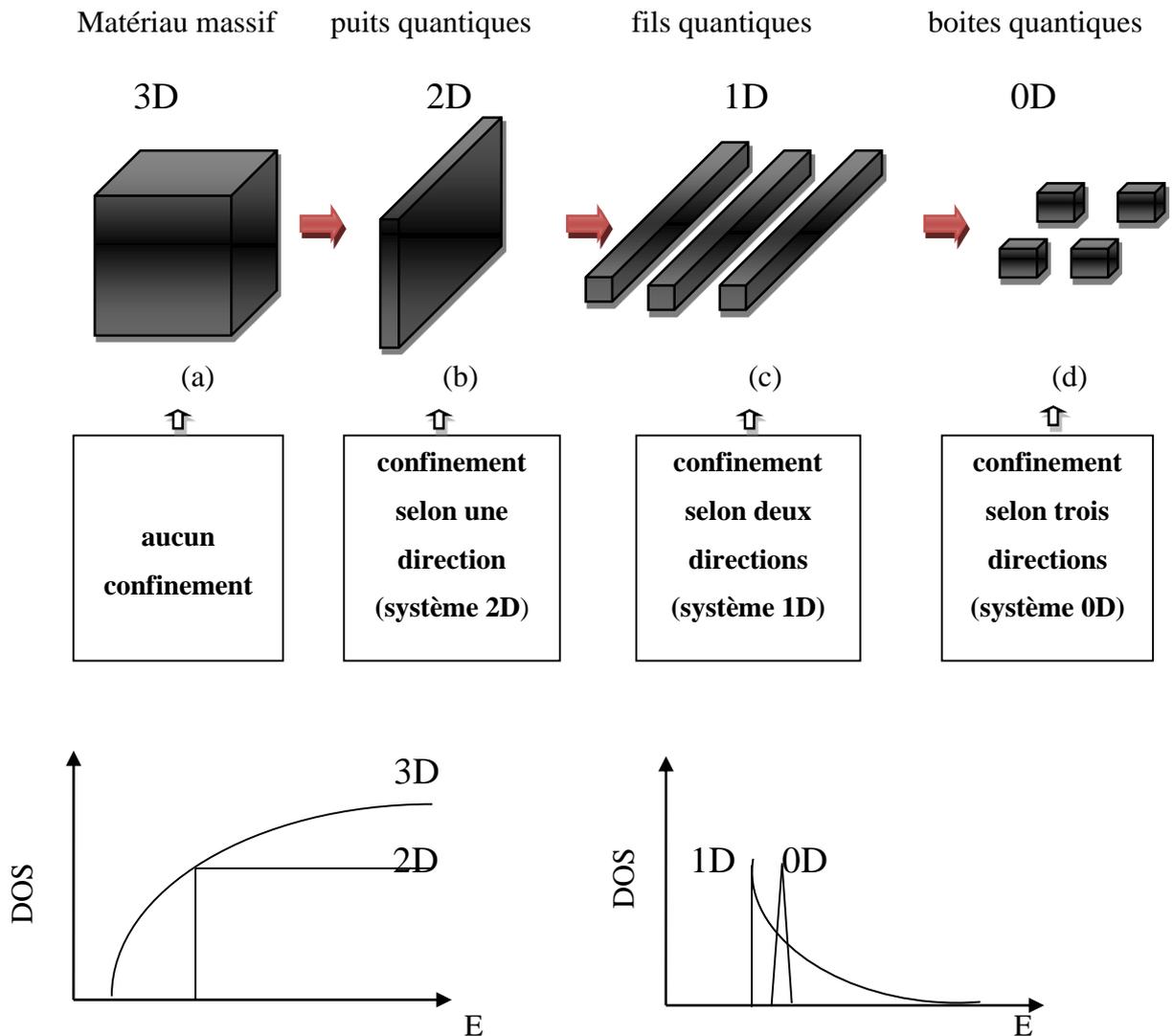


Figure 2. 6: Évolution de la densité d'états avec le niveau de confinement quantique. (a) aucun confinement, (b) confinement selon une direction (système 2D), (c) confinement selon deux directions (système 1D) et (d) confinement selon trois directions (système 0D) [73,74].

2.3. les boîtes quantiques

2.3.1. Concepts généraux sur les boîtes quantiques

Une boîte quantique, appelée aussi point quantique ou encore par son appellation anglophone (quantum dot), est un nano-cristal de matériau semi-conducteur dont les dimensions sont inférieures à 10 nm.

De par sa taille, il se comporte comme un puits de potentiel qui confine les électrons et les trous dans les trois dimensions de l'espace [75], dans une région d'une taille de l'ordre de la longueur d'onde des électrons selon Debroglie, soit quelques dizaines de nanomètres dans un semi-conducteur.

Ce confinement donne aux boîtes quantiques des propriétés proches de celles d'un atome, raison pour laquelle on appelle aussi les boîtes quantiques « atomes artificiels » [76].

Les premiers systèmes 0D réalisés sont des nano cristaux sphériques de semi-conducteur II-VI en 1936 [77]. Les premières observations de l'obtention des boîtes quantiques de semi-conducteurs III-V (InAs/GaAs) datent des années 80 [78]. Cet attrait considérable pour les structures de type boîtes quantiques [79] est d'ordre scientifique et technologique. L'intérêt scientifique réside dans la volonté de compréhension de la physique des nanostructures. En effet, les boîtes quantiques se situent à l'intersection du domaine de la matière condensée et de la physique quantique.

L'intérêt technologique vient des applications potentielles de ces nanostructures dans les dispositifs haute performance tels que les LEDs, les lasers, les mémoires optiques [78, 80, 81] ou encore dans l'information quantique [82] (car il est possible de générer des états quantiques utilisables dans la transmission de l'information).

En 2010, les points quantiques sont à la pointe de la recherche dans le domaine des semi-conducteurs, notamment concernant les transistors, les LEDs, les cellules photovoltaïques à haut rendement [83, 84] et les diodes laser [85].

Une boîte quantique peut être imaginée comme un atome artificiel géant [86] constitué de milliers d'atomes réels. Nous allons, à travers cette partie, décrire quelques propriétés intéressantes qui pourraient résulter de l'utilisation des BQs comme zone active d'un composant.

2.3.2. Croissance des boîtes quantiques

Un échantillon sur lequel on a fait croître des boîtes quantiques comporte trois éléments: le matériau massif tridimensionnel, la couche tampon et les boîtes en elles-mêmes qui confinent les porteurs dans les trois directions de l'espace réel.

Il existe plusieurs façons de réaliser des boîtes quantiques, bien qu'il s'agisse à chaque fois de "remodeler" des couches 2D préexistantes. Parmi ces techniques, On peut citer la méthode dite de Stranski-Krastanov, qui est celle que nous allons l'utiliser pour la croissance des boîtes quantiques.

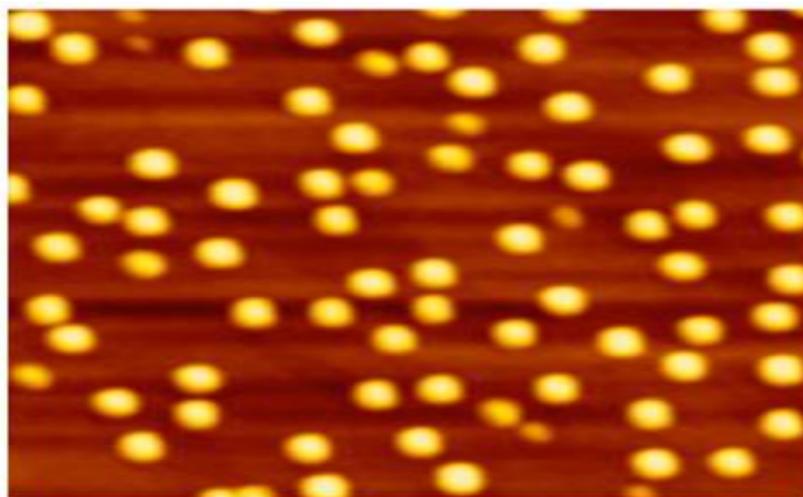


Figure 2. 7: Vue au microscope AFM d'un plan ($0.5 \times 0.5 \text{ mm}^2$) de boîtes quantiques d'InAs sur substrat de GaAs avec un dopage de Si de $5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ [87].

2.3.2.1. Les méthodes de croissances

Pour ces dernières années, Il existe plusieurs méthodes pour réaliser des structures à boîtes quantiques :

2.3.2.1.1. La méthode lithographie

La fabrication des boites quantiques par lithographie a été la première méthode étudiée par Petroff *et al* pour la réalisation de nanostructures en semi-conducteur III-V. Cette méthode est intensivement étudiée car il est difficile de réaliser des boites de petite taille et leur surface présentait de nombreux défauts. L'inconvénient principal est la dégradation des propriétés optiques des structures à élaborer et ne permet pas d'obtenir une grande densité de nanostructures. Cette technique nécessite un appareillage très complexe et couteux [88].

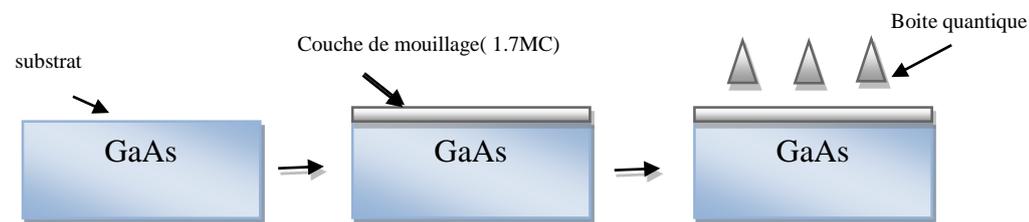
2.3.2.1.2. La méthode de croissance épitaxiale

Les nombreux travaux dans la croissance des films minces ont permis de distinguer trois modes de croissances épitaxiales :

- ✓ Le mode de croissance Volmer-Weber est une croissance qui est immédiatement tridimensionnelle (3D), elle a lieu lorsque les atomes adsorbés vont énucléer pour former des agrégats [89].
- ✓ Le mode de croissance Frank-van der Merwe, dans ce mode est la croissance est bidimensionnelle (2D) ou couche par couche en raison de l'interaction favorable entre le dépôt et

le substrat. Ainsi, la croissance de la deuxième couche ne débutera qu'au terme de la croissance de la première [90].

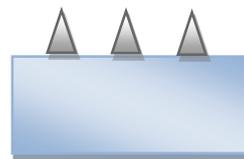
✓ Enfin, on a le mode de croissance Stranski-Krastanov (SK). Ce mode est particulièrement intéressant pour la formation d'îlots de faible dimension où la croissance est une combinaison des deux modes précédents : après un début de croissance 2D, on observe une transition vers un mode croissance 3D avec l'apparition d'îlots 3D. Il est basé sur la croissance d'un matériau sur un autre de paramètres de mailles très différents, particulièrement par épitaxie par jet moléculaire (EJM). Ce mode de croissance a été proposé en 1939 par I. N. Stranski- Krastanov et réalisé pour la première fois en 1985 [91,92], nous le présenterons plus en détail dans la suite de notre travail.



a) Mode Stranski-Krastanov



b) Mode Franck-Van der Merwe



c) Mode Volmer-Weber

Figure 2. 8: Les trois modes de croissance épitaxiale: a) mode Stranski -L. Krastanov, b) mode Franck-Van der Merwe, c) mode Volmer-Weber.

2.3.2.2. Les techniques de croissance

Les principales techniques actuellement utilisées pour la fabrication des boîtes quantiques sont l'épitaxie en phase vapeur qui utilise des halogénures (Hybride Vapor Phase Epitaxy: « EPVH »), l'épitaxie en phase vapeur par pyrolyse d'organométalliques (Metallorganic Vapor Phase Epitaxy « PVOME ») et l'épitaxie par jets moléculaires (EJM) (Molecular Beam Epitaxy MBE). Le développement des techniques modernes de la croissance cristalline et de la purification des semi-conducteurs, a permis la réalisation de plusieurs alliages binaires, ternaires et quaternaires.

Ces alliages sont caractérisés par la présence des coefficients stœchiométriques. L'extension permettra d'envisager des semi-conducteurs dont la bande interdite s'étendra aux valeurs de 0.18 à 2.42 eV. Les résultats furent longtemps limités aux déterminations de structures de bande et de

paramètres de réseau en fonction de la composition. La qualité des matériaux était suffisante, l'arséniure de gallium (GaAs) passait au stade du développement dès le début des années 1970.

2.3.3. La contrainte

Le système le plus étudié est obtenu par croissance d'InAs : (de paramètre de maille 6.058\AA) sur du GaAs : (de paramètre de maille de 5.653\AA). Ce système présente un désaccord de maille de 7% [79,93]. (Voir Tableau.2.3). La maille du matériau épitaxié se déforme de manière élastique dans les deux directions parallèle et perpendiculaire. Dans le cas où les couches épitaxiées sont suffisamment fines, la maille du matériau épitaxié se déforme de manière élastique de telle sorte que le paramètre de maille s'accorde au paramètre du substrat dans la direction parallèle à l'interface. Dans la direction perpendiculaire à l'interface de croissance le réseau se déforme en s'allongeant ou se comprimant selon que le paramètre de maille de la couche est plus petit ou plus grand que celui du substrat.

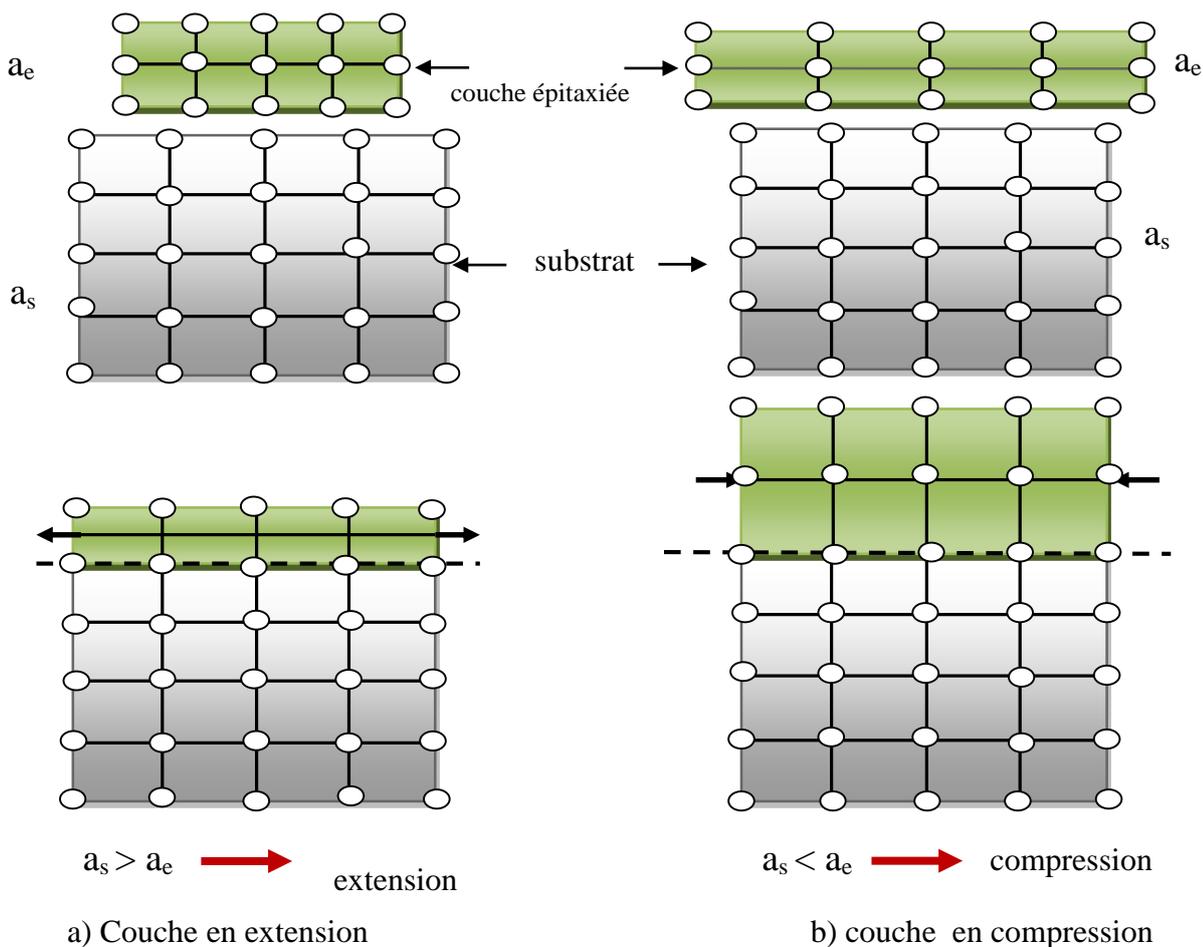


Figure 2. 9: Illustration des deux types de déformation.

Cette différence de maille provoque une déformation de la couche épitaxiée, soit en extension (figure 2.9.a), ou en compression (figure 2.9.b). Par des déformations biaxiales (ε_{xx} et ε_{yy}) et uniaxiales (ε_{zz}).

- biaxiales dans le plan de croissance :

$$\varepsilon_{//} = \varepsilon_{xx}(x) = \varepsilon_{yy}(x) = \frac{a_s - a_e(x)}{a_e(x)} \quad (38)$$

- uniaxiales dans la direction de croissance :

$$\varepsilon_{\perp} = \varepsilon_{zz}(x) = -2 \frac{C_{12}(x)}{C_{11}(x)} \varepsilon_{xx}(x) \quad (39)$$

Où :

ε : la déformation ou le désaccord de maille.

a_s : le paramètre de maille du substrat (GaAs).

a_e : le paramètre de maille de la couche épitaxiée.

C_{ij} : les coefficients d'élasticité.

2.3.4. Structure en énergie des boîtes quantiques

Lors de la croissance d'InAs sur GaAs, et en dessous d'une certaine épaisseur critique qui varie de 1.5 à 1.7 monocouche (MC), une couche bidimensionnelle (2D) d'InAs se forme en dessous des îlots appelée couche de mouillage [94,95], en se comportant comme un réservoir d'électrons répartis sur un continuum de niveaux d'énergie, elle est adaptée en paramètre de maille avec le GaAs dans le plan des couches.

Lors de l'augmentation de l'épaisseur de la couche d'InAs, la contrainte accumulée devient très importante et des îlots tridimensionnels et de taille nanométrique se forment sur le reste de la couche 2D d'InAs. On obtient ainsi la structure en énergie décrite en figure 2.10 [96,97].

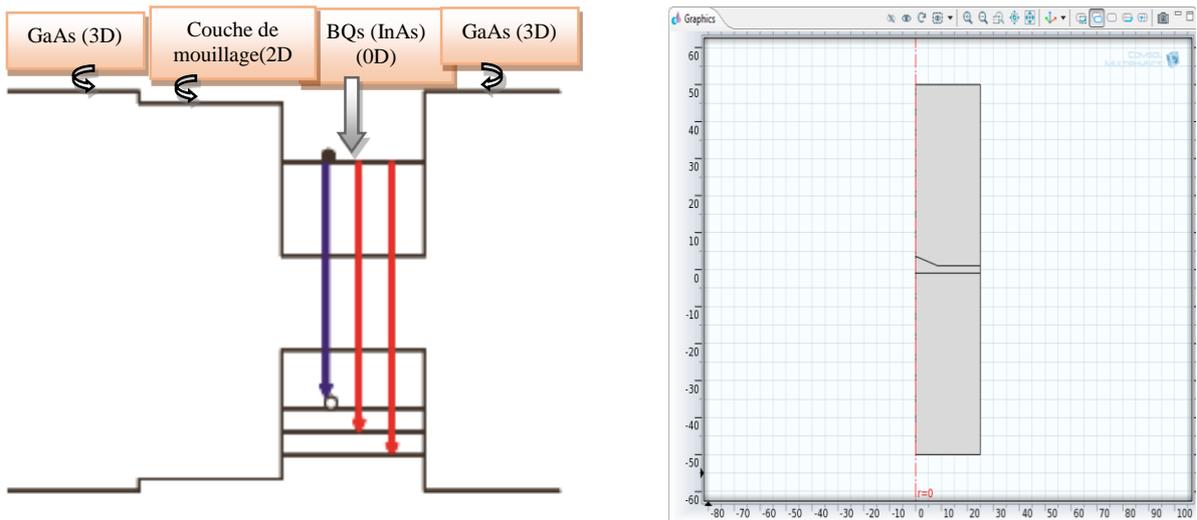


Figure 2. 10: a)Structure énergétique d'une boîte quantique b) Géométrie 2D d'une boîte quantique et d'une couche de mouillage (COMSOL)

La figure 2.11 montre un spectre de photoluminescence de BQs d'InAs dans une matrice de GaAs. On distingue trois raies d'émission provenant de la recombinaison radiative des porteurs dans les BQs, dans la couche 2D d'InAs (dite couche de mouillage) sur laquelle croit les boîtes, et dans le volume du GaAs.

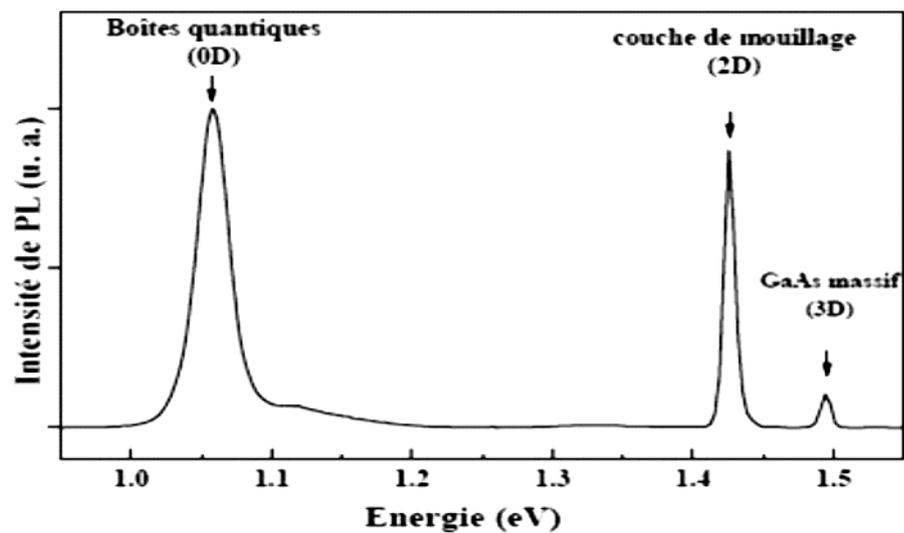


Figure 2. 11: Spectre de luminescence d'une structure à boîtes quantiques InAs/GaAs à basse température [97].

2.3.5. La contrainte sur le Gap d'énergie

L'effet de la contrainte sur les bandes de valence et de conduction peut être décomposé en deux composantes [98]:

- Une composante hydrostatique, qui diminue l'énergie de bande interdite dans le cas d'une augmentation de volume ou qui l'augmente dans le cas contraire.
- Une composante de cisaillement qui a pour effet de lever la dégénérescence trous lourds, trous légers du haut de la bande de valence voir (figure 2.12).

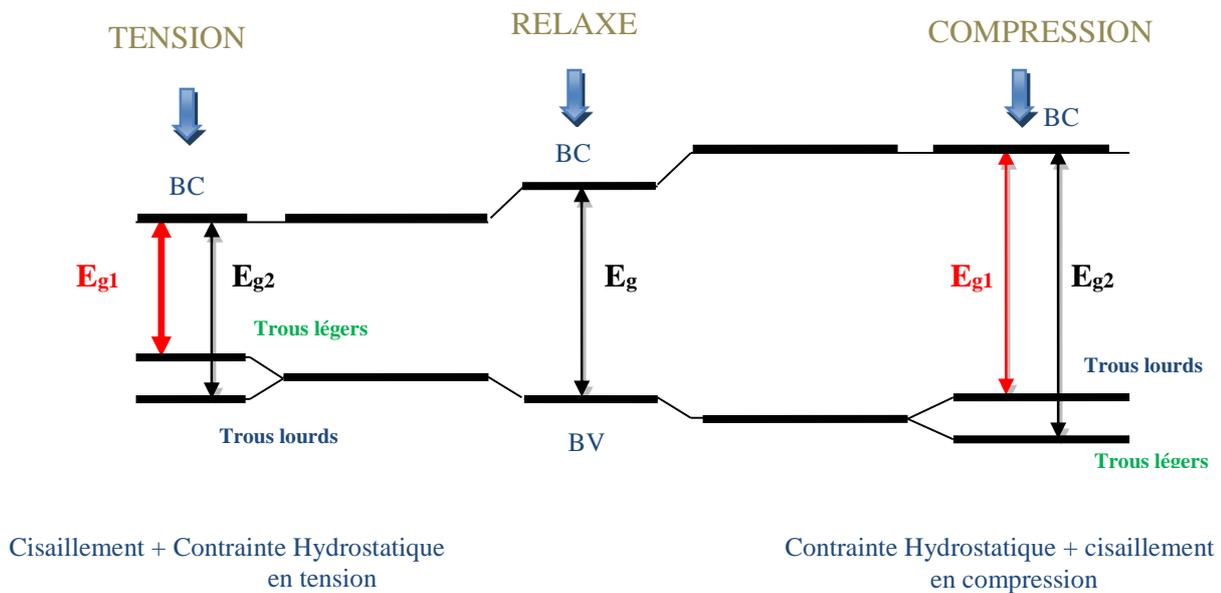


Figure 2. 12: Évolution de l'énergie de la bande interdite en fonction de l'état de contrainte d'une couche déposée sur un substrat.

En première approximation, même si les boîtes quantiques ne sont pas symétriques dans le plan perpendiculaire à l'axe de croissance, rappelons que la décomposition de la contrainte hydrostatique et bi axiale conduit aux composantes de déformations suivantes :

$$\varepsilon_{\perp}(r) = \varepsilon_{xx}(r) + \varepsilon_{yy}(r) + \varepsilon_{zz}(r) \quad (40)$$

$$\varepsilon_{//}(r) = \varepsilon_{xx}(r) + \varepsilon_{yy}(r) - 2\varepsilon_{zz}(r) \quad (41)$$

Nous savons que la composante hydrostatique a pour effet de moduler l'énergie de la bande interdite [76], alors que la composante uniaxiale lève la dégénérescence entre les niveaux de trous lourds et trous légers. D'une manière plus formelle les potentiels de confinement respectifs de chaque porteur sont de la forme :

$$V_c(r) = E_g + a_c \varepsilon_h(r) \quad (42)$$

$$V_{hh}(r) = a_v \varepsilon_h(r) + \frac{b}{2} \varepsilon_b(r) \quad (43)$$

$$V_{lh}(r) = a_v \varepsilon_h(r) - \frac{b}{2} \varepsilon_b(r) \quad (44)$$

Tel que le potentiel hydrostatique total de déformation est proportionnel à un coefficient de la bande interdite directe [99], où la constante de proportionnalité est approximativement le module en vrac pression.

Les potentiels de déformations a_c , a_v et b pour InAs et GaAs sont listés dans le tableau 2.3.

Tableau 2.3 : Les potentiels de déformation pour InAs et GaAs :

Matériau	a_c	a_v	b
GaAs	-7.17	1.16	-1.7
InAs	-5.08	1.00	-1.8

La dépendance de la pression hydrostatique expérimentale, pour GaAs implique un potentiel de déformation total : $a = a_c + a_v$ [100, 101], où le signe moins représente la dilatation de la largeur de la bande quand le cristal est comprimé. Le potentiel de déformation de bande de conduction en courant alternatif correspond au décalage du bord de la bande de conduction avec la souche appliquée.

Dans lesquelles:

$$E_g = x_{In} E_g^{InAs} + x_{Ga} E_g^{GaAs} \quad (45)$$

Tel que E_g est le gap du matériau non contraint, V_{hh} et V_{lh} sont respectivement les bandes de trous lourds et de trous légers. Le potentiel de confinement des électrons, des trous lourds et des trous légers est représenté dans la figure.2.13, pour une boîte quantique de 20 nm de diamètre et 6 nm de hauteur.

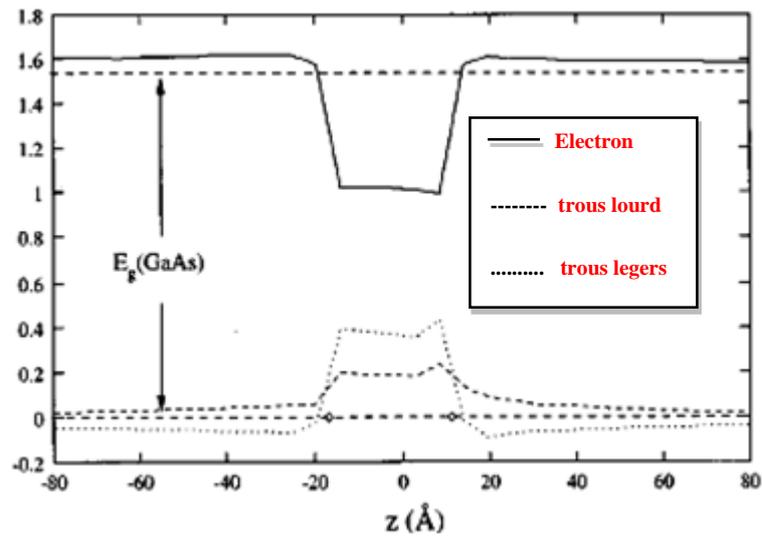


Figure 2. 13: Potentiel de confinement des porteurs dans une boîte quantique [102].

2.3.6. Interpolation

Il s'avère nécessaire d'estimer les quantités physiques de l'alliage à partir des valeurs correspondantes aux matériaux binaires de base qui le constituent. En utilisant la loi d'interpolation linéaire de Vegard, les paramètres physiques des alliages ternaires peuvent être extraites de celles des binaires. Dans le cas d'une couche d'InGaAs pseudo morphique sur GaAs, l'InGaAs est contraint en tension (Voir figure.2.9.a).

2.3.6.1. Paramètre de maille

Les paramètres de maille respectifs de l'InAs et de GaAs sont $a_{\text{InAs}} = 6.058 \text{ \AA}$, $a_{\text{GaAs}} = 5.653 \text{ \AA}$. Le paramètre de maille d'un alliage $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ non contraint est déterminé par la loi linéaire de Vegard en fonction de la proportion d'Indium et des paramètres de maille des composés binaires non contraints InAs et GaAs [102] :

$$a^{\text{InGaAs}}(x) = (1 - x) \cdot a^{\text{InAs}} + x \cdot a^{\text{GaAs}} \quad (46)$$

La figure 2.14 illustre le paramètre de maille de l' $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ en fonction de la concentration d'indium.

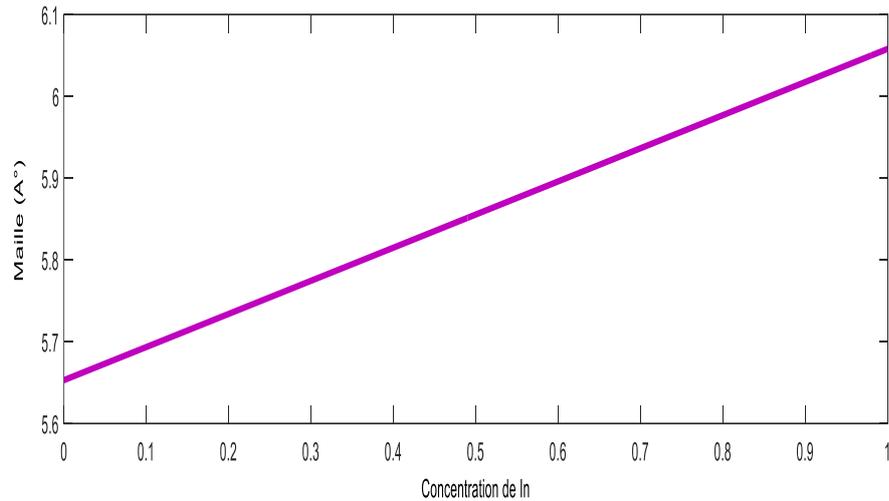


Figure 2. 14: Variation du paramètre de maille de l' $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ en fonction de la concentration d'indium.

Nous avons tracé le paramètre de maille de InGaAs en fonction de la concentration d'indium sur la figure 2.14, nous pouvons voir que l'indium a pour effet d'augmenter le paramètre de maille.

2.3.6.2. Désaccord paramétrique

Pour des valeurs de x (concentration d'indium) lors de l'épitaxie de l' $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ sur le substrat GaAs , le raccordement des mailles à l'interface entraîne l'existence d'une déformation de la maille cristalline.

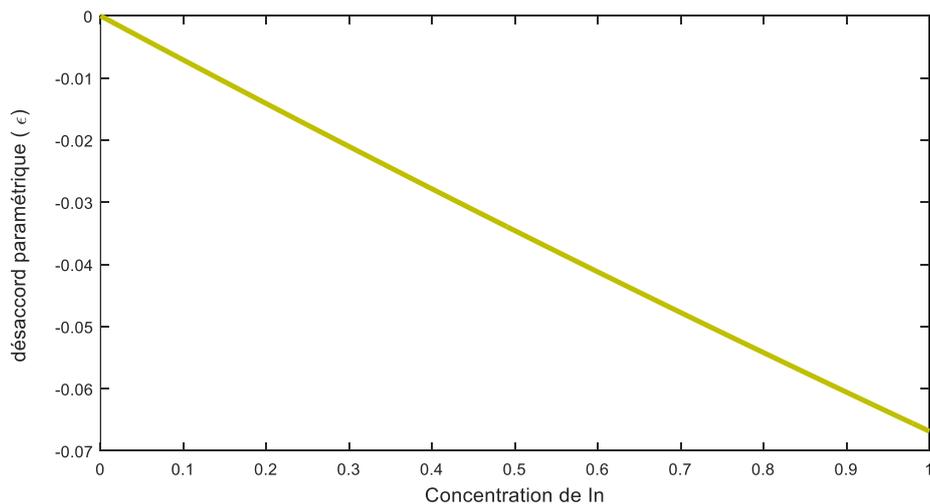


Figure 2. 15: Variation du désaccord paramétrique (ϵ) en fonction de la concentration d'indium de la structure $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As} / \text{GaAs}$

La figure 2.15 montre la variation du désaccord de maille en fonction de la concentration d'indium pour l'hétéro-structure $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$.

A partir de l'équation (46) de la loi de Végard et les équations (40) et (41) on a calculé le désaccord de maille dans le plan de la couche de notre structure $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As} / \text{GaAs}$ par rapport à la variation de la densité d'indium. La remarque d'une diminution de la déformation ε avec l'augmentation de la concentration d'indium, explique une contrainte en tension ($a_s > a_e$).

2.3.6.3. L'épaisseur critique

Il est bien connu que lors d'une croissance épitaxiale, l'épaisseur de la couche épitaxiale dépasse une valeur limite appelée épaisseur critique (h_c), la contrainte se relaxe. Quand le désaccord de maille entre le substrat et la couche épitaxiale est faible, les premières couches déposées s'accommodent élastiquement au paramètre du substrat et le résultat est la formation d'une couche contrainte [103,104].

Cependant, si l'épaisseur de la couche épitaxiée est supérieure à l'épaisseur critique, le désaccord est alors rattrapé par la génération des dislocations à l'interface de croissance. Ces dislocations se propagent du substrat vers l'interface de croissance et la couche commence à relaxer.

Pour notre étude, nous avons utilisé le modèle le plus classique, celui de K. Köksal et al [105] :

$$h_c = \frac{a_e}{k\sqrt{2}\pi\Delta} * \frac{1-0.25*\gamma}{1+\gamma} * \ln\left(\frac{h_c*\sqrt{2}}{a_e} + 1\right) \quad (47)$$

Avec :

Δ : Le désaccord paramétrique qui est donné par :

$$\Delta = \left| \frac{a_s - a_e}{a_s} \right| \quad (48)$$

γ : Le coefficient de Poisson qui est donné par :

$$\gamma = \frac{C_{12}}{C_{11} + C_{12}} \quad (49)$$

Où, C_{11} et C_{12} sont les constantes d'élasticité obtenues par l'interpolation linéaire des binaires GaAs, GaN, GaSb.

- a_e : Paramètre de maille de la couche relaxée.
- k : C'est un coefficient égal à 1 dans le cas d'un super-réseau ; à 2 pour un puits quantique ; 4 dans le cas d'une couche unique.

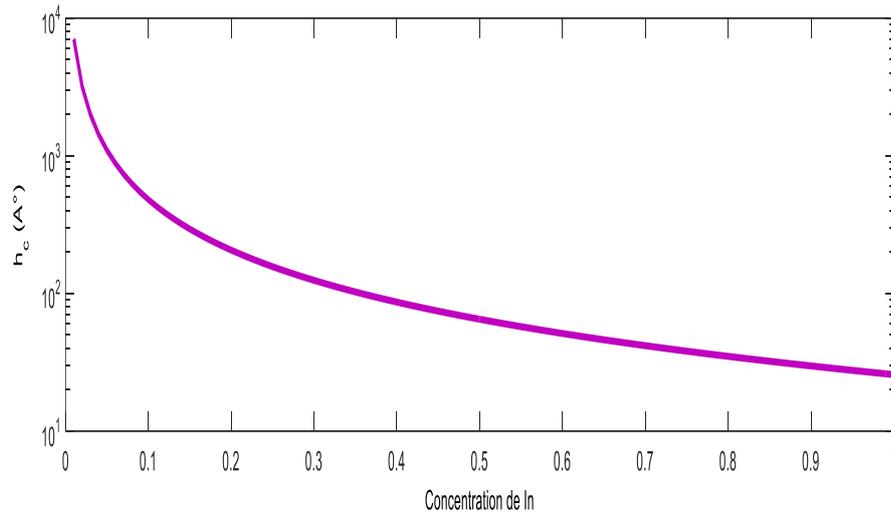


Figure 2. 16: Variation de l'épaisseur critique (h_c) en fonction de la fraction d'indium.

Pour la structure $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ avec une couche GaAs nous avons tracé sur la figure 2.16 la variation de l'épaisseur critique en fonction des fractions d'indium. Nous constatons que l'indium a pour effet de diminuer l'épaisseur critique pour une contrainte extensive.

2.3.6.4. Gap d'énergie sans contrainte

Il est possible de déterminer le gap d'énergie de l'InGaAs en utilisant la loi de Vegard avec un paramètre de courbure à partir des gaps d'énergie interdite des composés binaires GaAs et InAs.

La loi de Vegard avec le paramètre de courbure [70] peut varier par des effets extérieurs tels que la déformation, le dopage, ou la fluctuation de la composition, elle est définie par [106,107]:

$$E_g^{\text{InGaAs}} = (1-x) E_g^{\text{InAs}} + x E_g^{\text{GaAs}} - b x (1-x) \quad (50)$$

Avec: x : la concentration de gallium dans l' $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ [s.d.].

b : le paramètre la courbure [eV].

E_g^{InGaAs} : le gap d'énergie de l'InGaAs [eV].

E_g^{GaAs} : le gap d'énergie du GaAs [eV].

E_g^{InAs} : le gap d'énergie de l'InAs [eV].

A partir d'une valeur de 0.477 eV pour le paramètre de courbure, en utilisant la loi de Vegard, il a été rapporté par Paul *et al*, [14, 15].

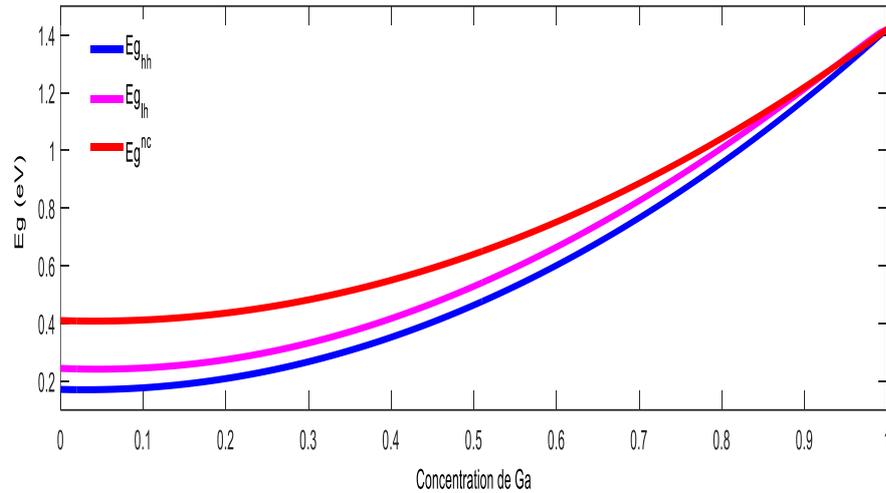


Figure 2. 17: Évolution du gap d'énergie interdite de l' $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ en fonction de la concentration de gallium en introduisant le paramètre de courbure « b ».

La figure 2.17 montre que l'énergie interdite évolue suivant la concentration de gallium, on remarque que l'énergie de la bande interdite augmente de 0.415 eV jusqu'à 1.42 eV au moment où la concentration d'indium croît de 0% jusqu'à 100%.

La transition la plus énergétique est la transition électrons de la bande de conduction vers trous légers de la bande de valence (notée E_{LH}), et la moins énergétique est la transition électrons – trous lourds (notée E_{HH}).

2.4 Conclusion

Nous avons rappelé dans ce chapitre quelques propriétés de base des matériaux III-V, quelques concepts généraux sur les boîtes quantiques et leurs méthodes et techniques de croissance. Un positionnement de ce travail a été exposé notamment sur la loi d'interpolation linéaire de Vegard et les paramètres physiques des alliages ternaires.

Nous avons aussi présenté dans ce chapitre la structure en énergie des boîtes quantiques sans et avec contrainte.

Les chapitres qui vont suivre seront consacrés à l'étude des propriétés physiques (structurale, optoélectronique et photovoltaïque).

CHAPITRE 3

CARACTERISATION MORPHOLOGIQUE ET MICROSTRUCTURALE DES STRUCTURES A BOITES QUANTIQUES

3.1.Introduction

Dans la première partie, nous présenterons l'étude des boîtes quantiques d'InAs/GaAs réalisée par différentes techniques spectroscopiques. Nous décrivons les principes physiques à la base de ces mesures effectuées pour notre échantillon. Nous présenterons aussi, la caractérisation structurale à boîte quantique d'InAs/GaAs.

L'échantillon a été préparé par épitaxie à jets moléculaires (EJM) « équipement de croissance dans Laboratoire de Micro Optoélectronique et Nano-système (LMON) à Monastir (Tunisie) ». Pour cette étude, deux techniques d'analyses ont été utilisées : la microscopie électronique à balayage (MEB) et l'analyse de dispersion d'énergie des rayons X (EDX). Cette dernière, nous a permis de faire l'analyse qualitative élémentaire des nanoparticules (boîtes quantiques) déposées sur le substrat (GaAs). Ces analyses ont été réalisées au sein du Laboratoire de physique fondamentale et appliquée (FUNDAPL), par le MEB environnemental Quanta 650 associé à l'EDX : BRUKER X flash 6I10. Ci-dessous nous présenterons les résultats obtenus au laboratoire FUNDAPL ainsi que ceux obtenus par l'étude expérimentale effectuée sur le Microscope à Force Atomique (AFM) au laboratoire (LMON).

Dans la deuxième partie, nous discuterons l'analyse des états électroniques d'un point quantique d'InAs cultivés sur un substrat de GaAs. L'étude de ce point quantique consiste en la proposition de plusieurs géométries (elliptique, rectangulaire et triangulaire). Le modèle se base sur la résolution de l'équation de Schrödinger stationnaire. Nous présenterons les résultats obtenus par simulation à l'aide du logiciel « COMSOL » pour chaque type de géométrie [108].

3.2. L'étude de caractérisation morphologique et microstructurale: Série S0301

Dans ce chapitre, nous détaillons les études de la Microscopie électronique à balayage (MEB). Il s'agit essentiellement de structures de boîtes quantiques d'InAs sur substrat GaAs.

Notre échantillon « classique » appartient à la série nommée S0301. Il contient un plan de boîtes quantiques que notre étude tentera d'explicitier pour le système InAs/GaAs

3.2.1 Structure d'échantillon

Il s'agit d'un plan de boîtes quantiques d'InAs sur un substrat GaAs et une couche d'encapsulation de GaAs qui recouvre les boîtes. Le schéma de la structure d'échantillon de boîte quantique d'InAs/GaAs étudié est présenté dans la figure.3.1.

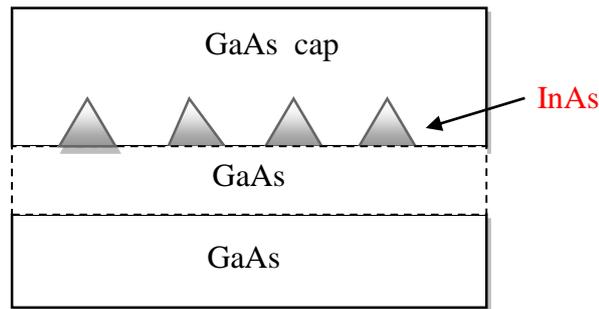


Figure 3. 1: Schéma type de la structure des Boîtes quantiques InAs/GaAs.

L'idée consiste à faire croître une hétéro structure à partir de deux matériaux semi-conducteurs de largeurs de bande interdite différentes et présentant une légère différence du paramètre de maille (voir Table.3.1).

Tableau 3.1: Caractéristiques des deux semi-conducteurs InAs et GaAs.

	InAs	GaAs
Paramètre de maille (Å)	6.06	5.65
Energie du gap à 4K (eV)	0.42	1.53

3.2.2 Conditions de croissance

L'échantillon qui nous allons étudier a été réalisé par épitaxie à jets moléculaires sur un substrat de GaAs avec plusieurs conditions de croissance et avec l'influence de plusieurs paramètres [109]. Le principe de l'épitaxie est d'assurer la continuité du réseau cristallin d'un matériau A déposé sur un matériau B, de ce fait le paramètre essentiel est la valeur des paramètres de mailles des espèces présentes. Nous ne détaillerons pas ces aspects propres aux épitaxieurs. Le principe de fabrication des boîtes quantiques est bien expliqué dans la bibliographie, une description détaillée de cette technique est donnée dans la référence [92].

La réalisation de boîtes quantiques par le mode de croissance Stranski-Krastanov (SK), qui a été schématisée par la figure.2.8 consiste à déposer un matériau présentant un désaccord paramétrique plus ou moins important avec le substrat. La croissance est bidimensionnelle (2D) dans les premiers stades du dépôt avec une accumulation de l'énergie élastique de la couche 2D (due à la déformation tétragonale). Celle-ci est appelée couche pseudo-morphique.

La reconstruction de surface avant et pendant le dépôt d'InAs semble avoir une influence déterminante sur la forme finale des boîtes [109]. D'après A l'INL, Brault et al [110-111], les voies

principales de croissance consistent d'une part soit avec le refroidissement sous arsenic, soit par recuit sous arsenic à la température de croissance.

L'augmentation de la température et de la pression d'arsenic influence la formation des boîtes isotropes lors de la croissance et avec un changement de paramètres [109].

3.2.3 Etude surfacique de la structure

3.2.3.1 Évolution de densité surfacique des boîtes quantiques par Microscopie à Force Atomique (AFM)

Dans ces conditions, on obtient une surface après la croissance de notre échantillon qui a été analysée par Microscopie à Force Atomique (AFM) et qui a été réalisé en coopération avec l'équipe de (LMON) Monastir. Cette technique permet de caractériser l'état de la surface et les défauts émergents. Ces défauts sont visibles sous forme de points noirs sur les images AFM.

Les dimensions obtenues sont de quelques nanomètres pour le diamètre et plusieurs dizaines à centaines de nanomètres pour la profondeur.

L'image 3.2 montre une surface de $1 \mu\text{m}^2$ approximativement pour l'échantillon S0301.

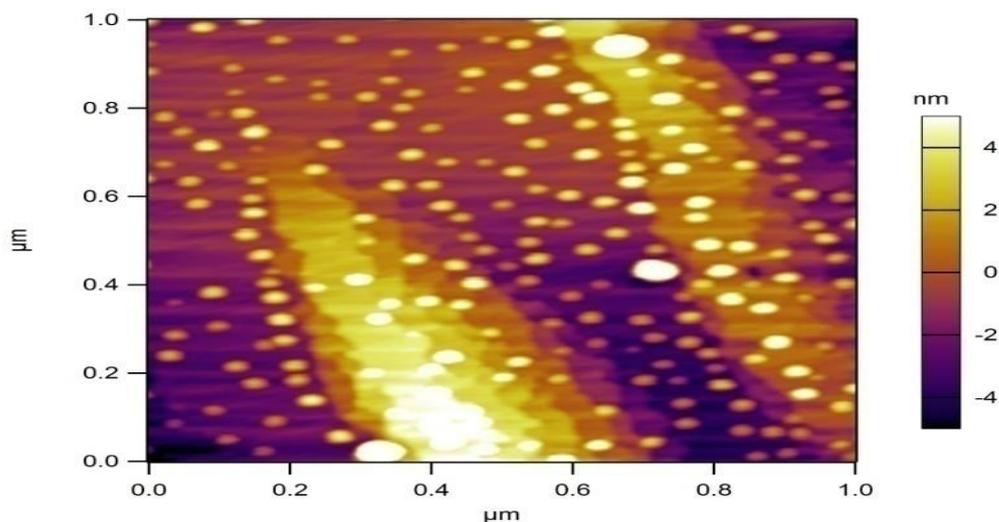


Figure 3. 2: Images AFM ($1 \mu\text{m} * 1 \mu\text{m}$) montrant l'évolution de densité surfacique des boîtes quantiques d'InAs déposée sur un substrat GaAs. (LMON) Monastir.

Les points blancs visibles d'imagerie AFM de la structure (S0301) non encapsulée sont présentés en figure.3.2 et permettent de constater l'homogénéité de la répartition des boîtes quantiques obtenue.

3.2.3.2 Étude de l'évolution de densité surfacique des boîtes quantiques par microscopie électronique à balayage (MEB)

La figure 3.3 montre des images MEB d'une couche de boîte quantique élaborée sur le substrat de GaAs et l'observation au plus fort grossissement (figure3.3c) permet de voir distinctement la formation des nanoparticules variant entre 40nm et 100nm.

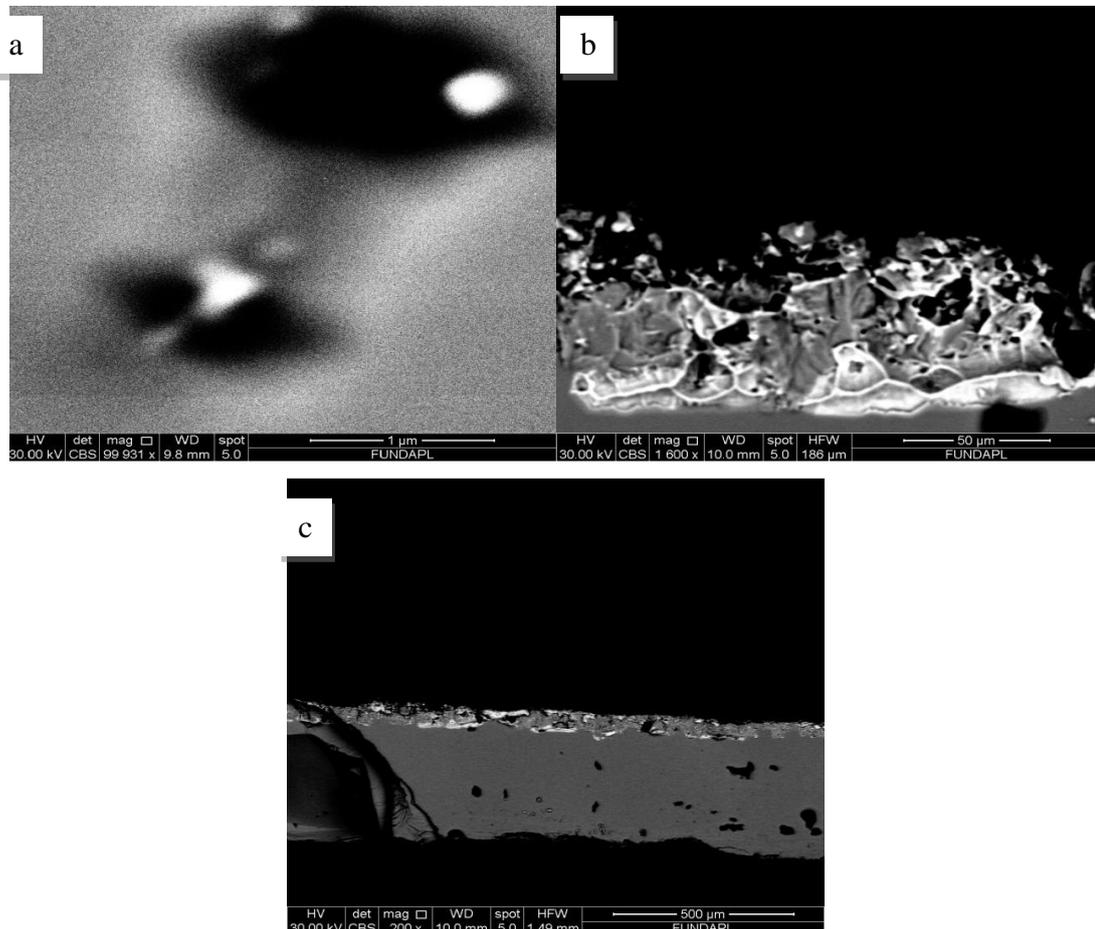


Figure 3.3: Images MEB en section pour (a : 1 μm), (b : 50 μm), (c : 500 μm) et d'une structure InAs/GaAs pour différents agrandissements (FUNDAPL-BLIDA.1)

L'image 3.3 montre un changement de forme des dendrites vers des BQs isotropes qui pouvait avoir lieu lors de la descente d'agrandissement.

La coupe transversale de l'échantillon (Figure3.3) montre que les éléments obtenus sont liés au niveau de leurs extrémités par des forces de Van Der Waals [112, 113], ce sont des forces d'interactions faibles en énergie. Ceci permet d'expliquer la forme qui apparaît à la surface d'échantillon.

3.2.4 Décoration de nanoparticules suivant une observation perpendiculaire

L'étude précédente nous a permis de déduire des propriétés et un certain nombre de renseignements structuraux. Cette méthode de caractérisation permet de sonder nos boîtes quantiques avec un pouvoir de résolution de l'ordre de grandeur de l'atome.

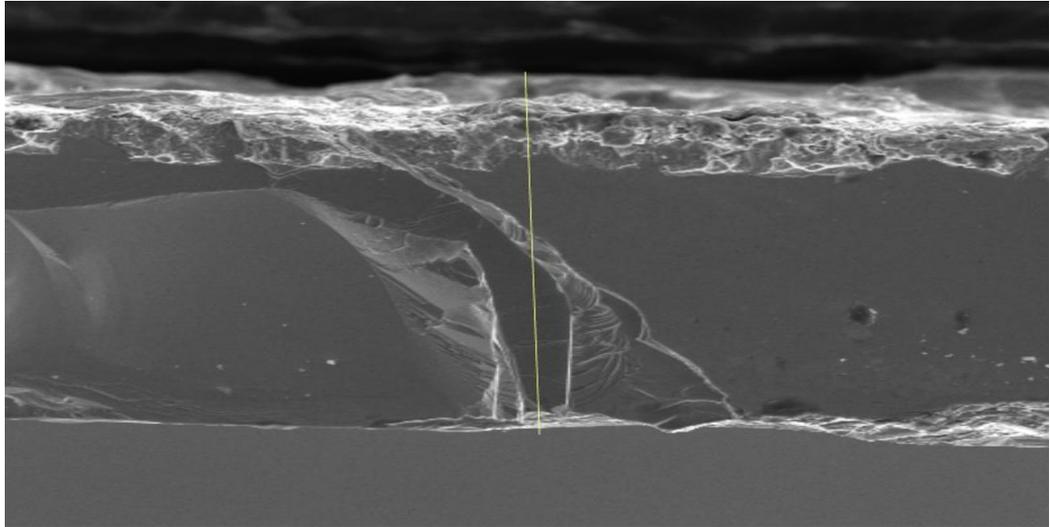


Figure 3.4 : Image MEB en section perpendiculaire de la nanoparticule dans la structure (S0301) suivant une densité volumique de 5.89 g/cm^3 (FUNDAPL-BLIDA.1).

La figure 3.4 représente ainsi un cliché de MEB réalisé sur notre échantillon (S0301) en section perpendiculaire contenant le plan de boîtes quantiques.

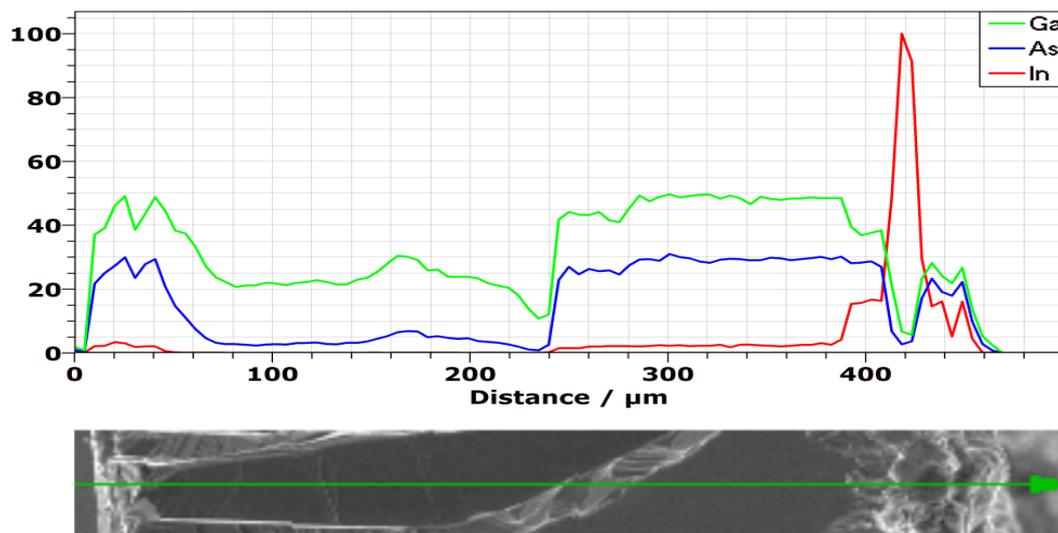


Figure 3. 5: Profil en profondeur à l'intérieur de la couche dans l'échantillon de référence obtenu par EDX suivant une observation perpendiculaire (FUNDAPL-BLIDA.1).

La figure 3.5 montre que les nanoparticules d'indium se situent essentiellement sur une distance d'environ 75 μm [385 μm à 460 μm]. Le maximum de particules d'indium se situe à 420 μm et leur densité diminue en fonction de la profondeur, on remarque qu'il n'y a pas de dépôt d'indium sur la gamme [0 μm , 385 μm].

Ces résultats sont en accord avec les résultats de l'analyse MEB (Figure 3.4) suivant une densité volumique de 5.89 g/cm^3 avec une profondeur de 1.6 μm et un rayon de 0.9 μm .

Nous remarquons, à vue d'œil (Figure 3.6), que le spectre d'analyse EDX de cet échantillon (S0301) contient plus de rayons qu'il en devrait ; cela s'explique ainsi :

- La présence des pics de raie (KA(As), LA(As), KA(Ga), LA(Ga), KA(In), LA(In)).
- Quant à la raie qui s'étend sur la zone énergétique de $E = 1 \text{ keV}$ jusqu'à $E = 1.5 \text{ keV}$, elle correspond à un chevauchement avec les pics de LA(As) et LA(Ga) qui composent le cristal, ce phénomène de fuite peut donc être à l'origine de l'apparition de certaines raies étranges sur le spectre d'analyse d'échantillon ; c'est à dire indiquant à priori la présence non confirmée par le certificat de composition d'un élément chimique dans notre échantillon.

Cette constatation très surprenante est la preuve concrète que cet échantillon a subi une contamination par une matière lors des étapes de sa préparation (le moule de la presse de pastillage de l'échantillon, a peut-être gardé des traces d'un autre échantillon).

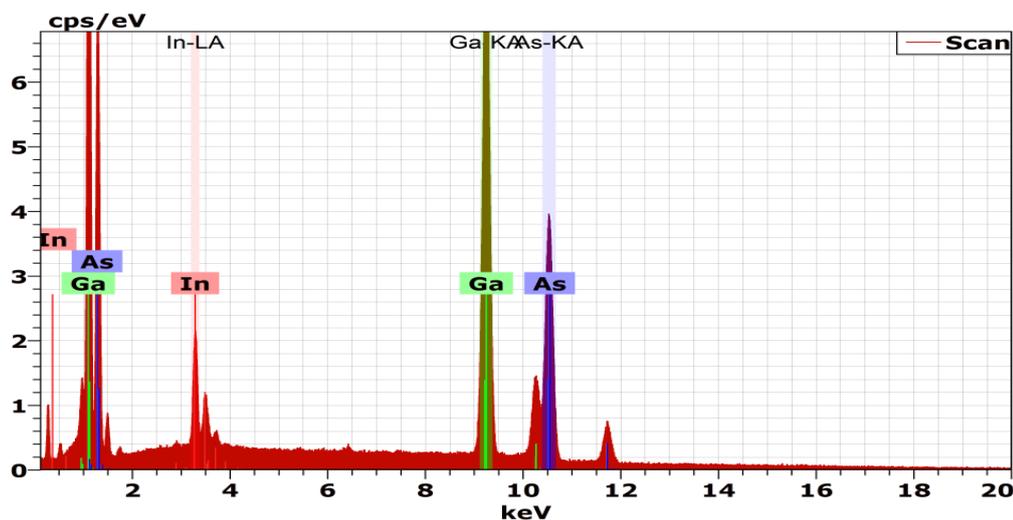


Figure 3. 6: Spectre d'analyse EDX pour différents rayons des nanoparticules de la structure S0301 suivant l'axe perpendiculaire (FUNDAPL-BLIDA.1).

Nous trouvons sur les spectres de la figure 3.6 que les pics de nanoparticule Galium (Ga) sont largement supérieurs à ceux de l'Arsenic (As) et de l'Indium (In), et que l'analyse EDX (Figure 3.6) ainsi que le profil en profondeur à l'intérieur de la couche des boîtes quantiques dans

l'échantillon de référence (figure.3.4) montre que notre structure est décorée par des nanoparticules de Gallium (Ga), d'Indium (In) et d'Arsenic (As) avec différentes quantités sur toute leur longueur étudiée.

3.2.5 Décoration de nanoparticules suivant une observation horizontale

De même que pour la première analyse, nous allons juste faire une étude horizontale sur notre structure (S0301), elle permet de voir distinctement la formation des nanoparticules (Figure3.6).

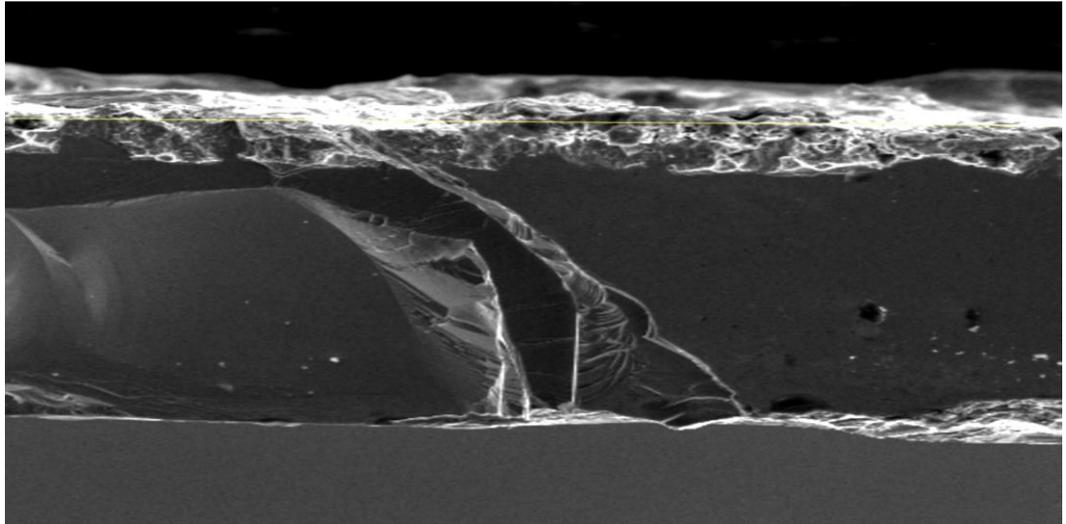


Figure 3. 7: Image MEB en section horizontale de nanoparticules dans la structure S0301 suivant une densité volumique de 6.63 g/cm^3 (FUNDAPL-BLIDA.1).

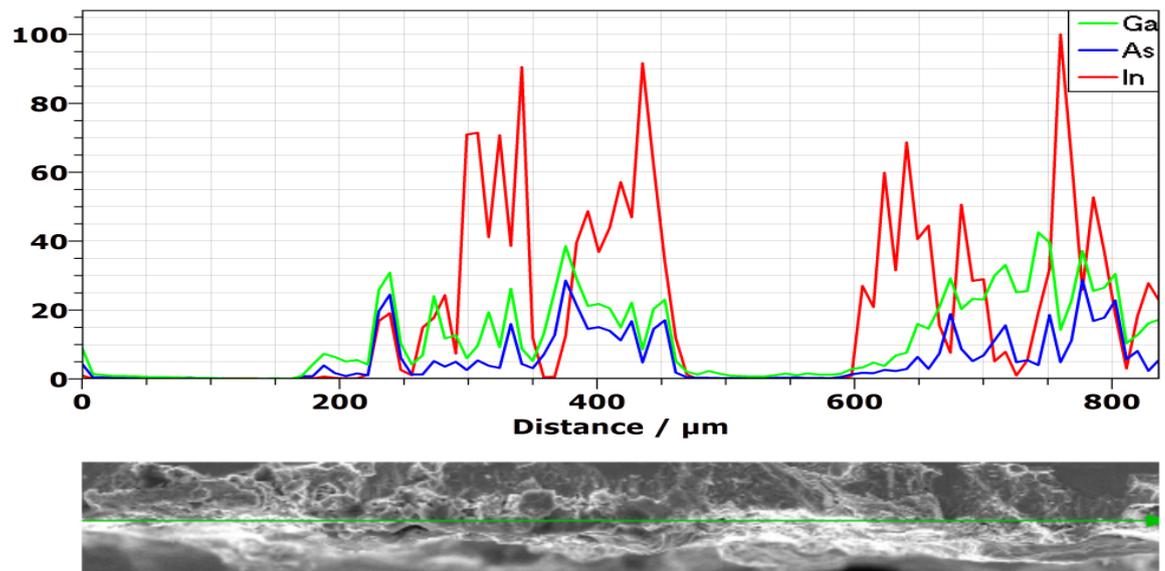


Figure 3. 8: Profil en profondeur à l'intérieur de la couche dans l'échantillon de référence obtenu par EDX suivant une observation horizontale (FUNDAPL-BLIDA.1).

La figure 3.8 donnant le profil en profondeur du dépôt sur la surface montre que la densité maximale d'indium avec le faible dépôt de Galium et d'Arsenic se situent à environ [240 μm à 460 μm] et de [600 μm et 800 μm]. Ces densités chutent de 100% pour la profondeur de [0 μm à 175 μm] et de [470 μm à 600 μm].

Le spectre EDX de la figure 3.9 montre que notre section d'analyse présente un pic important d'In, ce qui laisse présager une grande quantité d'Indium, contrairement aux pics de Galium et d'Arsenic qui ne sont pas très importants, ce qui implique que la densité de galium et d'Arsenic est assez faible, ceci est en accord avec l'analyse cartographique qui donne la distribution des particules sur la surface d'analyse de notre échantillon.

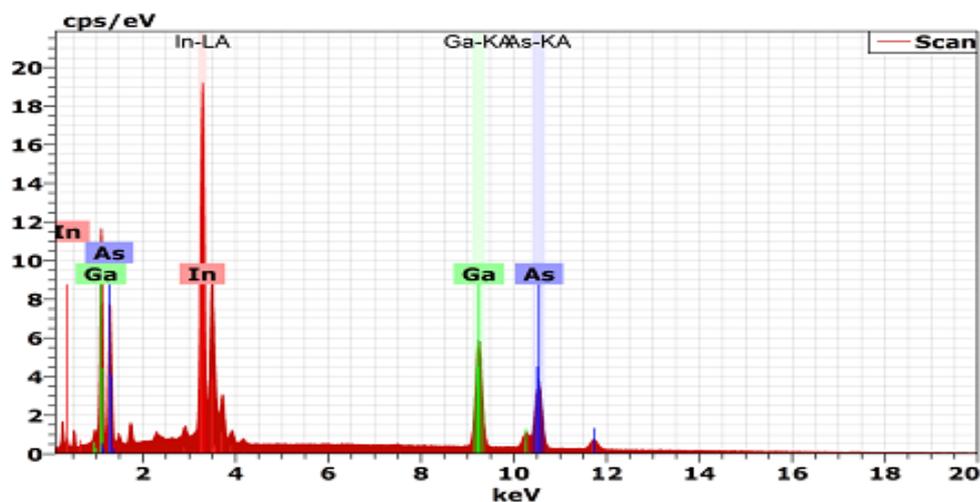


Figure 3. 9: Spectre d'analyse EDX pour différents rayons des nanoparticules de la structure S0301 suivant l'axe Horizontale (FUNDAPL-BLIDA.1).

Aucun autre élément n'apparaît ; cela prouve d'une part que les éléments chimiques utilisés pour le nettoyage sont efficaces et que la méthode choisie pour l'élaboration des boîtes quantiques (Stranski-Krastanov (SK)) est sans aucune contamination.

3.2.6 Analyse cartographique

La figure 3.10 montre l'analyse cartographique EDX des nanoparticules Indium(In), Galium(Ga) et Arsenic(As) sur notre surface d'analyse de la structure S0301 en section horizontale.

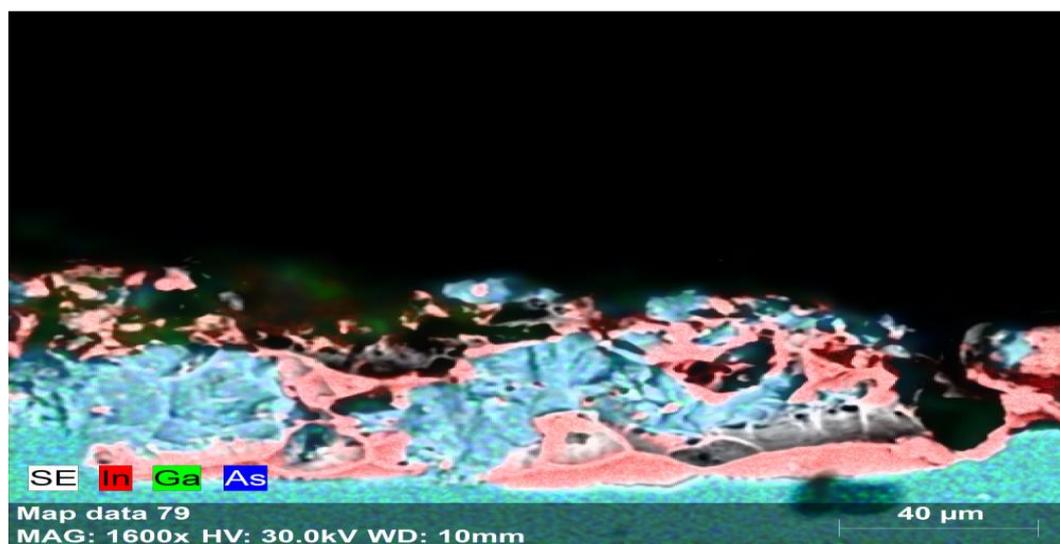


Figure 3.10: Analyse cartographique EDX des nanoparticules Indium(In), Gallium(Ga) et Arsenic(As) sur notre surface d'analyse de la structure S0301 en (section horizontale) (FUNDAPL-BLIDA.1).

Le code des couleurs est tel que le rouge correspond à l'Indium avec une large densité sur notre surface d'analyse de la structure S0301 en (section horizontale), la couleur verte correspond à la zone où le Gallium existe et la couleur bleue correspond à la zone où l'Arsenic domine. On remarque que cette série est non-uniforme en densité : 46.53 % de tous points de la surface émet à l'Indium, 34.89 % émet à l'Arsenic et le reste émet au Gallium avec une basse quantité de 18.58%.

Cela confirme les résultats de l'analyse MEB (figure 3.7) et que la cartographie EDX de figure 3.10 montre que le dépôt d'Indium a essentiellement un lien sur la partie horizontale de notre structure S0301.

3.3 Transitions optiques dans les boîtes quantiques

3.3.1 L'objectif de ce travail

Il existe plusieurs façons de réaliser des boîtes quantiques, parmi ces techniques, on peut citer la méthode dite de Stranski-Krastanov, qui est celle que nous avons utilisée pour la croissance des boîtes quantiques[114]. Un point important est que ce procédé de croissance conduit à la formation d'une couche d'InAs bidimensionnelle reposant en dessus des îlots appelés "couche de mouillage", et se comportant comme un réservoir d'électrons [115-117]. Les nanostructures InAs

peuvent présenter un potentiel de confinement électronique en combinaison avec de nombreux semi-conducteurs III-V comme le GaAs. Dans ces nano-structures, les porteurs de charge sont suffisamment contenus pour permettre la quantification des niveaux du système d'énergie [118]. L'objectif de ce travail consiste à faire croître une hétéro structure à partir de deux matériaux semi-conducteurs (InAs/GaAs) [119].

Nous ferons des calculs sur « COMSOL » avec chacune des géométries (rectangulaire, sphérique, conique) à la même hauteur et avec le même rayon. Pour mieux comprendre l'évolution de l'énergie, nous faisons varier l'un des paramètres de la fonction (53). Les valeurs des niveaux d'énergies obtenues seront énumérées dans le tableau 3.1

3.3.2 Méthode

Le modèle théorique que nous avons utilisé pour déterminer les fonctions d'ondes et les énergies propres des électrons et des trous passe par la résolution de l'équation de Schrödinger [115,116]

$$E \Psi = H \Psi \quad (51)$$

$$i \frac{\hbar}{2\pi} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H \Psi \quad (52)$$

L'équation (52) peut être réduite à une équation de Schrödinger stationnaire. Lors de la résolution de l'équation de Schrödinger stationnaire on considèrera l'atome comme un système à une particule [120]:

$$-\nabla \cdot \left(\frac{\hbar^2}{8m^* \pi^2} \nabla \Psi \right) + V \Psi = E \Psi \quad (53)$$

Les paramètres de l'équation sont:

\hbar : ($6.626 \cdot 10^{-34}$ Js) est la constante de Planck.

m^* : est la masse réduite.

V : est l'énergie potentielle.

E : est la valeur propre de l'énergie inconnue.

Ψ : est la fonction d'onde de la mécanique quantique .

Il reste à résoudre l'équation (53), qu'on va réécrire comme:

$$\nabla (-c \nabla - \alpha + \gamma) + \alpha + \beta \nabla = d_a \lambda \quad (54)$$

d_a : est un coefficient d'amortissement.

c : est le coefficient de diffusion.

α : est le coefficient de convection de flux conservateur.

β : est le coefficient de convection.

a : est le coefficient d'absorption.

γ : est le terme de source de flux conservateur.

Les coefficients non nuls sont:

$$\begin{aligned} c &= \hbar^2 / (8\pi^2 m_e) & a &= [\hbar^2 / (8\pi^2 m_e)] l^2 / r^2 + V & \beta_r &= - \hbar^2 / (8\pi^2 m_e) 1 / r \\ d_a &= 1 & \lambda &= E1 \end{aligned} \quad (55)$$

Nous pouvons modéliser la structure globale en 2D comme la montre la figure 2.10 ci-dessus.

Ensuite nous présenterons les résultats obtenus de l'estimation numérique utilisée tout en interprétant ces résultats lors de la modification de quelques paramètres tels que le rayon , la hauteur de la boîte et l'épaisseur de la couche de mouillage. En effet, les solutions de l'équation (53) pour le cas $l = 0$, sont les énergies de transition illustrées dans les figures (3.15, 3.16, 3.17)

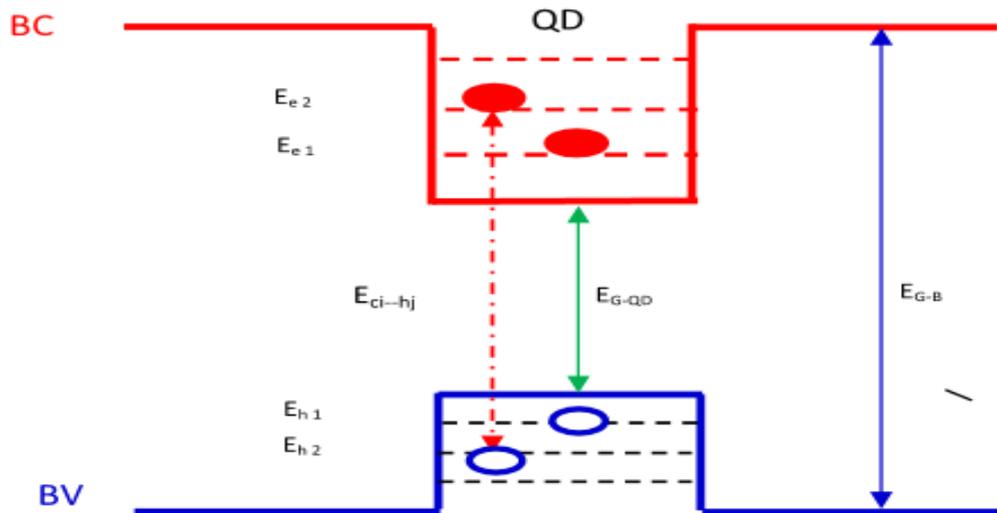


Figure 3. 11: Le principe de l'illustration de la structure de bande pour l'auto-organisation des boîtes quantiques.

La transition énergétique électron- trou lourd s'écrit:

$$\Delta E_{e-hh} = E_e + E_{hh} + E_g(\text{InAs}) \quad (56)$$

Où :

E_e : est l'énergie de quantification des électrons

E_h : est l'énergie de quantification des trous

E_g : est la largeur de bande interdite.

On utilise l'électronvolt comme unité d'énergie et le nanomètre comme unité de longueur de la géométrie.

3.3.3 Résultats et discussions

3.3.3.1 Les états électroniques d'un point quantique d'InAs avec chacun des types de géométrie

Nous commençons en étudiant une conception de la géométrie pour avoir une meilleure idée de la façon dont l'énergie indique les changements que l'on fait varier l'un des paramètres de boîte quantique.

La première étape que nous choisissons est la réalisation de trois différentes structures géométriques présentées sur les figures (3.12, 3.13, 3.14) Nous faisons des calculs « COMSOL » avec chacun des types de géométrie avec les mêmes dimensions [hauteur ($h = 3.6$ nm), rayon ($R = 7$ nm), épaisseur de la couche de mouillage ($w = 2$ nm)].

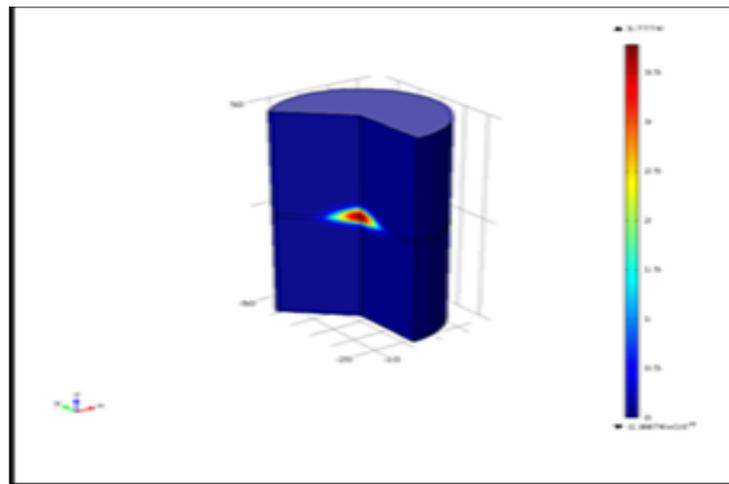


Figure 3. 12: Les valeurs de l'énergie pour la structure conique ($E = 1.05$ eV)

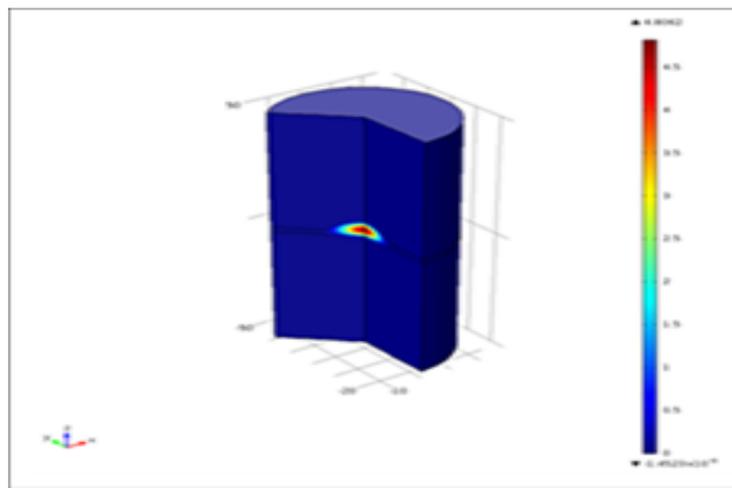


Figure 3. 13: Les valeurs de l'énergie pour la structure elliptique ($E = 0,95$ eV).

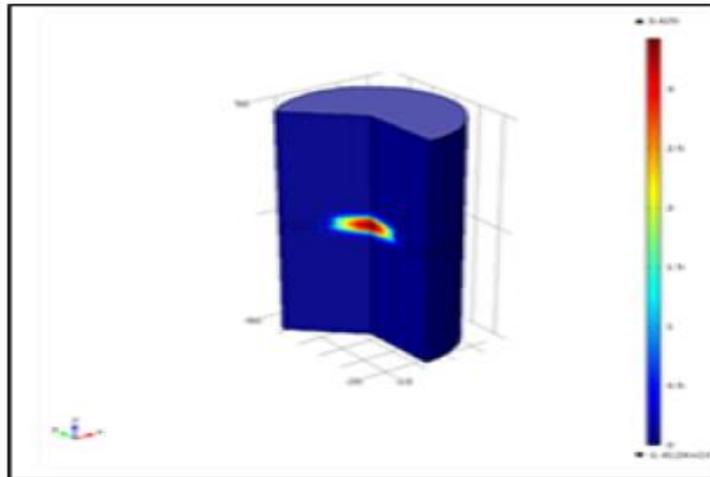


Figure 3. 14: Les valeurs de l'énergie pour la structure rectangulaire ($E = 0,91$ eV).

Les niveaux d'énergies sont énumérés dans le tableau 3.1 et nous voyons que le plus haut des états d'énergies est obtenu pour la boîte quantique conique, on constate que l'énergie est inversement proportionnelle à la taille des boîtes quantiques.

Tableau 3. 2: Les niveaux d'énergies pour chaque géométrie dans l'état fondamental E_0 .

Type de géométrie	E_0 (eV)
Conique	1.05
Elliptique	0.95
Rectangulaire	0.91

3.3.3.1 Variations des paramètres de la boîte quantique

Les résultats mentionnés ci-dessus sont obtenus pour la taille de boîte quantique la plus courante, nous allons faire une meilleure évaluation de cette taille et avec des restrictions physiques raisonnables. A cet effet, nous choisissons la forme conique, en se basant sur la figure 3.12.

Dans notre calcul nous faisons les variations de quelques paramètres, le rayon de la boîte (entre : 50 Å et 250 Å) (figure 3.15), l'épaisseur de la boîte (entre : 0.2 nm et 3 nm) (Figure 3.16) et l'épaisseur de la couche de mouillage (entre : 0.2 nm et 2.5 nm), (figure 3.17).

Pour avoir plus d'informations sur l'effet de confinement des boîtes quantiques, le diamètre minimal (D_{\min}) dans le cas des boîtes quantiques InAs/GaAs sera déduit de la relation suivante [172] :

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e^*} D_{\min}^2 < \Delta E_c \quad (57)$$

Avec : E : l'énergie de l'état fondamental.

m_e^* : la masse effective de l'électron dans la boîte quantique.

ΔE_c : le potentiel de confinement (qui est défini par la discontinuité de la bande de conduction pour une hétérostructure).

Dans le cas des boîtes quantiques InAs/GaAs, le diamètre minimal est trouvé de l'ordre de 5 nm, donc il apparaît nécessaire de fabriquer des boîtes quantiques de dimensions supérieures à D_{\min} pour assurer un bon fonctionnement des composants à la température ambiante [172].

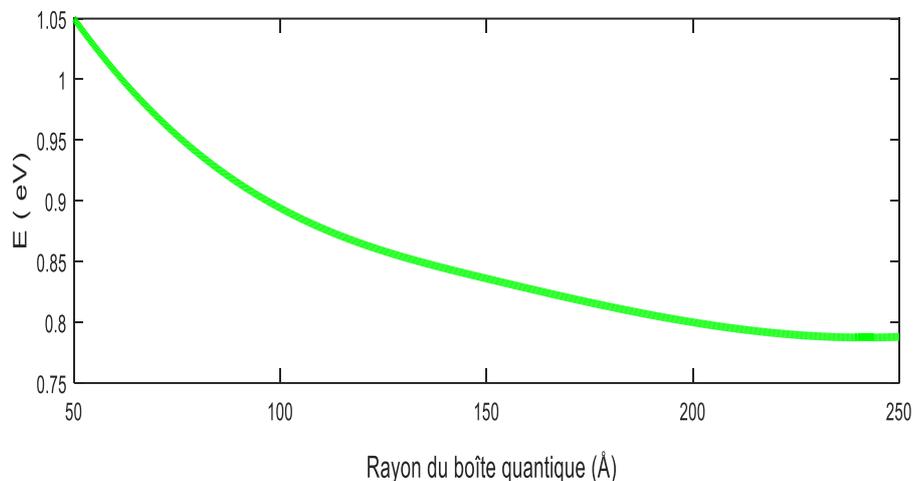


Figure 3. 15: Les valeurs de l'énergie pour les changements dans le rayon de la boîte quantique.

La figure 3.15 montre l'effet du rayon de la boîte quantique sur l'énergie de transition optique dans la géométrie d'InAs/GaAs. On remarque que l'énergie de transition diminue avec l'augmentation de rayon d'une boîte quantique pour un changement de 50 Å à 200 Å, qui représente un grand décalage pour l'énergie de transition de l'ordre de 1.05 eV jusqu'à 0.78 eV.

Ce qui nous a motivé à caractériser et étudier l'inhomogénéité de la barrière de potentiel dans ces structures.

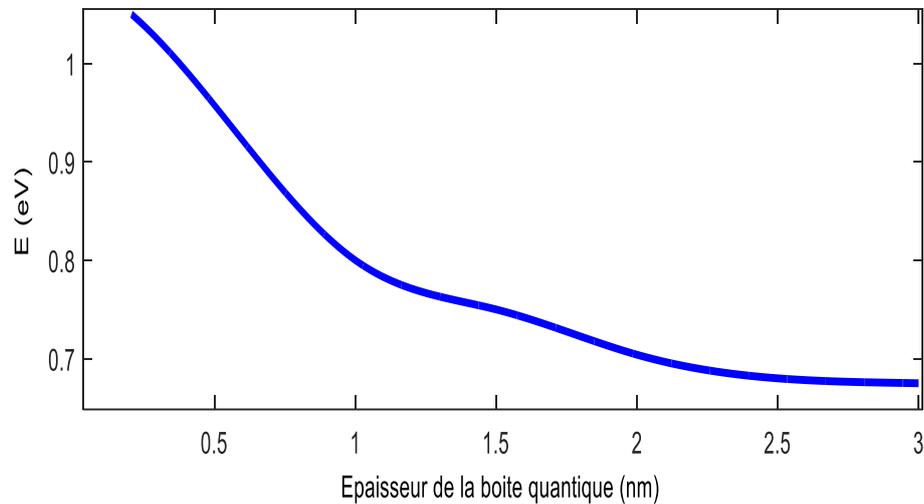


Figure 3. 16: Les valeurs de l'énergie pour les changements dans l'épaisseur de la boîte quantique.

Sur la figure 3.16, nous avons représenté l'effet de l'épaisseur de la boîte quantique sur l'énergie de transition. En effet, la variation de l'épaisseur de la boîte quantique de 0.2nm à 3nm a permis une dégradation de l'énergie de transition de 1.05 eV à 0.9eV , alors que la valeur d'épaisseur de la boîte quantique a donné lieu à une structure ayant de très bonnes qualités optiques et structurales.

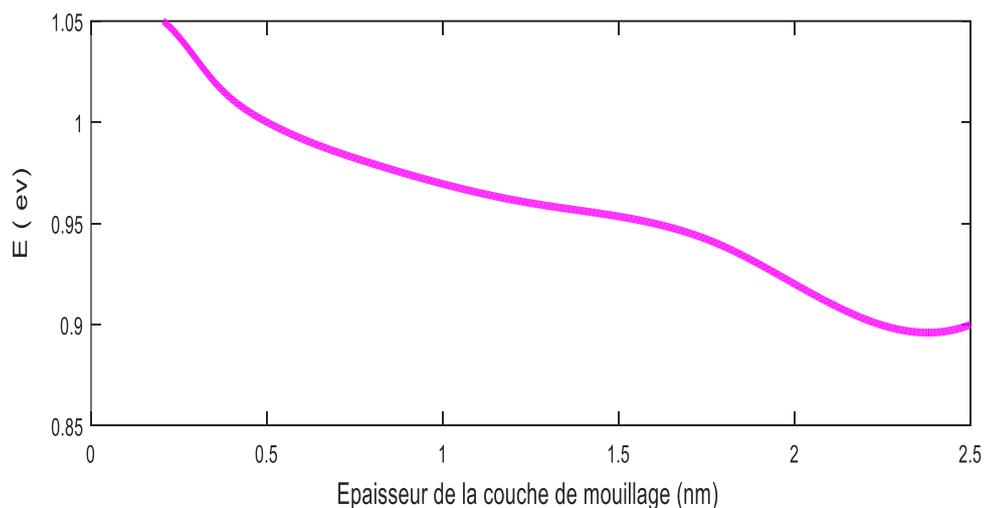


Figure 3. 17: La variation de l'énergie de transition en fonction de l'épaisseur de la couche de mouillage.

La figure 3.17 représente l'évolution de l'énergie de transition en fonction de l'épaisseur de la couche de mouillage entre 0.2nm et 2.5nm. On remarque que tant que l'épaisseur de la couche de mouillage augmente, l'énergie de transition optique diminue.

On a plus d'informations sur cette couche bidimensionnelle, dans laquelle se trouvent les boîtes quantiques et qui se comporte comme un puits quantique. La couche de mouillage ne croît pas de façon homogène, il peut apparaître des terrasses ou défauts [121] qui peuvent se comporter comme des boîtes quantiques plus plates avec des énergies de confinement variant d'une monocouche à plusieurs monocouches.

En effet, lors du dépôt d'InAs sur du GaAs, une couche bidimensionnelle (2D) d'InAs se forme. Cette couche, en accord paramétrique avec le substrat, est appelée couche de mouillage «CM » [122]. le pourcentage de contamination de (%Ga) dans la couche bidimensionnelle (2D) va créer un écart de bande plus large entre la bande de conduction et la bande de valence, ceci donne une naissance pour le premier état excité (cette énergie de confinement est en général supérieure à l'énergie de la boîte quantique),(Voir figure 2. 17).

Donc il y a un décalage de l'énergie des transitions vers des énergies plus élevées, la variation d'énergie de confinement réduit la taille des structures [123,124].

Nous avons obtenu les résultats représentés sur les figures (3.15 à 3.17) qui correspondent respectivement aux niveaux de l'énergie de transition optique. L'analyse de ces figures montre que la transition énergétique dépend fortement de la taille de la boîte. En effet, ces énergies sont inversement proportionnelles aux dimensions de la boîte et à l'épaisseur de la couche de mouillage.

3.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons commencé à faire l'étude de la caractérisation morphologique et microstructurale d'un échantillon S0301 suivant deux observations latérales : perpendiculaire et horizontale en utilisant des analyses qualitatives et quantitatives.

Dans la deuxième partie, nous avons fait des calculs « COMSOL » avec chacune des géométries. Nous avons calculé les valeurs de l'énergie en fonction de chacun des paramètres : largeur, longueur et épaisseur de la couche de mouillage où les autres paramètres sont maintenus constants. Nous avons trouvé que lorsqu'on réduit la taille des structures, on observe un décalage de l'énergie de transition vers les plus hautes énergies et ceci est dû à la variation de l'énergie de

confinement. Les modifications de l'énergie associée au niveau fondamental ont été attribuées à un changement de la forme des boîtes quantiques.

Cet effet a été clairement confirmé pour des nanocristaux elliptiques, coniques et rectangulaire d'InAs de très petite taille. Les résultats ont été obtenus en étudiant une boîte quantique unique par le logiciel COMSOL.

CHAPITRE 4

MODELISATION ET SIMULATION DE BOITE QUANTIQUE POUR LES APPLICATIONS DE CELLULES SOLAIRES

4.1 Introduction

Comme nous avons montré dans les chapitres précédents, les propriétés exceptionnelles des boîtes quantiques (BQs) sont d'un grand intérêt dans le domaine de l'optoélectronique. L'objectif de ce chapitre est de montrer l'impact des boîtes quantiques (BQs) pour les applications photovoltaïques.

Dans cette partie, notre étude se situe dans le cadre des efforts généraux pour parvenir à une croissance optimale d'une double hétérostructure en utilisant deux matériaux semi-conducteurs de InAs et GaAs. Nous rapportons une analyse complète, mais non exhaustive des états électroniques basé sur la croissance des couches de boîtes quantiques sur un substrat de GaAs. Des modélisations et des simulations ont été réalisées afin de parvenir à des calculs sur les deux géométries de boîtes quantiques existants (rectangulaires et elliptiques) en vue de l'amélioration de rendement d'une cellule solaire à base des boîtes quantiques.

4.2 L'influence de l'incorporation de matériaux à l'échelle nanométrique (boîtes quantiques) dans une cellule photovoltaïque

Il a été démontré que l'efficacité des cellules solaires peut être améliorée par l'incorporation de matériaux nanostructurés en raison des propriétés de ces matériaux à l'échelle nanométrique.

Au cours des dernières années, le processus de fournir ces matériaux a été fructueux. Aujourd'hui, il est possible de produire des boîtes quantiques de bonne qualité, avec une forme bien définie.

Il est en effet rationnel et même indispensable d'étudier leurs propriétés en vue d'optimiser les paramètres de composition. La mise en œuvre de ces matériaux dans des dispositifs optoélectroniques existants et le développement de nouvelles applications ont été également envisagés [125-127].

Nous pouvons souligner l'importance des boîtes quantiques dans le domaine de l'optoélectronique. Il vaut la peine de rappeler ici par exemple que la densité quantique du système In (Ga) As / GaAs a atteint une valeur d'environ 10^{10}cm^{-2} [128].

Notre étude est une modeste contribution à la compréhension de la synthèse d'optimisation des propriétés structurales et optiques des boîtes quantiques pour le système photovoltaïques (PV). Le choix de la structure InAs / GaAs réside dans les propriétés spécifiques qu'elle présente, le plan unique (2D monocouche) de InAs cultivées sur GaAs est largement étudié et représente aujourd'hui une référence dans le domaine typique de PV. D'autres investigations sont nécessaires pour fournir des indices à d'autres systèmes.

Ce travail peut être considéré comme une contribution déployée dans le domaine de la micro-électronique, il est basé sur le contrôle et l'analyse à l'échelle nanométrique. Pour améliorer la performance des cellules solaires, nous avons incorporé des boîtes quantiques au sein de la couche active.

De nombreuses approches ont été proposées, pour incorporer les principes de base de cellules intermédiaires de la bande solaire y compris le nombre de boîtes quantiques $n_{(BQ_s)}$ [129,130]. L'InAs/GaAs (boîte quantique) a émergé comme un système prometteur pour la mise en œuvre du concept de cellules solaires de la bande intermédiaire (IBSC).

Les (IBSC)_s promettent d'être une technologie photovoltaïque de troisième génération. Elle emploie une bande d'états d'électrons au sein de l'énergie de la bande interdite pour créer la transition optique supplémentaire afin de fournir une plus grande efficacité de conversion [131]. Nous sommes en mesure de croître sans dislocations jusqu'à 50 BQ_s dans la région intrinsèque d'une cellule solaire de type (p-i-n).

4.3 Approche de la théorie

Afin d'améliorer notre compréhension des phénomènes physiques qui peuvent survenir dans une BQ, il a été nécessaire de connaître leur structure interne (figure.4.1).

Il est indispensable d'élaborer des modèles aussi près que possible de la réalité physique afin de déterminer des transitions optiques observables. En effet, il n'y a aucune structure de bande électronique de matériaux de confinement en trois dimensions. Seuls les niveaux d'énergie discrets sont possibles pour ces matériaux en raison de l'état d'énergie discrète.

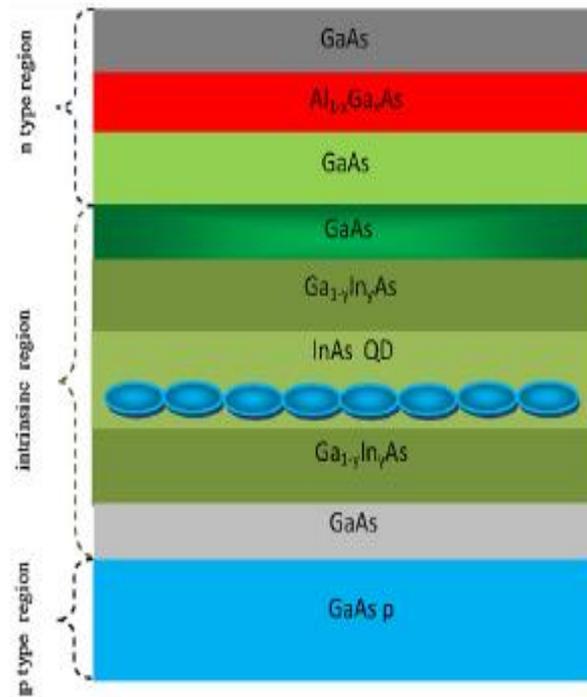


Figure 4. 1: Structure d'une cellule solaire avec des boites quantiques (InAs / GaAs) [138].

Les calculs précédents ont montré qu'en dépit de la diversité des résultats obtenus avec différents modèles basés sur les boites quantiques, il n'y a que les systèmes ayant une taille supérieure à 10 nm qui ont beaucoup d'états électroniques confinés et qui participent forcément aux états excités [133, 134]. Alors pour les systèmes étudiés InAs / GaAs, les règles de sélection fortes existent par la recombinaison électron-trou dans les BQs [135]. L'énergie de transition utilisée dans ce travail est donné par la relation (56).

4.4 Le coefficient d'absorption

Le coefficient d'absorption $\alpha(E)$, pour une énergie de photons (E) supérieure à l'énergie de la bande interdite (E_g), est donné par l'équation (58) [136,137] :

$$\alpha(E) = \alpha_0 \frac{\sqrt{E-E_g}}{E} \quad (58)$$

où, α_0 est une constante et E_g est la valeur d'énergie de la bande interdite.

Les électrons dans la bande de trous lourds et de trous légers absorberont l'énergie de la lumière incidente sur la structure puis passeront de la bande de valence à la bande de conduction.

Ces transitions d'énergie induisent deux coefficients d'absorption α_{e-hh} et α_{e-lh} .

$$\alpha_{\text{total}} = \alpha_{c_hh} + \alpha_{c_lh} \quad (59)$$

Où α_{c_hh} et α_{c_lh} sont les coefficients d'absorption des trous lourds et trous légers à bande de conduction et qui sont respectivement, donnés par [138]:

$$\alpha (E)_{e_hh} = \alpha_0 \frac{m_{rhh}^{\frac{3}{2}} \sqrt{E-E_{tr}}}{E q} \quad (60)$$

$$\alpha (E)_{e_lh} = \alpha_0 \frac{m_{rlh}^{\frac{3}{2}} \sqrt{E-E_{tr}}}{E q} \quad (61)$$

où $\alpha_0 = 2,2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$, $q = 1,6 \times 10^{-19} \text{ C}$.

Avec E l'énergie du photon incident et $m_r (hh, lh) = m_e m (hh, lh) / (m_e + m (hh, lh))$ est la masse réduite des trous lourds et trous légers, m_e , m_{hh} et m_{lh} sont respectivement les masses effectives des électrons, des trous lourds et des trous légers, ces masses peuvent être déterminées par interpolation linéaire [139].

4.5 Résultats et discussion

En premier lieu, nous avons réalisé les calculs de l'énergie de transition électronique en fonction du rayon de la boîte quantique (Figure 4.3) pour chaque type de géométrie ; rectangulaire et elliptique (Figure 4.2 (a et b)).

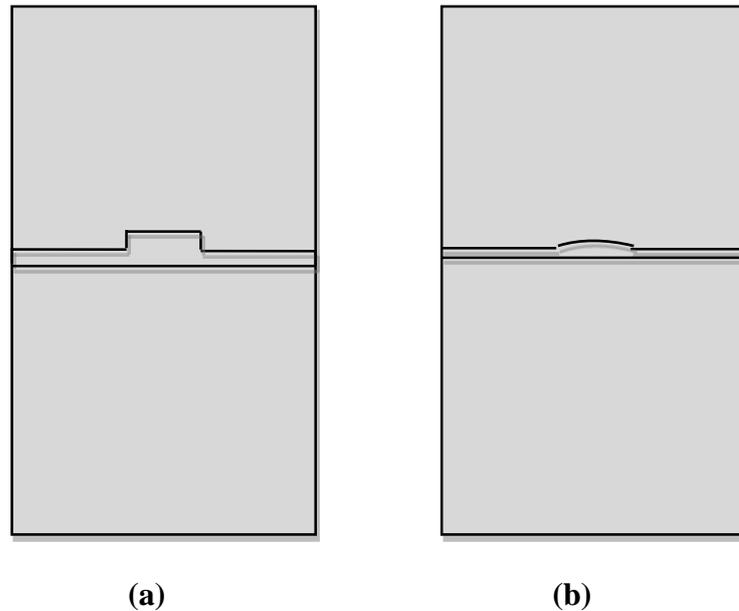


Figure 4. 2: La forme rectangulaire (a) et elliptique (b).

Nous avons ensuite effectué des simulations pour des rayons des boîtes variant entre 30Å et 100Å.

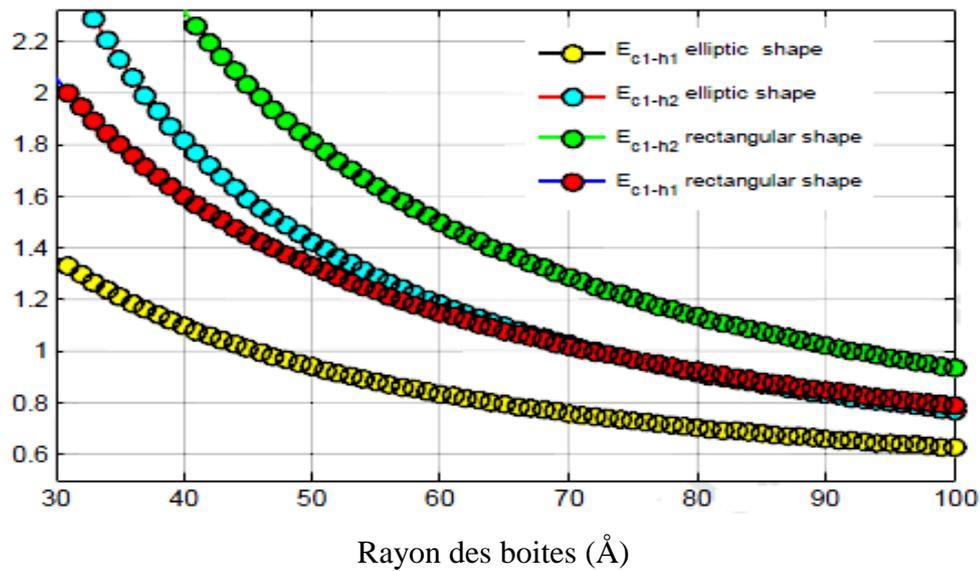


Figure 4. 3: La Variation de l'énergie de transition en fonction du rayon des boîtes quantiques (InAs/GaAs) pour les deux formes rectangulaire et elliptique [132].

La figure 4.3 illustre les résultats de la géométrie elliptique et rectangulaire. Nous pouvons voir que la variation de l'énergie de transition électronique de niveau E_{h1} au niveau E_{c1} (noté E_{c1-h1}) et du niveau E_{h2} au niveau E_{c1} (noté E_{c1-h2}) diminue tandis que le rayon des BQs augmente.

Toutefois, nous notons que la première courbe montre systématiquement une valeur inférieure à la seconde pour une valeur de rayon des BQs donnée.

Nous pouvons voir le même comportement dans le cas de la géométrie elliptique, les courbes des transitions d'énergies électroniques de E_{c1-h1} et E_{c1-h2} diminuent quand les rayons des boîtes quantiques augmentent.

Nous notons également que la première courbe montre systématiquement une valeur inférieure à la seconde pour un rayon de BQ donné. Les niveaux d'énergie sont indiqués dans le tableau 4.1 pour différentes valeurs de rayon des BQs.

En résumé pour la première partie, ces chiffres (Tableau 4.1) nous permettent d'observer un changement de l'inter-niveau d'énergie de transition lorsque les BQs sont plus grandes. Ainsi, l'analyse des motifs ci-dessus montre que les énergies de transition dépendent fortement de la taille de la BQ.

Tableau 4. 1: Transition des niveaux d'énergies pour différentes valeurs de rayon des boites quantiques [132] .

		Rayons (Å)	35	45	55	65	75	85	95
Energie (eV)	Rectangulaire	V ₁ -C ₁	1.21	1.00	0.88	0.79	0.72	0.68	0.64
		V ₂ -C ₂	2.12	1.59	1.28	1.09	0.96	0.87	0.79
	Elliptique	V ₁ -C ₁	1.97	1.44	1.22	1.07	0.96	0.88	0.81
		V ₂ -C ₂	2.71	2.03	1.63	1.38	1.20	0.97	0.97

En fait, ces énergies sont inversement proportionnelles à la taille des points quantiques. La diminution observée est due à la variation de l'énergie de confinement [140-142].

En outre, la différence d'énergie entre les raies spectrales diminue lorsque le diamètre de la boîte quantique augmente.

Ces observations confirment l'effet du confinement quantique prévu pour cette structure avec la variation du rayon c.a.d du volume, les boites quantiques permettent alors de modifier leur corollaire électronique et devraient affecter les propriétés optiques. L'énergie de transition pour le cas elliptique présente un changement important par rapport à la forme rectangulaire.

L'énergie de transition entre les niveaux de porteurs d'électrons et de trous diminue avec l'augmentation du rayon de la BQ. Nous constatons que l'énergie de transition pour la forme rectangulaire est plus petite que l'énergie de transition dans le cas où la forme est elliptique.

Pour les applications photovoltaïques, il est nécessaire que les énergies de transitions soient inférieures à l'énergie du photon $h\nu$.

En conclusion, les structures elliptiques de BQs sont plus fiables pour les applications photovoltaïques et optoélectronique.

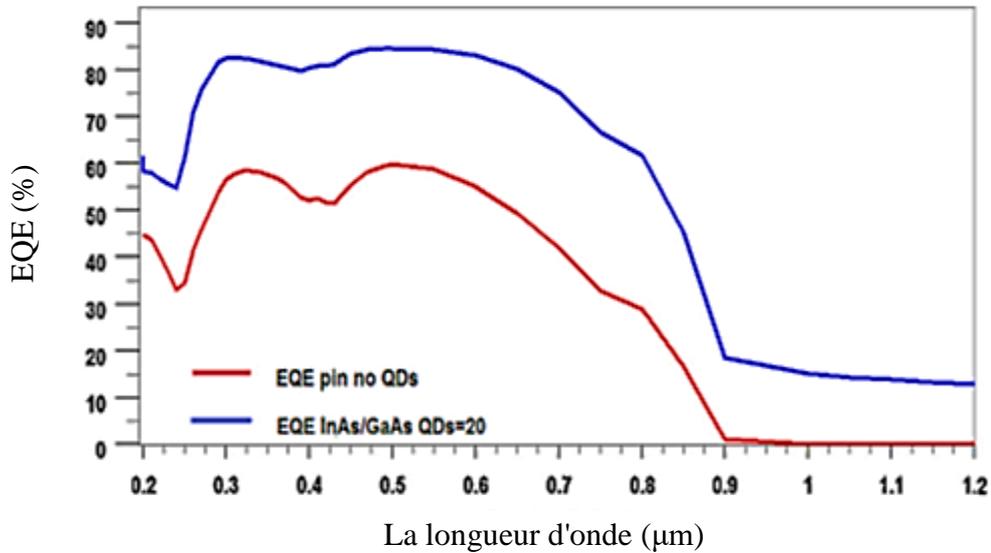


Figure 4. 4: Variation de EQE en fonction de la longueur d'onde d'une structure PIN et d'une autre structure à certain nombre ($n = 20$) de boîtes quantiques [132].

La figure 4.4 illustre les changements dans EQE en fonction de la longueur d'onde. Pour la structure PIN, il a été constaté que le maximum de EQE ne dépasse pas 60% pour une longueur d'onde $\lambda = 0,55\mu\text{m}$. Mais si nous employons une structure de 20 BQs ($n = 20$) à l'intérieur de la structure dans les mêmes extensions de la longueur d'onde, l'EQE atteint 88%. Par conséquent, avec une structure de BQ, l'EQE augmente de 60% à 88%.

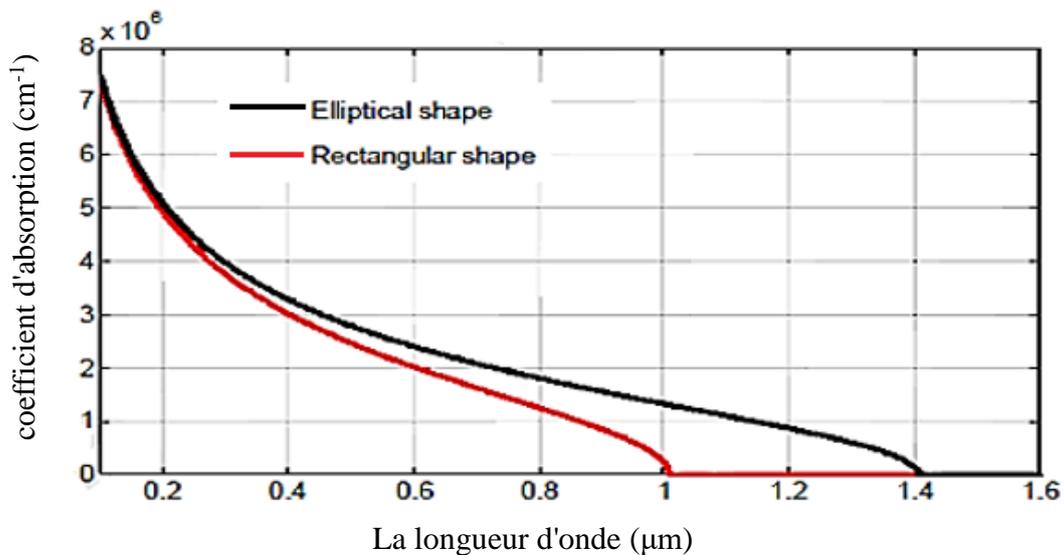


Figure 4. 5: La Variation du coefficient d'absorption en fonction de la longueur d'onde des formes rectangulaire et elliptique[132].

La figure 4.5 montre la variation du coefficient d'absorption en fonction de la longueur d'onde d'une structure à base des boites quantiques InAs / GaAs, en utilisant à les fois des formes rectangulaires ou elliptiques.

Nous notons que le coefficient d'absorption $\alpha(E)$ diminue avec l'augmentation de la longueur d'onde. Toutefois, il reste plus important pour la forme elliptique (R_{ellip}) que pour la forme rectangulaire (R_{rectang}) en particulier, dans la gamme de 0,2-1,4 μm .

Par exemple, pour une longueur d'onde de 0.8 μm , le coefficient d'absorption de la forme rectangulaire $R_{\text{rectang}} = 1,24 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$ contre $1,78 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$ pour le R_{ellip} . Par conséquent, nous avons une augmentation de $\Delta R = 0,54 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$.

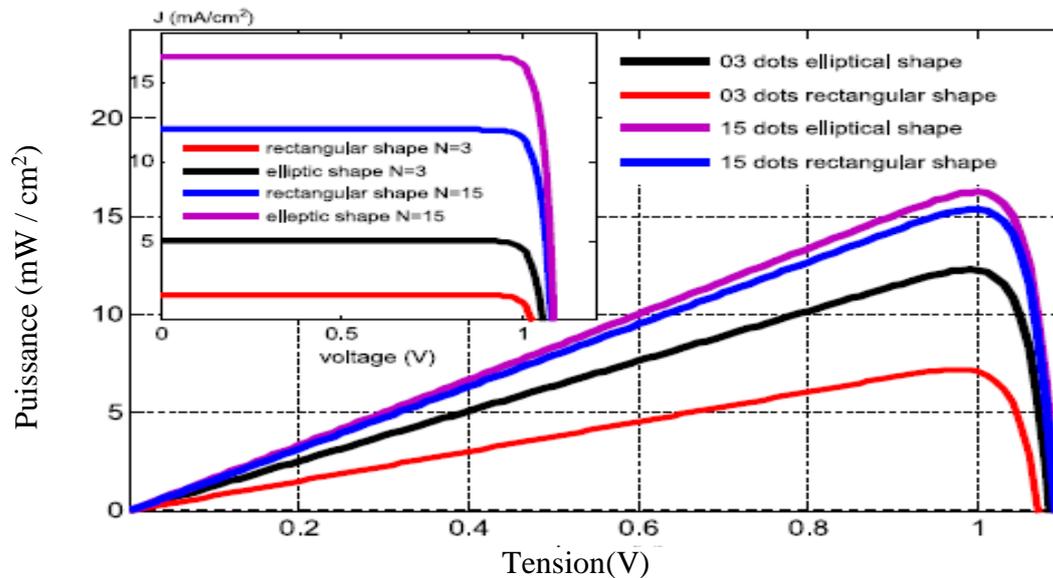


Figure 4. 6: La Variation de la puissance en fonction de la tension pour différentes nombres de boite quantiques pour des formes rectangulaires et elliptiques [132].

La figure4.6 montre l'évolution de la puissance d'une structure de BQ pour les deux formes rectangulaire et elliptique. Il est à noter que, lorsque le nombre de boites quantiques augmente, la puissance maximale croit pour les deux formes. A titre d'exemple, pour trois boites rectangulaires, la puissance maximale ($P_{\text{max-rect}}$) est égale à 7,20 mW / cm^2 ; pour une structure avec 15 boites, la puissance maximale est de 15,36 mW / cm^2 . Il y a une augmentation $\Delta P_{\text{max-rect}} = 8.16 \text{mW} / \text{cm}^2$.

La puissance maximale de la structure de boite quantique de forme elliptique ($P_{\text{max-ellip}}$) est plus élevée par rapport à ($P_{\text{max-rect}}$). Par exemple, si nous prenons $n = 3$ pour la structure elliptique,

$P_{\max\text{-ellp}} = 12,28 \text{ mW} / \text{cm}^2$, donc, par rapport à une structure de boîtes quantiques ($n = 3$, en forme rectangulaire), il y a une augmentation de: $\Delta P_{\max} = P_{\max\text{-ellp}} - P_{\max\text{-rect}} = 5,08 \text{ mW} / \text{cm}^2$.

Nous avons remarqué aussi que lorsque le nombre de (BQs) est supérieur à 15, la puissance devient saturée. Nous avons également noté des augmentations de J_{cc} avec l'augmentation du nombre de boîtes quantiques. Par contre l'effet du nombre de boîtes quantiques sur le V_{co} est négligeable.

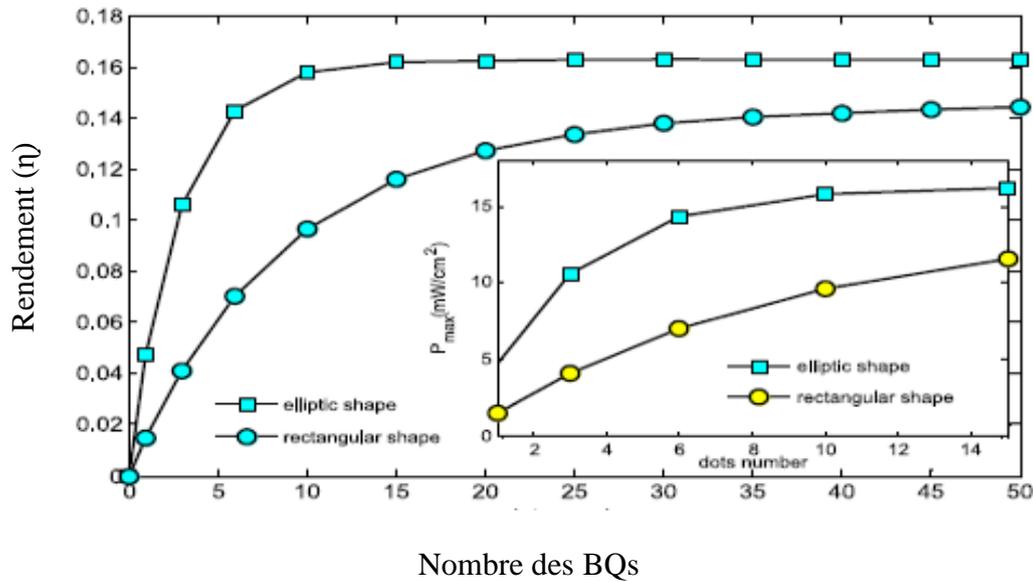


Figure 4. 7: La variation du rendement de la structure en fonction du nombre de boîtes quantiques pour les deux formes rectangulaire et elliptique[132].

La figure4.7 montre la variation de rendement d'une structure photovoltaïque en fonction du nombre des boîtes quantiques pour les deux formes rectangulaires et elliptiques. Il est à noter que si le nombre de boîtes augmente le rendement de la structure augmente rapidement. Mais à partir de $n = 20$ la performance commence à saturer pour la structure elliptique. Le rendement de la structure rectangulaire atteint un maximum lorsque le nombre de boîtes quantiques est égal à 50. On a également constaté que le rendement de la structure elliptique est plus efficace que la structure rectangulaire.

Cependant, le rendement atteint un maximum pour la structure rectangulaire pour le nombre de boîtes quantiques égal à 15.

4.5 Conclusion

Dans ce chapitre, l'étude des propriétés (structurales / optiques) des boîtes quantiques InAs cultivées sur un substrat de GaAs a révélé de nombreuses différences pour les différentes géométries considérées. Nous avons observé un changement de l'énergie de transition électronique et du coefficient d'absorption à des énergies plus élevées. Ces paramètres sont en effet importants pour la détermination du nombre de photons absorbés et donc des supports produits. Nous avons montré dans cette étude que l'amélioration de rendement de cette cellule solaire a été obtenue par l'incorporation des boîtes quantiques.

CHAPITRE 5

ETUDE DES PROPRIETES ELECTRIQUES DES CELLULES SOLAIRES A BASE DE BOITES QUANTIQUES D'InAs

5.1 Introduction

La performance d'un système photovoltaïque doit être déterminée à partir de l'équation (I-V) à divers points de fonctionnements donnés pour une étude rigoureuse qui doit être faite pour avoir une cellule PV performante qui donnera la plus grande puissance possible.

La physique des cellules solaires ainsi que leurs différents paramètres caractéristiques ont déjà été abordés dans la première partie suivis par des rappels théoriques concernant la physique de matériaux ainsi que le comportement électrique des semi-conducteurs.

L'objectif de notre travail est de déterminer les paramètres électriques régissant le fonctionnement d'une cellule solaire comme la résistance série (R_s), le facteur d'idéalité (n) et la résistance shunt (R_{sh}) afin d'établir un modèle correspondant (modèle à une seule exponentielle) décrivant le comportement d'une cellule (G2749-3). Ceci est effectué à travers des simulations faites dans l'environnement de programmation ; en appliquant les méthodes numériques usuelles telle que la méthode de Newton – Raphson.

La méthode de Levenberg-Marquardt a été appliquée à une pile solaire simulée en utilisant une approche logarithmique, "algorithme LMSA" pour extraire les paramètres caractérisant notre diode Schottky simulée.

5.2 Procédure expérimentale

5.2.1 Présentation de l'échantillon

Dans ce travail, nous avons inséré des nanostructures (BQs) cultivées sur le substrat "n+GaAs(si)" par épitaxie par Jet moléculaire (EJM). La structure de la cellule solaire avec BQs est représentée par la figure 5.1.

Au cours de cette étude, les semiconducteurs utilisés sont les (P-GaAs(Be), (GaAs semi isolant), (GaSb semi isolant), (boîtes quantiques InAs avec un flux de Sb), (N-GaAs (Si), et(un substrat N-GaAs(Si)). La cellule solaire (G2749-3) utilisée est représentée par la figure 5.1.

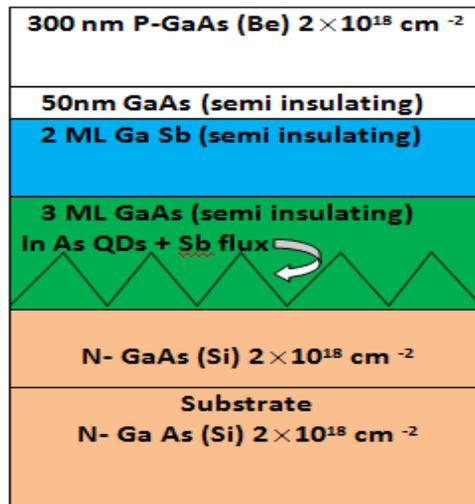


Figure 5. 1: Schéma type de la structure des Boîtes quantiques InAs/GaAs développée par EJM (G2749-3).

Dans le cadre de nos collaborations, cet échantillon mis à notre disposition par le laboratoire « LMON » de Monastir (Tunisie), nous a permis de faire l'étude de la caractéristique (I-V) au laboratoire de Physique de la Matière Condensée & Energies Renouvelables (LPM CER) de l'Université Hassan II (Maroc). Pour ce faire, nous avons suivi une formation d'initiation au logiciel "LABVIEW", au sein du laboratoire d'Electronique, Electrotechnique, Automatique et traitement de l'information de la même université (EEA&TI). Cette formation nous a permis de maîtriser le pilotage des instruments de mesures (I-V).

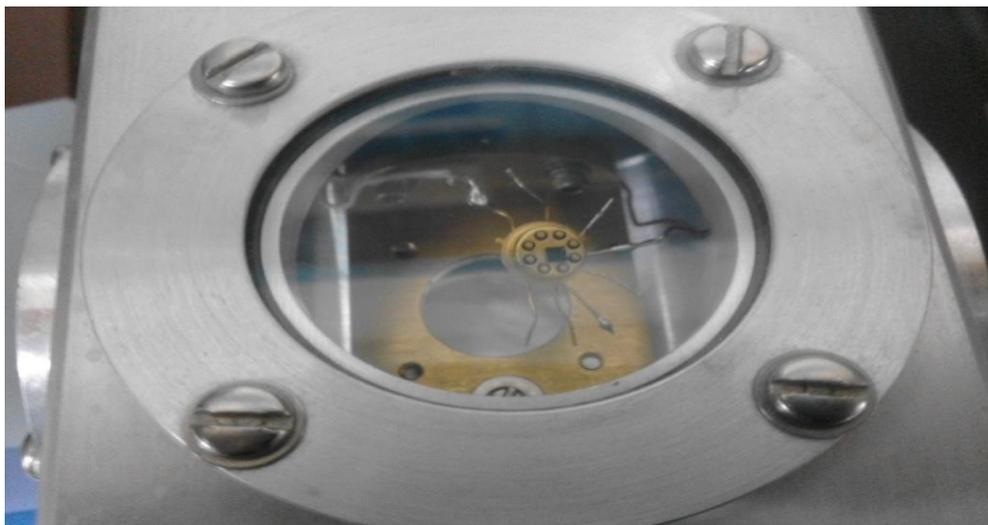


Figure 5. 2: Échantillon (G2749-3) mis dans un cryostat (pour avoir une température de 300°K) (LPM CER)-MAROC.

5.2.2 Principe de la caractéristique (I-V)



Figure 5. 3: Images de l'ensemble du montage expérimental pour les mesures (I-V) (LPMCER)-MAROC.

L'utilisation d'une source multimètre KEITHLEY 2000 d'intensité, d'une source Keithley 6487 de tension, d'un régulateur de température et d'une lampe au tungstène, nous a permis de calculer le courant-tension (I-V). La lumière monochromatique utilisée a une intensité calibrée à 1000 mW/cm^2 (Figure 5.3). L'installation photovoltaïque présente naturellement des caractéristiques (I-V) non linéaires qui dépendent de la température et de la cellule solaire utilisée.

Les mesures (I-V) de la jonction PIN ont été réalisées à l'aide du KEITHLEY 2000 en modes picoampère (pA) ou picovolt (pV) et d'une lampe Xenon. La figure (5.4) représente la courbe (I-V).

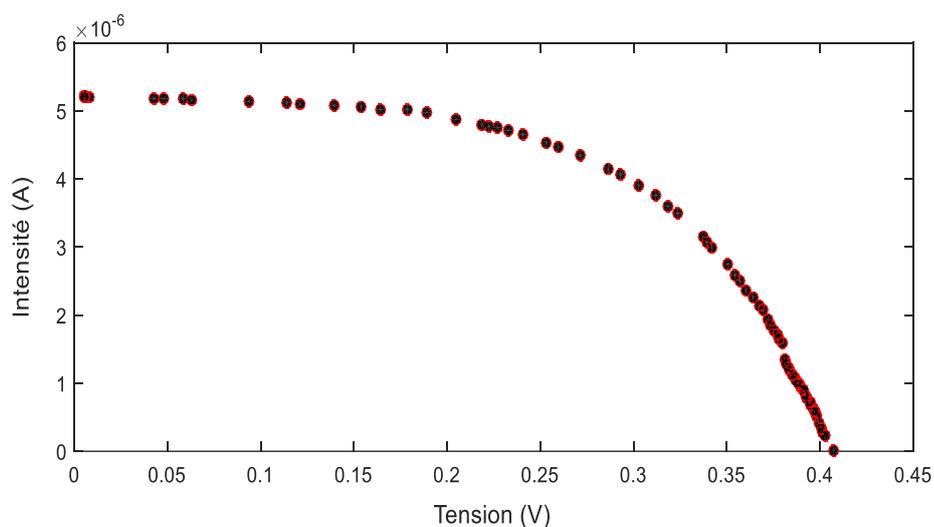


Figure 5. 4: La variation de l'intensité (I) en fonction de la tension (V) pour la cellule de référence (G2749-3).

La figure (5.4) montre la courbe expérimentale de la caractéristique (I-V). Pour de faibles valeurs de la tension, la cellule est une source de courant constante avec un courant approximativement égal au courant de court circuit (I_{cc}) (région de quasi-palier). Lorsque la tension augmente, le courant commence à diminuer jusqu'à la valeur zéro correspondant à la tension de circuit ouvert (V_{co}).

5.3 Extraction des paramètres de la cellule solaire

5.3.1 Modèle de caractérisation

Les performances des cellules photovoltaïques peuvent être représentées par la courbe caractéristique courant-tension (I-V) à différents points. Nous nous sommes intéressés à l'effet d'un ensemble de paramètres électriques sur les performances de la cellule à base de points quantiques.

Dans un premier temps, nous présenterons le processus expérimental pour obtenir la courbe caractéristique expérimentale (I-V), dans un second temps, la détermination des paramètres électriques qui régissent le circuit du modèle électrique à une diode choisie pour décrire le comportement physique de ces cellules solaires. Cela se fait par un processus d'optimisation par l'application d'une des méthodes usuelles telle que la méthode de Levenberg-Marquardt combinée avec Recuit simulé (LMSA).

La courbe simulée obtenue à partir du modèle de notre cellule solaire est en accord avec la courbe expérimentale réelle grâce à l'algorithme LMSA appliqué pour extraire les paramètres électriques caractérisant le modèle choisi.

Pour acquérir une meilleure compréhension des processus de recombinaison et les pertes correspondantes, nous analyserons les caractéristiques (I-V) en termes de modèle à une seule diode.

Notre but consiste à analyser les performances de la cellule solaire à l'aide du modèle à une seule exponentielle de la figure (1.13) [143,144]. Lorsqu'une cellule est soumise à un éclairage variable, cet éclairage et la température de son environnement affectent les valeurs de ses paramètres électriques internes (R_s , R_{sh} , I_{ph} , I_s , et n). Le modèle mathématique [144] déduit de ce circuit, montre la relation entre le courant (I_{pv}) et la tension (V_{pv}) selon les paramètres électriques cités ci dessus. La relation est donnée par:

$$I_{pv} = I_{PH} - I_s \left[\exp \left(\frac{V_{pv} + R_s I_{pv}}{n V_{th}} \right) - 1 \right] - \frac{V_{pv} + R_s I_{pv}}{R_{SH}} \quad (62)$$

Où:

V_{th} : tension thermique ($V_{th} = K_B.T/q$).

K_B : constante de Boltzmann ($1.3806503.10^{-23}$ J/K).

q : charge d'un électron ($1.6021764 .10^{-19}$ C).

T : température de la cellule en degrés Kelvin.

5.3.2 Méthode de Levenberg-Marquardt (LM)

L'initialisation des paramètres est importante pour la convergence d'un algorithme d'optimisation. C'est le cas des algorithmes de la méta-heuristique tel que Global Grouping-based Harmony Search (GGHS), Artificiel Bee Swarm Optimisation (ABSO), Différentiel Evolutionary (DE), Newton-Raphson (NR), Patern Search (PS), Simulated Annealing (SA) et Genetic Algorithm (GA). [145-147].

Nous avons choisi d'utiliser la méthode des moindres carrés linéaire (LSM) pour initialiser les cinq paramètres de l'algorithme LMSA. L'avantage de cette méthode est qu'elle est directe et non itérative. Toutefois, elle est appliquée uniquement aux systèmes linéaires par rapport aux paramètres.

Cette propriété n'est pas vérifiée pour notre caractéristique ($I_{pv} - V_{pv}$). Toutefois, nous notons qu'il y a deux régions: le quasi plateau qui est linéaire et la descente qui est non linéaire. Pour la première région, la méthode de LSM est appliquée, tandis que dans la zone non linéaire, par une approximation convenable, on effectue une linéarisation logarithmique en utilisant l'algorithme LMSA [148-153].

5.3.3 Extraction des paramètres

Après avoir mesuré expérimentalement les valeurs (I,V) à l'aide du logiciel de pilotage LABVIEW avec l'équipe de laboratoire (LPMCER) de l'université Hassen II « Maroc », nous avons extrait des paramètres R_s (résistances en série), R_{sh} (résistance shunt), n (facteur d'idéalité), I_s (Intensité de saturation) et I_{ph} (intensité de photocourant) et à partir des données expérimentales en utilisant l'algorithme LMSA [144].

5.4 Processus d'identification

Nous rapportons les valeurs expérimentales I_{ph} et V_{ph} de notre échantillon (G2749-3) qui sont prises à une température de 300 °K et un éclairage de 1000 W/m². Le processus d'identification des paramètres a été effectué par l'algorithme LMSA.

L'algorithme LMSA était itératif, la procédure de convergence est arrêtée comme une précision pré-définie est atteinte .

En incluant les valeurs expérimentales (I_{PV} et V_{PV}) dans l'équation (62) et en utilisant la méthode de Levenberg-Marquardt, nous avons extrait les paramètres (R_s , R_{sh} , I_{ph} , I_s , et n). A l'aide de ces derniers, nous avons tracé la courbe des valeurs simulées de la caractéristique (I_{PV} - V_{PV}) représentées sur la figure 5.5

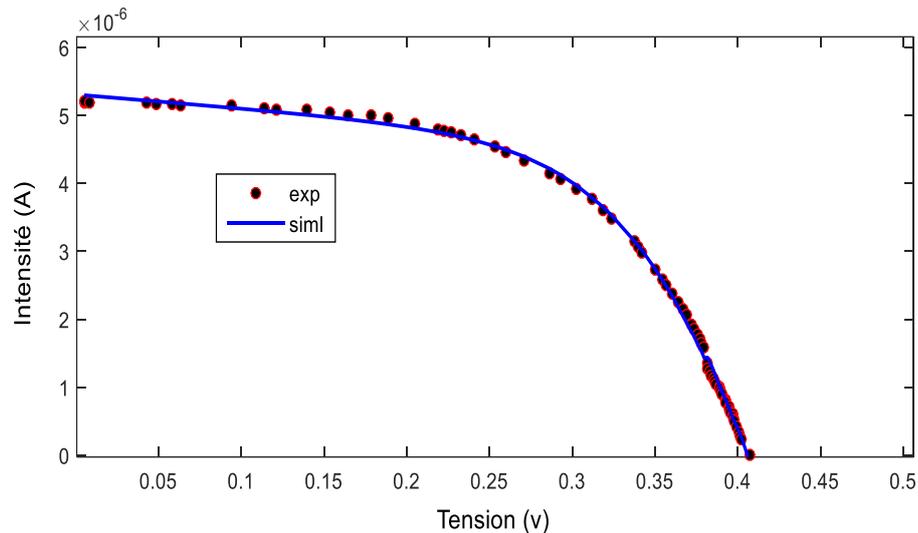


Figure 5. 5: Caractéristique $I = f(V)$ pour les deux cas expérimental et simulé.

Cette figure 5.5 montre la concordance entre les résultats expérimentaux et simulés des caractéristiques $I = f(V)$. Les paramètres extraits sont représentés sur le tableau (5.1). Ils caractérisent la cellule (G2749-3) et le module solaire respectivement sous les conditions standards (1000 W/m^2 , AM 1.5, température de cellule : $300 \text{ }^\circ\text{K}$).

Tableau 5. 1: Paramètres extraits des caractéristiques internes de la cellule (G2749-3).

J_{cc} (μA)	V_{co} (V)	R_s ($\text{K}\Omega$)	R_{sh} (k)	n	I_s (nA)	I_{ph} (μA)
5.22	0.415	7.42531	856.445	1.76	75.9	5.26

5.5 Application et simulation numérique:

5.5.1 Caractéristiques courant-tension (I-V) et puissance-tension (P-V) de la cellule solaire (G2749-3):

Les mécanismes de transport d'une cellule ou d'un module solaire sont étudiés à l'aide de la caractéristique courant-tension (I-V) obtenue par le modèle à une seule diode qui possède cinq

paramètres: le photo-courant (I_{Ph}), le courant de saturation de la diode (I_{sd}), le facteur d'idéalité (n), la résistance série (R_s) qui présente les différentes pertes de contacts et de connexions et une résistance shunt (R_{sh}) qui caractérise les courants de fuite de la jonction de la diode.

Nous avons utilisé l'équation implicite (courant-tension) gérant la puissance extraite d'une cellule solaire en utilisant le modèle à une seule diode connu sous le nom « L5P » (Lumped, 1 Mechanism, 5 Parameters) décrit par l'équation (62) qui a été déduite à partir de la loi de Kirchhoff [148,149]:

$$I_{pv} = I_{Ph} - I_d - I_{sh} \quad (63)$$

Il existe plusieurs méthodes numériques itératives pour la détermination de ces paramètres telles que la méthode de Dichotomie, la méthode de Lagrange, la méthode du point fixe et la méthode de Newton Raphson.

Parmi ces méthodes, nous avons choisi la méthode de Newton Raphson qui est l'une des méthodes les plus utilisées pour la résolution des équations non linéaires.

5.5.1.1 Calcul de la puissance maximale

Sur toute la gamme de la tension (Figure 5.5), il y a un seul point où la cellule fonctionne dans son point optimal. C'est le point de puissance maximale P_m .

La puissance de la cellule étant donnée par $P=I*V$, les valeurs I_m et V_m sont les coordonnées relatives au point de la puissance maximale P_m de la cellule (Figure 5.5). Pour trouver cette puissance maximale, nous procédons à un calcul différentiel selon [154].

$$\frac{dP}{dI} = 0 \quad (63)$$

$$\text{Où} \quad P = V * I \quad (64)$$

V est déduite à partir de l'équation (62) et la tension aux bornes de la cellule est donnée par :

$$V = \left(-I + I_{PH} - I_S \left(\exp \left(\frac{q(V+R_S I)}{nk_\beta T} \right) - 1 \right) - \frac{R_S I}{R_{SH}} \right) R_{SH} \quad (65)$$

d'où :

$$\frac{dP}{dI} = -2I(R_S + R_{SH}) + R_{SH}I_{PH} + R_{SH}I_S \left[\exp \left(\frac{q(V+R_S I)}{NK_\beta T} \right) - 1 \right] \left(1 + \frac{R_S I}{nK_\beta T} \right) \quad (66)$$

La résolution de cette équation différentielle est faite par la méthode de Newton-Raphson qui donne la densité de courant maximale pour la cellule [150].

enfin :

$$I_m = [(\log(I_{CC} + I_S) - \log(I_{CC} - I_S)/I_S)] / (R_S(1 + qI_S/nK_\beta T)) \quad (67)$$

Et :

$$V_M = \frac{nK_\beta T}{q} \log((I_{CC} + I_S) / I_S) - R_S I_m \quad (68)$$

5.5.1.2 Développement du circuit équivalent à la cellule PV

L'extraction et l'optimisation des paramètres des composants électroniques est l'étape la plus importante pour la modélisation.

Pour le développement du circuit équivalent à une cellule PV, il est nécessaire de comprendre la configuration physique des éléments de la cellule ainsi que les caractéristiques électriques de chaque élément.

A l'aide de l'outil informatique, les paramètres calculés précédemment sont inclus dans un programme afin de tracer la caractéristique courant-tension (I-V). Nous avons appliqué le modèle décrit précédemment sur notre cellule solaire (G2749-3), ceci consiste à maximiser l'aire du rectangle borné par les axes de I et V et par la courbe (I-V).

La méthode employée consiste à développer un programme pour la simulation des différents effets sur les caractéristiques électriques de la cellule qui sont influencées par plusieurs facteurs, tels que : la résistance en série (R_s), la résistance shunt (R_{sh}) et le facteur d'idéalité (n).

5.5.1.2.1 Effets de la résistance en série sur l'efficacité de conversion de puissance

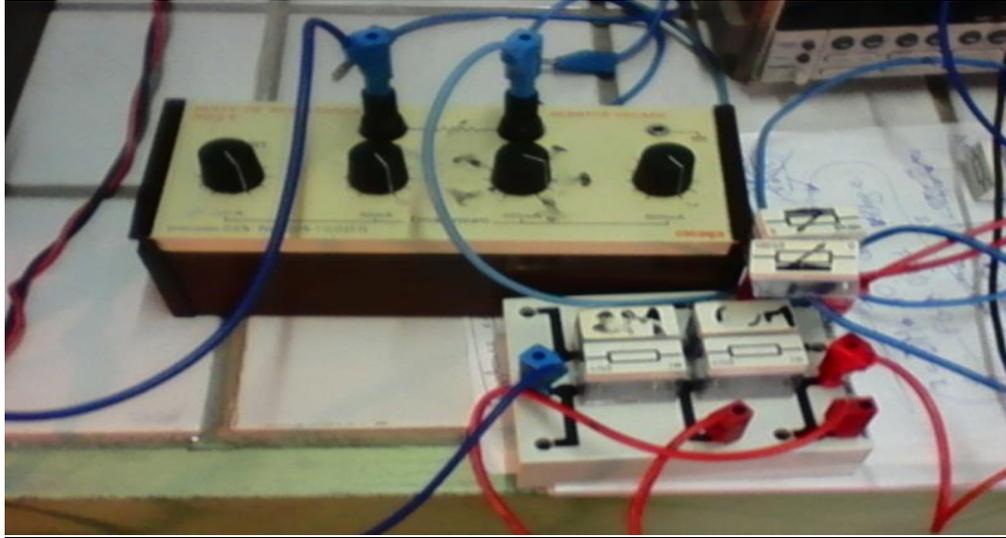


Figure 5. 6: Le montage de résistances en série (R_s) pour notre manipulation (LPM CER)-MAROC.

La résistance en série est l'un des paramètres principaux de la cellule solaire qui affecte la puissance de conversion et ainsi leur efficacité.

La résistance en série représente toute les résistances qui sont mises en série de la cellule et elle est composée des: résistances actives et dièdres de couche, des résistances d'électrode et de divers contacts et interconnexions résistance [150].

La résistance en série (R_s) est le paramètre dominant qui permet de déterminer la puissance maximale (en changeant la pente de la courbe courant-tension (I-V) auprès de V_{co}) [155]. Il a donc une influence importante sur les cellules solaires à haute efficacité. En outre, dans la couche active, R_s est proportionnelle à l'inverse de la mobilité des porteurs de charges [156].

Cependant, les recherches ultérieures ont démontré que les augmentations de mobilité de la couche active sont corrélées avec des valeurs plus basses de R_s .

Nous procédons directement à une comptabilité pour des effets de résistance (R_s) sur l'exécution d'une cellule solaire à partir d'un rapport établi décrivant le comportement (I-V) (équation 62). Nous rapportons une analyse complète des effets de R_s sur l'efficacité de conversion de puissance par une approche numérique basée sur des données expérimentales.

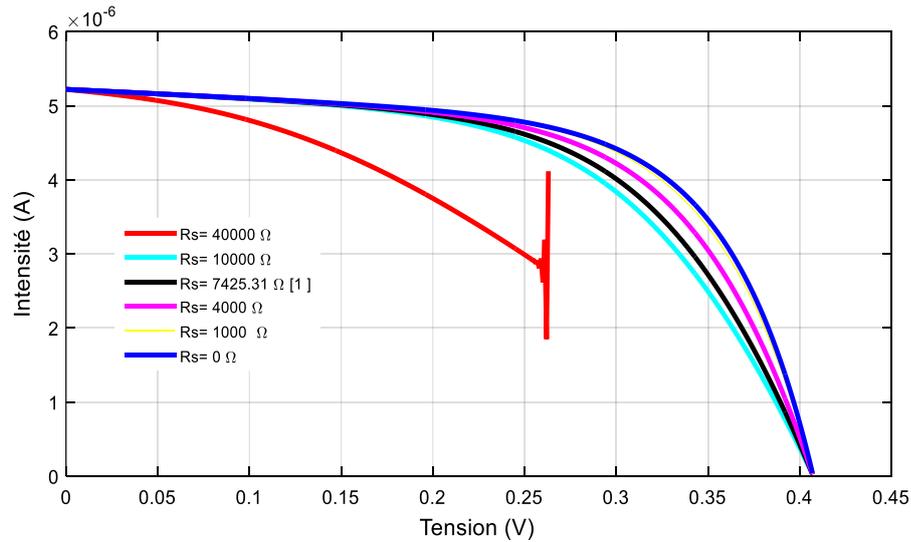


Figure 5. 7: Effet de la variation de R_s sur les caractéristiques (I-V) pour la cellule (G2749-3).

Ces courbes sont produites à partir de l'équation (62) et des paramètres du tableau 5.1, avec R_s comme le seul paramètre à varier. La simulation montre comment R_s affecte les principaux paramètres d'exécution : la puissance maximale est sensiblement affectée par les augmentations de R_s dans les cellules de (G2749-3).

La figure 5.7 montre que l'élimination complète des pertes de R_s a un effet insignifiant sur la puissance (de $1.205 \mu\text{W}$ à $1,326 \mu\text{W}$) pour (G2749-3). Des études précédentes montrent comment les changements des états structuraux ont mené à la cristallinité améliorée de couche active et aux valeurs réduites de R_s [157].

Cependant, la limite inférieure des valeurs de R_s était d'environ $10 \text{ k}\Omega$ pour (G2749-3), la limite de l'amélioration de la puissance de la pile solaire est obtenue pour $R_s \approx 0 \Omega$.

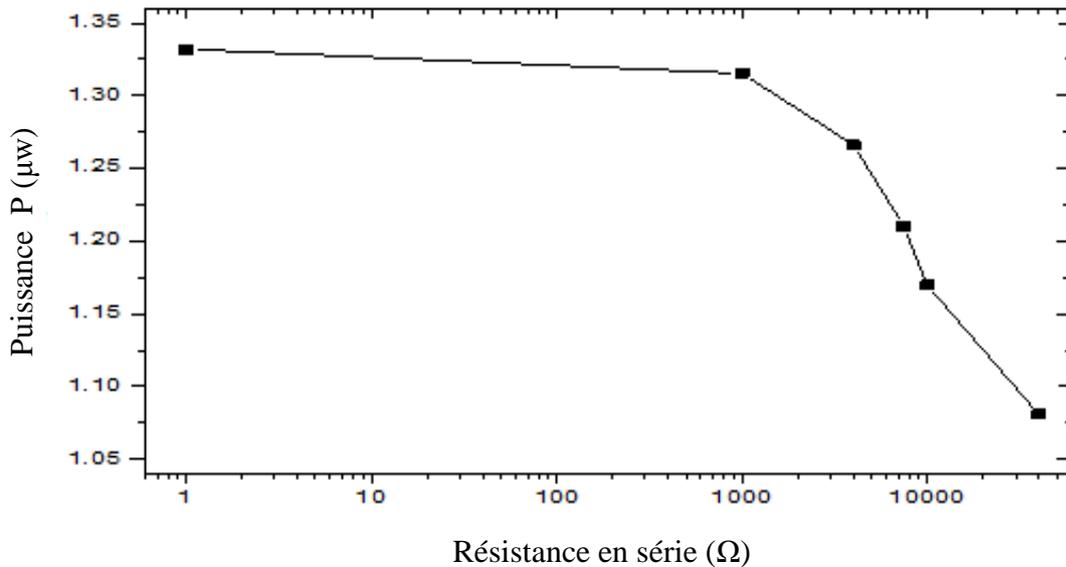


Figure 5. 8: La variation de la puissance maximale P_m en fonction de la résistance série R_s pour la cellule solaire (G2749-3).

La figure 5.8 montre la diminution de la puissance maximale calculée en fonction de l'augmentation de R_s et montre à quel point cette augmentation affecte les deux paramètres.

Noter qu'il faut remplir les voies de puissance maximale presque jusqu'à ce que R_s soit exactement proche de $10\text{ k}\Omega$. En ce point, la puissance maximale diverge comme on peut le voir sur la figure 5.8.

Cependant, des recherches précédentes ont décrit plusieurs outils de simulation optique, structurale et électrique travaillés pour la conception de pile solaire et l'augmentation des mobilités des couches actives qui sont corrélées avec des valeurs plus basses de R_s [158, 159]. L'outil de calcul de la densité de courant en cellules solaires est basé sur la transmission, la réflexion et l'absorption de la lumière, aussi bien que sur plusieurs facteurs affectant le transport de porteur de charge, comprenant la recombinaison, la génération d'exciton, la probabilité de dissociation et la mobilité des porteurs [160, 161].

Même s'il a été montré que l'incorporation de boîtes quantiques élargit la couverture solaire spectrale par photons sous-intervalles de bande d'absorption (Figure 4.6), la contribution des boîtes quantiques à l'amélioration de photo-courant est encore négligeable. Le gain de courant ne suffit pas à compenser la perte de R_s .

En résumé, la puissance maximale est sensiblement affectée par des augmentations de la résistance en série (R_s).

5.5.1.2.2 Effets du facteur d'idéalité (n) sur l'efficacité de conversion de puissance

Le facteur d'idéalité (n) est une caractéristique de la génération et la recombinaison (G-R) traitée dans le dispositif photovoltaïque.

Comme il est connu, $n = 1$ correspond aux processus de rayonnement dans les régions de charge d'espace qui ont été dépeuplées. Pour $n \geq 2$, il est associé à la recombinaison via des pièges dans la région de charge d'espace (la recombinaison Shockley- Read-Hall) avec n dépendant de la polarisation [160,161].

Les niveaux (i) intermédiaires des boîtes quantiques induisent également les processus (recombinaison-génération) avec des sous-états d'énergie. Pour cette raison, une cellule solaire via des boîtes quantiques a des processus importants (recombinaison-génération) pour l'augmentation du facteur d'idéalité jusqu'à 3 ou même plus [162].

Dans ce modèle, la caractéristique I-V est décrite par l'équation (62), la courbe (I-V) (figure 5.9) est définie par le terme exponentiel, à partir duquel le facteur d'idéalité n peut être déterminé.

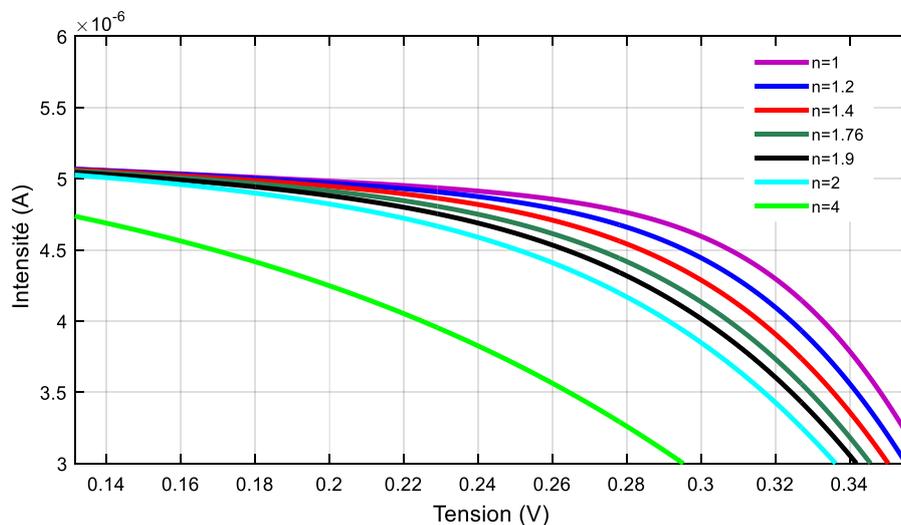


Figure 5.9: La variation de la caractéristique I-V pour différentes valeurs du facteur d'idéalité n pour la cellule solaire (G2749-3).

L'influence du facteur d'idéalité sur la caractéristique courant-tension se traduit par une légère diminution en puissance et une grande diminution de la pente de la courbe (I-V) dans la zone correspondante à un fonctionnement comme une source de tension.

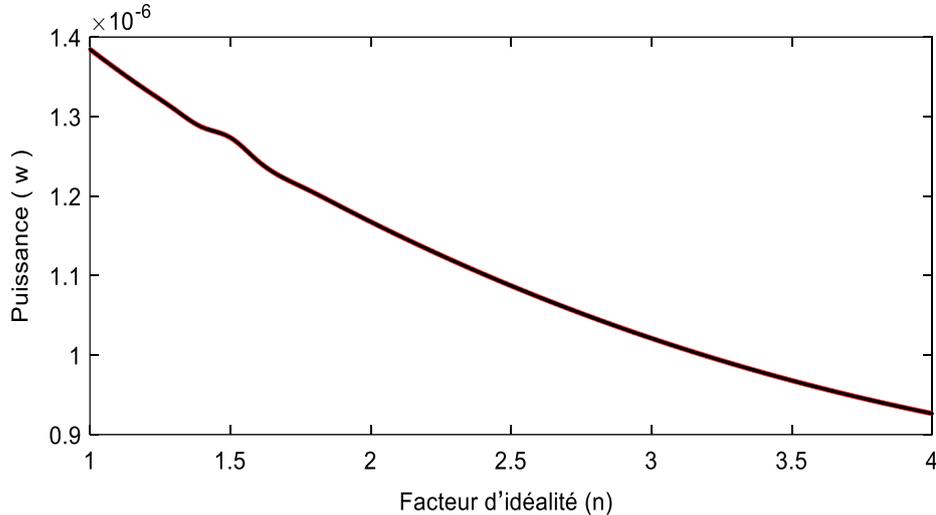


Figure 5. 10: La variation de la puissance maximale P_m en fonction du facteur d'idéalité (n) pour la cellule solaire (G2749-3).

Dans la figure 5.10 est donnée la variation de puissance maximale en fonction du facteur d'idéalité, d'une cellule photovoltaïque à base des boîtes quantiques (G2749-3).

On remarque, que la puissance maximale délivrée décroît de manière linéaire, elle est inversement proportionnelle au facteur d'idéalité de la cellule photovoltaïque (G2749-3).

Nous avons observé que ces résultats indiquent que l'efficacité de conversion de puissance maximale est bien dominée par le facteur d'idéalité (n). Ce dernier est aussi un paramètre important dans le comportement des cellules solaires.

5.5.1.2 .3 Effets de la résistance shunt sur l'efficacité de conversion de puissance

La résistance shunt est une résistance qui prend en compte les fuites inévitables du courant intervenant entre les bornes de la photopile. Le paramètre de résistance shunt (R_{sh}) représente la pente de la courbe (I-V) auprès du point de courant de court-circuit I_{cc} .

Une recherche expérimentale sur la valeur de la pente au point du courant du court-circuit au sein du NIST (National Institute of Standards and Technology) a montré que R_{sh} augmente lorsque l'irradiation solaire sur une cellule PV diminue [163].

La figure 5.11 représente la caractéristique (I-V) de notre échantillon obtenue par la simulation et la modélisation de R_{sh} de la diode Schottky ($0,05 \text{ M}\Omega \leq R_{sh} \leq 5 \text{ M}\Omega$).

L'influence de la résistance parallèle se traduit par un changement de la forme de la courbe de la caractéristique (I-V). On remarque que lorsque R_{sh} passe de la valeur $5 \text{ M}\Omega$ à $0,05 \text{ M}\Omega$, la courbe passe de la forme connue de la caractéristique (I-V) à une forme presque linéaire. Aussi, la puissance diminue considérablement quand la résistance R_{sh} diminue ($5 \text{ M}\Omega \leq R_{sh} \leq 0,05 \text{ M}\Omega$).

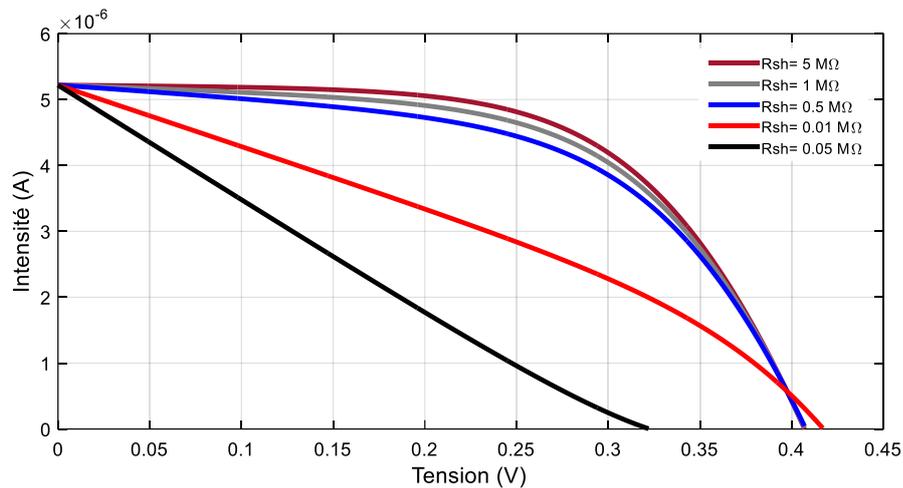


Figure 5. 11: La variation de la caractéristique (I-V) pour différentes valeurs de R_{sh} pour la cellule solaire (G2749-3).

La dépendance de la puissance maximale avec la résistance parallèle dans la même gamme précédente est représentée dans la (figure5.12).

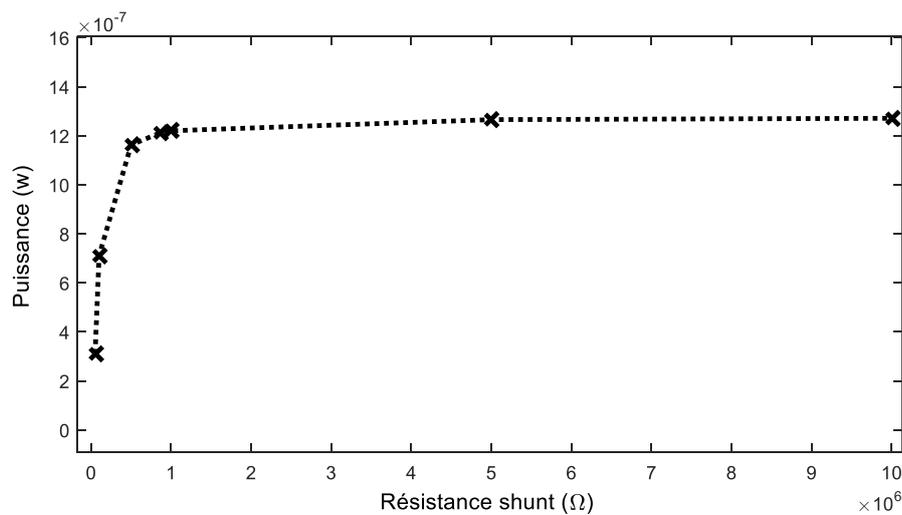


Figure 5. 12: La variation de la puissance maximal P_m en fonction de R_{sh} pour la cellule solaire (G2749-3).

On remarque que la puissance maximale augmente avec l'augmentation de R_{sh} exactement jusqu'à ce qu'elle soit proche de la valeur $0,85 \text{ M}\Omega$. A partir de cette valeur, l'augmentation des pertes de R_{sh} n'induit qu'une légère augmentation de la puissance P_m ce qui est représenté par la région du quasi-palier.

Pour cet échantillon, les caractéristiques (I-V) et (P- R_{sh}) montrent que la puissance fournie par une cellule solaire varie avec sa résistance shunt, plus cette résistance est élevée plus la puissance fournie est importante.

Une autre justification partielle pour la résistance infinie ($R_{sh} \approx 10 \text{ M}\Omega$) est que les courants de shunt ne sont pas un mécanisme de pertes inhérent aux propriétés matérielles [164].

5.6 Conclusion

Dans ce chapitre, le principe de la caractéristique (I-V) d'une cellule solaire a été revu. Le modèle choisi à une seule diode a été décrit et nous avons appliqué la méthode de Levenberg-Marquardt combinée avec Simulated Annealing (LMSA) pour l'extraction des paramètres électriques (R_s , R_{sh} , I_{ph} , I_s , et n) qui ont été appliqués à notre échantillon (G2749-3). Le processus d'identification effectué est mis en œuvre et exécuté dans un programme évolué.

Nous avons trouvé une très bonne concordance de nos résultats expérimentaux et simulés des caractéristiques (I-V).

La structure réelle (InAs(Sb)/GaAs) développée dans ce travail vise à améliorer son efficacité électrique qui a été développée dans ce travail par MBE. Ce qui nous a permis de mettre en évidence les principaux mécanismes de conduction observables dans notre échantillon.

Dans le premier cas, l'étude a été faite sur la résistance série (R_s) du même échantillon (G2749-3). Ceci indique que la résistance série ($R_s = 0$) mène à une petite amélioration de la puissance pour notre cellule solaire, car ce secteur réduit les diminutions de densité de défauts dues à l'irrégularité matérielle et en conséquence les porteurs ne sont pas emprisonnés. Donc, il faut se servir des technologies très développées pour réduire la présence de cette résistance [163,165]. Dans le deuxième cas, une étude en fonction de facteur d'idéalité (n) sur notre échantillon (G2749-3) indique une amélioration de la puissance optimale de ($1,205 \mu\text{W}$ à $1,379 \mu\text{W}$) dans le cas idéal et à une température de 300°K . Et pour le dernier cas, la résistance shunt R_{sh} , notre étude indique une amélioration de la puissance de ($1,205 \mu\text{W}$ à $1,27 \mu\text{W}$) pour notre échantillon (G2749-3). On constate que la puissance fournie par une cellule solaire varie avec sa résistance shunt, plus cette résistance est élevée plus la puissance fournie est importante.

CONCLUSION GENERALE

L'objectif de notre travail est basé sur l'étude de l'efficacité des cellules solaires par l'incorporation de matériaux nanostructurés dans la conception de ces cellules (en s'appuyant sur des travaux antérieurs). Aussi, on a amélioré les propriétés de ces matériaux à l'échelle nanométrique .

En premier lieu nous avons donné un aperçu théorique sur les matériaux semi conducteurs de type III-V. Pour ce faire, nous avons utilisé le modèle des boites quantiques dans les composants à base de semi-conducteurs. Aussi, nous avons étudié les intérêts, les potentialités et les principales applications des boites quantiques.

En second lieu, nous avons présenté le principe de croissance des boites quantiques, et expliqué comment choisir le matériau adapté à l'application voulue. Ces applications sont soumises à des contraintes sur la longueur d'onde utilisée, et sur les signatures optiques des boites quantiques.

Dans une troisième partie nous avons présenté les différentes techniques d'analyse et de caractérisation mise à notre disposition par le Laboratoire de Micro Optoélectronique et Nano système (LMON) de Monastir (Tunisie) et du laboratoire de physique fondamentale et appliquée (FUNDAPL) de l'université de Blida1.

Nous avons ramené un échantillon à boite quantique (InAs/GaAs) de série (S0301) élaboré par épitaxie par jets moléculaires (EJM) et préparé par l'équipe de croissance au sein du Laboratoire (LMON) pour sa caractérisation au niveau de notre laboratoire.

Nous avons utilisé le Microscopie Electronique à Balayage (MEB) et le (EDX) pour une étude qualitative et quantitative de notre échantillon (S0301). Les analyses de caractérisation morphologiques et microstructurales de cet échantillon ont été faites suivant deux observations latérales ; perpendiculaire et horizontale. Elles ont permis de montrer l'existence des boites quantiques, de déterminer leur densité, ainsi que leur distribution spatiale par l'étude cartographique.

Les investigations (études structurales) de cet échantillon (InAs/GaAs de série S0301) nous ont fourni d'autres informations qui permettent l'étude d'autres systèmes optoélectroniques et photovoltaïques.

Nous avons aussi fait des calculs à l'aide du logiciel "Comsol" au sein de notre laboratoire FUNDAPL. Le modèle utilise l'équation de Schrödinger stationnaire. Nous avons fait l'analyse

des états électroniques d'une boîte quantique prise comme un point quantique InAs/GaAs. Ce dernier a fait l'objet d'étude pour différentes géométries.

Dans cette étude, nous avons calculé les valeurs de l'énergie en fonction de chacun des paramètres : largeur et longueur de la boîte quantique et avec une épaisseur de la couche de mouillage où les autres paramètres sont maintenus constants. Nous avons trouvé que lorsqu'on a réduit la taille des structures, on observe un décalage de l'énergie des transitions vers les plus hautes énergies à cause de la variation de l'énergie de confinement.

On peut affirmer selon notre étude que les modifications de l'énergie associées au niveau fondamental ont été attribuées à un changement de la forme ou de la composition de ces boîtes.

Dans la quatrième partie, nous avons présenté les modélisations et les simulations d'une structure (InAs/GaAs). Pour ce faire, nous avons choisi deux géométries de boîtes quantiques existantes, rectangulaires et elliptiques, en vue de l'amélioration de l'efficacité d'une cellule solaire à base des ces boîtes quantiques. Au vu des résultats obtenus, on a constaté que l'amélioration de l'efficacité d'une cellule solaire a été obtenue par l'incorporation des boîtes quantiques.

Finalement, dans la cinquième partie, une étude détaillée a été faite sur les paramètres extraits de notre cellule solaire (G2749-3) qui a été réalisée et caractérisée. La tension à ses bornes et le courant débité représentent la caractéristique (I-V). Cette caractéristique de la cellule est influencée par plusieurs facteurs, tels que : la résistance en série (R_s), la résistance shunt (R_{sh}) et le facteur d'idéalité (n). Nous avons vu que pour avoir une cellule solaire efficace avec une puissance intéressante considérable, on doit faire un compromis entre les valeurs de tous les paramètres modélisant cette cellule et ses grandeurs physiques.

L'ensemble de cette thèse a permis d'étudier l'effet des propriétés structurales, optiques et optoélectroniques des boîtes quantiques d'InAs et l'influence de leurs confinements sur l'efficacité de conversion des cellules solaires de (InAs/GaAs).

Afin de continuer dans cette démarche d'étude nous envisageons des différents points améliorés ou approfondis dans l'avenir.

Le premier point concerne l'influence de l'incorporation de Sb sur notre échantillon pendant la croissance pour étudier la qualité du matériau (les propriétés de transport de porteurs minoritaires) avec l'investigation de la structure électronique des rangées de BQs par spectroscopie de photoluminescence, photoréfléctivité et DLTS. Cette étude nous sera utile pour la localisation de la bande intermédiaire (états localisés des BQs).

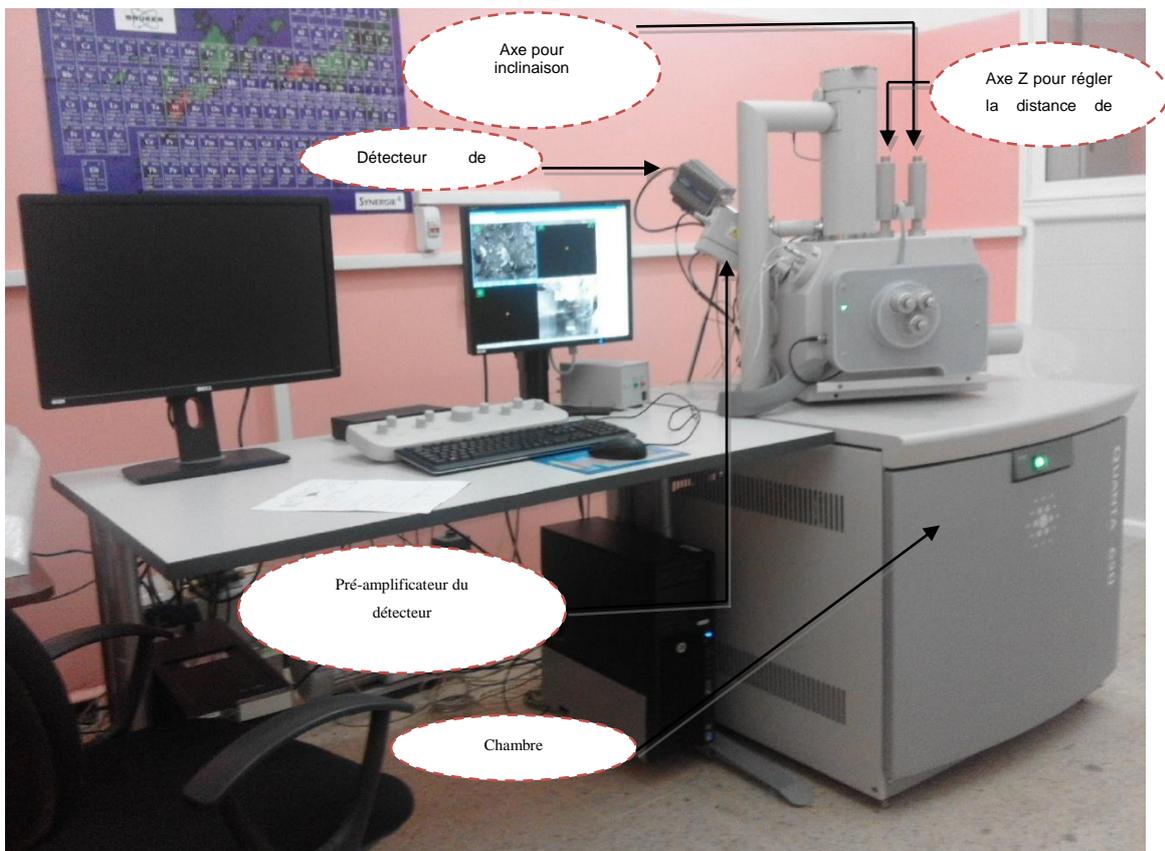
En second point, il serait très intéressant de mesurer les caractéristiques électriques de notre cellule par un (RLC mètre) pour différentes valeurs des tensions pour présenter l'aspect microscopique, ceci nous permettra d'analyser le comportement de notre diode.

Le dernier point concerne d'étudier et maîtriser l'empilement vertical de plusieurs plans de boîtes quantiques (>50 plans) afin de pouvoir confronter nos résultats par l'élaboration et l'optimisation des structures à empilement de plans de boîtes quantiques InAs/GaAs émettant autour de 1 μm pouvant servir comme absorbant dans les cellules solaires (Elaboration par EJM, caractérisation par spectroscopie optique et évaluation des propriétés structurales).

ANNEXE 1:

Le Microscope Électronique à Balayage est une technique d'analyse et de caractérisation reposant sur l'interaction des électrons avec le matériau étudié. Elle est capable de sonder non seulement la surface mais aussi la section d'un échantillon.

Le principe du MEB est basé sur l'émission d'électrons produit par la cathode et la détection de signaux provenant de l'interaction de ces électrons avec l'échantillon.

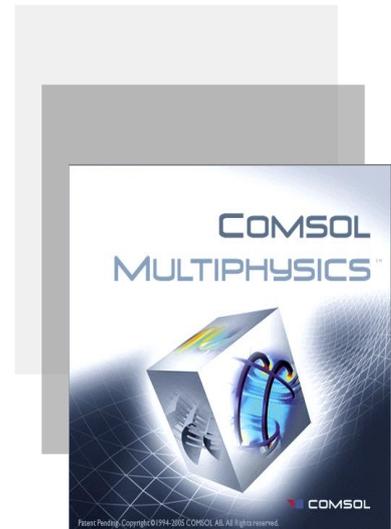


Microscope électronique à balayage QUANTA 650. (Lab: FUNDAPL-Université de Blida 1)

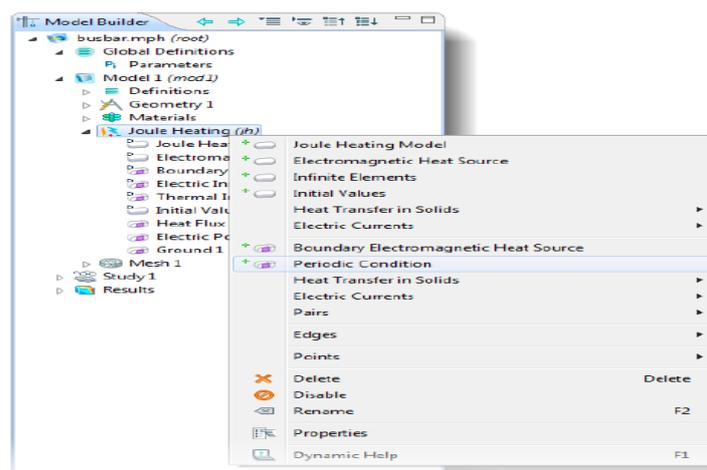
Le bâti de la microscope électronique à balayage est représenté d'une façon schématique sur la figure précédente. Il est couplé à un spectromètre de rayons X et composé essentiellement de quatre parties distinctes qui sont : la partie source, la partie expérimentale, la partie de détection et la partie de traitement.

ANNEXE2:

Comsol Multiphysics est un logiciel d'une analyse par éléments finis, solveur et Simulation / package logiciel FEA pour la physique et applications d'ingénierie, en particulier les phénomènes couplés ou multi physiques. COMSOL Multiphysics propose également une interface étendue à MATLAB et ses boîtes à outils pour une grande variété de possibilités de programmation, de prétraitement et post-traitement. Les paquets sont multiplateformes (Windows, Mac, Linux). En plus des interfaces utilisateur classiques basés sur la physique, COMSOL Multiphysics permet également d'entrer dans des systèmes couplés d'équations aux dérivées partielles (EDP). Les équations aux dérivées partielles peuvent être saisies directement ou en utilisant le formulaire soi-disant faible (méthode des éléments finis pour une description de formulation faible). Une première version (avant 2005) de COMSOL Multiphysics est appelé FEMLAB.



L'interface utilisateur simplifie le processus de modélisation avec le Model Builder. Contenant un arbre du modèle, le Model Builder fait bien plus que décrire votre modèle. Il s'agit d'un environnement de programmation graphique qui nous donne un contrôle dynamique de nos procédures et des simulations. En suivant le long des nœuds dans le modèle Builder, nous ferons l'expérience d'une manière plus douce et plus directe, et moins encombrant à spécifier nos modèles.



Le bureau COMSOL nous aide à organiser notre simulation en présentant une claire aperçu de notre modèle à tout moment. Il utilise une forme fonctionnelle, la structure et l'esthétique comme le moyen d'atteindre la simplicité de la modélisation des réalités complexes.

BIBLIOGRAPHIE

1. M. F. Bonadonna and M. Lisi, « L’adjectif dans la désignation des énergies marines renouvelables » SHS Web of Conferences , 05006 (2016).
2. R.M. Da Silva and J.L.M. Fernandes “Hybrid photovoltaic thermal (PV/T) solar systems simulation with Simulink/Matlab.” Sol Energy, 84(12) 1985–96 (2010).
3. Luque and A. Martí, Increasing the Efficiency of Ideal Solar Cells by Photon Induced Transitions at Intermediate Levels Phys. Rev. Lett. 78, 5014 (1997).
4. A. Martí, L. Cuadra, and A. Luque, Conference Record of the 28th IEEE Photovoltaics Specialists Conference, (2000) Conference Record of the Twenty-Eighth IEEE, New York, USA, , 940–943.
5. A. Luque, A. Martí, N. López, E. Antolín, E. Cánovas, C. Stanley, C. Farmer, L. J. Caballero, L. Cuadra, and J. L. Balenzategui, Appl. Phys. Lett. 87, 083505 (2005).
6. L. Zhao and P. J. Roche “Mice without a functional relaxin gene are unable to deliver milk to their pups” Endocrinology. 140(1), 445-53 (1999)
7. A. Luque, A. Mellor, I. Ramiro, E. Antolín, I. Tobías, and A. Martí “Interband absorption of photons by extended states in intermediate band solar cells.” Sol Energy Mater. Sol Cells 115, 138–44 (2013).
8. Y. Takeda and T. Motohiro “Requisites to realize high conversion efficiency of solar cells utilizing carrier multiplication. ” Sol Energy Mater Sol Cells 94 (8), 1399–405 (2010).
9. A. Martí, E. Antolín, C. R. Stanley, C. D. Farmer, N. López, P. Díaz, E. Cánovas, P. G. Linares, and A. Luque, Phys. Rev. Lett. 97, 247701 (2006).
10. S. Maimon, E. Finkman, G. Bahir, S.E. Schacham, J.M. Garcia, and P.M. Petroff. Applied Physics Letters 73(14), 2003–5 (1998).
11. D. Pan, Y.P. Zeng, and M.Y. Kong, Microelectronic Engineering 43-44, 79–83 (1998).
12. A.W. Bett, S.P. Philipps, S. Essig, S. Heckelmann, R. Kellenbenz, V. Klinger, M. Niemeyer, D. Lackner, et F. Dimroth. Dans Proceedings of 28th European Photovoltaic Solar Energy Conference and Exhibition, (2013).

13. ADEME, Energies et matières renouvelables - Solaire photovoltaïque, Agence de l'environnement et de la maîtrise de l'énergie, 01 12, (2012).
14. J. E. Hirsch, "Electron-Hole Asymmetry is the key to superconductivity." *Int. J. Mod. Phys. B*, 17, 3236 (2003).
15. M. Johnson, D. H. Auston, P. R. Smith, *et al* "Picosecond transient Photocurrents in amorphous silicon." *Phys. Rev. B* 23, 6816 (1981).
16. L. Schmidt-Mende, A. Fechtenkötter, K. Müllen, E. Moons, R. H. Friend, and J. D. MacKenzie, "Self-organized discotic liquid crystals for high efficiency organic photovoltaics." *Science*, , 293, 1119-1122 (2001).
17. M. Martinez, O. de la Rubia, and F. Rubio, "Reference Module in Earth Systems and Environmental Sciences" *Comprehensive Renewable Energy*, 1, 2012, Pages 745-765, , Current as of 18 December 2015.
18. REN21, SEIA/GTM Includes CSP and grid-connected PV. Capacity is reported in MWac Solar, November 2015 .
19. H. Reeves : « Mal de Terre », science ouverte, éditions du seuil, 2003.
20. Jianbo Bai, Sheng Liu , Yuzhe Hao , Zhen Zhang , Meng Jiang , and Yu Zhang "Development of a new compound method to extract the five parameters of PV modules.", *Energy Conversion and Management* 79, 294–303 (2014).
21. G. Hahn, S. Seren, M. Kaes, A. Schonecker, J.P. Kalejs, C. Dube, A. Grenko, and C. Belouet, *Conference Record of the 2006 IEEE 4th World Conference on Photovoltaic Energy Conversion*, volume 1, 972–975(2007).
22. N. Brown, "Solar Junction Breaks Concentrated Solar World Record with 43.5% Efficiency.", *CleanTechnica.com*, janvier 2012.
23. M. A. Green, K. Emery, Y. Hishikawa, W. Warta, and E. D. Dunlop, "Progress in Photovoltaics :Research and Applications" 21(1) , 1–11(2013).
24. V. Fthenakis, *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 8(4), 303–34, (2004).
25. B. O. Regan and M. Grätzel, *Nature* 353, 737–40 (1991).
26. S. Nsengiyumva, « «Propriétés photovoltaïques et électriques de cellules à base de films Langmuir-Blodgett de chlorophylle et de mélanges chlorophylle sulfoquinovosyldiacylglycérol. » thèse présentée à l'université du Québec à Trois-Rivières. avril 1996.

27. J. Lavery, "Quantum tunneling model of a P-N junction in silvaco", Thesis Naval postgraduate school Monterey California. 2008.
28. G. F. Koster, J. O. Dimmock, R. G. Wheeler, and H. Statz, «Properties of the thirty-twopoints groups», Cambridge, MA : MIT Press, 1963..
29. C. Hermann and C. Weisbuch, Phys. Rev. B15, 823 (1977).
30. S.O. Kasap "Optoelectronics and photonics: principles and practices. Upper Saddle River", NJ: Prentice Hall; 2001.
31. N. Arunachalam , A. JohnPeter , and ChangWooLee, "Pressure induced optical absorption and refractive index changes of a shallow hydrogenic impurity in a quantum wire" Physica E 44, 222–228(2011).
32. A. H. Rodríguez, C. Trallero-Ginner, C. A. Duque and G. J. Vázquez J. Appl. Phys. 105, 8–13(2009).
33. S. Daniel, "Modeling radiation effect on a triple junction solar cell using silvaco atlas", Thesis Naval postgraduate school, Monterey, California, 2012.
34. L. Lasne, « Physique et technologie des composants de puissance», université de Bordeaux 1, 2003.
35. M. Grundmann, "The Physics of Semiconductors", Book, Université Leipzig, ©Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2006.
36. F. Lévy, « Physique et technologie des semi conducteurs », PPUR presses Polytechniques (1995).
37. A. Jasenek, U. Rau, V.Nadenau, D.Thiess, and H.W .Schock, Thin Solid Films 361-362, 415-419 (2000).
38. D.L. Morel, , E.L. Stogryn, A.K.Ghosh, , T.Feng, , P.E.Purwin, , R.F.Shaw, , C. Fishman, G.R. Bird, and A.P. Piechowski, J. Phys.Chem., , 88, 923 (1984).
39. D.L. Young, J. Abushama *et al* "A new thin-film CuGaSe₂/Cu(In, Ga)Se₂ bifacial, tandem solar cell with both junction formed simultaneously" 29th IEEE PV Specialists Conference, New Orleans, Louisiana NREL/CP-520-31440. , May 20-04, 2002.
40. T. Wada, S. Nishiwak, Y.Hashimoto and T. Negami, "Effect of PVD condition on quality of Cu (In, Ga)Se₂ Films", 16th European photovoltaic solar Energy Conference, Glasgow, UK, May 2000.
41. E. Bernard, Energie solaire photovoltaïque (volume 1). Paris:Ellipses Editions

- Marketing et l'UNESCO, 1993.
42. S. Duchemin and N. Romain. “Caractérisations des couches minces de CuGaSe_2 ”, Université de Montpellier II, MOCVD, Thèse de doctorat, Science et technique du Languedoc, 1999.
 43. H. Mathieu, « Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques », Masson, 1987.
 44. A. Aissat , A.M. Benahmed, and R. Bestam “Optimizing the Performance of a Solar Cell Based on New Materials » 978-1-4799-7336-1/14(2014) IEEE.
 45. J.C. Rimada *et al.* “Conversion efficiency enhancement of AlGaAs quantum well cells”, *Microelectronics Journal* 38, 513–518 (2007).
 46. H. Mathieu, « Physique des semi conducteurs et de composants électroniques », Cours, 2e Cycle. Ecole d’ingénieurs, 5 édition, Dunod, 2001.
 47. M. A. Green, “Solar cells operating principles technology and system applications”, Prentice-Hall , 1982.
 48. H. Ranschenback, “Electrical out put of shadowed solar array” Handbook USA , 1981.
 49. A.N. Celik and N. Acikgoz, ‘Modelling and Experimental Verification of the Operating Current of Mono-Crystalline Photovoltaic Modules using Four- And Five-Parameter Models, *Applied Energy*, Vol. 84, N°1, pp. 1 - 15, 2007.
 50. J.M. Enrique, , E. Durá n, M. Sidrach-de-Cardona, , and J.M. Andu´ jar, , “Theoretical assessment of the maximum power point tracking efficiency of photovoltaic facilities.” *Solar Energy* 81, 31–38 (2007).
 51. G. Li, V. Shrotriya, Y. Yao, T. Moriarty, K. Emery and Y. Yang, “High-efficiency solution processable polymer photovoltaic cells by self-organization of polymer blends” *Nature materials* 4, 864-868 (2005).
 52. J. Krustok, J. H. Schon, H. Collan, J.Madason, and E.Bucher, *J. Appl. Phys.* 86,364(1999).
 53. A. Geotzberger and C. Hebling, *Solar Energy Materials and Solar Cell* 62 (1) , (2000).
 54. Jianbo Bai, Sheng Liu , Yuzhe Hao , Zhen Zhang , Meng Jiang , and Yu Zhang “Development of a new compound method to extract the five parameters of PV modules.”, *Energy Conversion and Management* 79, 294–303 (2014).
 55. H. Mathieu, « Physique des Semiconducteurs et des Composants Electroniques. » Paris: Masson, 1990.
 56. S. Astier, *Conversion photovoltaïque : du rayonnement solaire à la cellule.*, Technique de l'Ingénieur. Vol. D 3 935. mai 2008.

57. R. Radbeh « Réalisation et caractérisation des Cellules solaires organiques couches composites polymère incluant des nanotubes de carbones » thèse de doctorat, Université Limoges, 2008.
58. F. Zouache, “Etude de la Concentration Solaire sur les Performances des Systèmes Photovoltaïques”, Mémoire magistère, Université Mentouri Constantine. 2009.
59. B.Garcia, Jr, “Indium gallium nitride multijunction solar cell simulation using silvaco atlas” , Thesis Naval postgraduate school Monterey California. 2007.
60. Carrie L. Andre, B.S., M.S.E.E, III-V “Semiconductors on SigeSubstrats for Multi-Junction Photovoltaics”, The Ohio State University. 2004.
61. T. Desrue « Developpement de cellule photovoltaïques à hétérojonction silicium et contact en face arrière » Thèse de Doctorat, l’instistue national des scinces appliquées de Lyon, 2009.
62. F. Nemmar Belhocine « étude et réalisation des Cellules sollaires photovoltaïques à base de matériaux organiques ». Département Electronique - Université Tizi Ouzou.
63. K. Surana. “Towards Silicon Quantum Dot Solar Cells : Comparing Morphological Properties and Conduction Phenomena in Si Quantum Dot Single Layers and Multilayers. ” Thèse de Doctorat, Université de Grenoble, (2011).
64. R. Castagne, J.P. Duchemin, M.Gloannec, and Ch.Rumelhard, Circuits Intégréés en Arséniure de Gallium, Collection technique et scientifique des téeécommunications,Masson, 1989.
65. J. Pankove, Optical processes in semiconductors, Dover publications Inc, 1971.
66. D. Said, Etude de lasers à base des composés semi-conducteurs (InP, GaAs, GaP) , Mémoire magistère, Université El- Hadj Lakhder-Batna , 2011.
67. S. Kurtz, “Multijunction solar cells for conversion of concentrated sunlight to electricity.”, Opt Express ,18(9)A73–8., (2010).
68. M. Cardona *etal*, “Fundamentals of semiconductors: physics and materials properties”, Springer-Verlag, Berlin Heidelbeg New-York , 2001.
69. C. Hermann and C. Weisbuch, Phys. Rev. B15, 823 (1977).
70. C. Ohler, C. Daniels, A. Förster and H. Lüth, Phys. Rev. B58, 7864(1998).
71. R. Houdré, Science et génie des matériaux, 2006 /2007.
72. I. Vurgaftman, J. R. Meyer and L. R. Ram-Mohan, J. Appl. Phys. 89, 5815 (2001).
73. R. Krahné, G. Morello, A. Figuerola, C. George et S. Deka, and M. Liberato « Physical

- properties of elongated inorganic nanoparticles,» *Physics Reports*, 50175-221, (2011).
74. A.P. Alivisatos, « Semiconductor clusters, Nanocrystals, and quantum dots.,» *Science* 271. , n° 116 February (1996).
 75. L. Bouzarène , L. Sfaxi , M. Baira ,H. Maaref , and C. Bru-Chevallier «Power density and temperature dependent multi-excited states in InAs/GaAs quantum dots», *J.Nanopart Res .* 13, 257(2011).
 76. S.L. Chang, “Physics of optoelectronic devices”, N.Y. Wiley (1995).
 77. H. P. Rocksby, «The colour of selenium ruby glasses.,» *J. Soc. Glass. Techn*,16,. 171-181(1932).
 78. Y. Arakawa and H. Sakaki, « Multidimensional quantum well laser and temperature dependence of its threshold current,» *Appl. Phys. Lett.* 40, 939, 1982).
 79. D. Bimberg *et al* «Quantum Dot Heterostructures »Wiley, Chichester, 1998.
 80. D. Pan, E. Towe and S. Kennerly, "Tuning of conduction intersublevel absorption ... quantum dot infrared photodetectors," *Electron Lett.* 34, 1883 (1998).
 81. K. Imamura, Y. Sugiyama, Y. Nakata, S. Muto, and N. Yokoyama, *Jpn. J. Appl. Phys.*, Part 2 34, L1445 (1995).
 82. C.H. Bennett, G. Brassard, C. Crépeau, R. Jozsa, A. Peres, and W. K. Wootters «Teleporting an unknown quantum state via dual classical and Einstein Podolsky-Rosen channels,» *Phys. Rev. Lett.* 70, 1895 – 1899 (1993).
 83. CS.M. Hubbard, C.D. Cress, C.G. Bailey, S.G.Bailey, D.M. Wilt, and R.P. Raffaele *Appl. Phys. Lett.* 92, 123512 (2008) .
 84. A. Marti, E. Antolin, C. R. Stanley, C. D. Farmer, N. Lopez, P. Diaz, E. Canovas, P. G. Linares, and A. Luque *Phys. Rev. Lett.* 97, 247701 (2006).
 85. N. N. Ledentsov, *Semicond. Sci. Technol.* 26, (2011) 014001.
 86. P. Michler,« Single quantum dots » Springer, 2003.
 87. Y. e. al., “Improved efficiency of InAs/GaAs quantum dots solar cells by Si-doping” *Solar Energy Materials and Solar Cells* 113, 144–147(2013).
 88. A. Scherer, and H.G. Craighead, *Appl. Phys. Lett.*, 49 1284 (1986).
 89. M. Volmer, *Z. Phys. Chim.* 119, 277(1926).
 90. Jan H. Van Der Merwe and E. Bauer, *Physical Review B*, 39 3632(1989).M. Bayer *at al*, “Hidden symmetries in the energy levels of excitonic 'artificial atoms' ” *Nature* 405, 923 (2000).

91. Ni Chauvin. « Spectroscopie de la boîte quantique unique dans les systèmes InAs sur InP et InAs sur GaAs émettant à 1.3 μm et 1.5 μm : application aux sources localisées. » Thèse de Doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, (2006).
92. Charles Cornet « Propriétés électroniques, optiques et dynamiques de boîtes quantiques auto-organisées et couplées sur substrat InP », thèse devant l'Institut National des Sciences Appliquées de Rennes (22 févr. 2007) .
93. M. Sugawara, "Self-Assembled InGaAs/GaAs Quantum Dots, Semiconductors and Semimetals" ,Vol. 60. (Toronto: Academic, 1999).
94. M. P.Y.Yu, « Fundamentals of Semiconductors Springer» 2010.
95. M. Munsch, «Etude du régime de Purcell pour une boîte quantique dans une microcavité semiconductrice,» Phd thesis (2009).
96. E. 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).
97. MM. Baira, «Propriétés optiques et modélisation des structures à base de boîtes quantiques pour l'émission à 1.3 μm .» Thèse de Doctorat, Institut National des Sci- sciences Aappliquées de Lyon, (2009).
98. Y. Zhang, A. Mascarenhas, H.P. Xin, and C.W. Tu, , «Valence-band splitting shear deformation potential of dilute GaAs_{1-x}N_x alloys,» Phys. Rev., 61, n° 7, 4433-4436 (2000).
99. S.-H. Wei and A. Zunger, Phys. Rev. B 60, 5404 (1999).
100. L. R. C. Fonseca, J. L. Jimenez and J. P. Leburton "Electronic coupling in InAs/GaAs self- assembled stacked double-quantum-dot systems", Phys. Rev. B 58, 9955 (1998).
101. P. Pfeffer, I. Gorczyca, and W. Zawadzki, Solid State Commun. 51, 179 (1984).
102. M. A. Cusack, P. R. Briddon, and M. Jaros "Absorption spectra and optical transitions in InAs/GaAs self-assembled quantum dots", Phys. Rev. B 56, 4047 (1997).
103. V. Gorge. «Caractérisations de matériaux et tests de composants des cellules solaires à base des nitrures des éléments III-V», thèse de doctorat université paris sud 11, 2012.
104. A. AISSAT : «Modélisation et Simulation du gain optique et du courant de Seuil d'un laser à puits quantique contraint à base de Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs»,Thèse de doctorat, Ecole Nationale Polytechnique, 2007.
105. K. Köksal, B. Gönül, and M. Oduncuoğlu : «Critical Layer Thickness of GaIn(N)As(Sb)

- QWs on GaAs and InP Substrates for (001) and (111) Orientation », *The European Physical Journal B* , 69, 211-218(2009).
106. C. Monier, "Propriétés optiques de puits quantiques InGaAs/GaAs élaborés sous Jet moléculaire" Thèse de Doctorat de l'Université Blaise Pascal Clermont II (1995).
 107. P. Disseix, "Spectroscopie optique d'hétérostructures III-V à base d'indium: propriétés optiques et électroniques", Rapport d'Habilitation à Diriger des recherches, Université Blaise Pascal Clermont-Ferrand II (2003).
 108. A. Benahmed, A. Aissat, and M. A. Benammar « Optical Transitions in Quantum Dots » *International Journal of Physics*, , 2, 109-111 (2014).
 109. E. Dypuy, « Croissance et spectroscopie de boîtes quantiques diluées d'InAs/InP(001) pour des applications nanophotoniques à 1,55 μm », PhD thesis, Ecole Centrale de Lyon et de l'Université de Sherbrooke, 2009.
 110. J. Brault, « Croissance auto-organisée de fils et boîtes quantiques d'InAs/InP(001) pour composants optoélectroniques », thèse de l'Ecole Centrale de Lyon, 2000.
 111. H. Yang, P. Ballet and G. J. Salamo, "Formation of quantum wires and dots on InP(001) by As/P exchange" *J. Appl. Phys.* 89,, 7871–7874 (2001).
 112. T.P.N Nguyen. "Fabrication of nanostructured Silicon substrates for the development Superomniphonic surfaces and surface assisted laser desorption/ionization mass spectrometry analysis of biomolecules" Thèse de doctorat ,university Lille1(2011).
 113. M.S. Gudiksen ,L.J. Lauhon ,J. Hang, D.C. Smith , and C.M. Lieber." Growth of nanowire superlattice structures of nanoscale phonic and electronics " *Nature* 415617-620(2002).
 114. H. Mathieu :« Physique des Semiconducteurs et des Composants Electroniques», 6^{eme} édition, pp 616-62 Paris, 2009.
 115. COMSOL Multiphysics Model Library copyright 1998-2008 by COMSOL AB.
 116. RF Module User's Guide. 1998-2012 COMSOL-Protected by U.S. Patents 7,519,518;7, 596, 474; and 7, 623, 991. Patents pending.
 117. R. Chau, B. Doyle, S. Datta, J. Kavalieros and K. Zhang, "Integrated nanoelectronics For the future »", *Nature Materials* 6 810 (2007).
 118. A. Abdelali: «Rôle du rayonnement dans l'élaboration et l'étude nanoagrégats semi-conducteur de ZnS », mémoire de magister, université de Mentouri, Constantine.
 119. P. M. Petroff, K. H. Schmidt, G. Medeiros-Ribeiro, A and J. Kotthaus, "Size quantization and zero dimensional e in self assembled semiconductor quantum

- dots” *Jpn. J. Appl Phys.* 36, Part 1, 4068 (1997).
120. H. R. Gutiérrez, M. A. Cotta, J. R. R. Bortoleto and M. M. G. de Carvalho. “ Role of group V exchange on the shape and size of InAs/InP self assembled nanostructures”. *Appl. Phys.* 92, 12, 7523–7526 (2002).
121. F. Patella, S. Nufri, M. Fanfoni, E. Placidi, A. Sgarlata, and A. Balzarotti, “Tracing the two- to three-dimensionnal transition in the InAs/GaAs(001), heteroepitaxial growth”. *Phys.Rev.B* 67, 205308 (2003).
122. J. M. Gérard, J.B. Génin, J. Lefebvre, J.M. Moison, N. Lebouché, and F. Barthe. *J. Crystal Growth*, 150 (1995) 351.
123. C. Charles: «Propriétés électroniques, optiques et dynamiques de boites quantiques auto-organisées et couplées sur substrat InP », thèse doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Rennes, 27 juin 2006.
124. U. Banin, Y. Cao, D. Katz and O. Millo, “Identification of atomic-like electronic states in indium arsenide nanocrystal quantum dots”, *Nature* 400, 542 (1999).
125. D. Gammon, E. S. Snow and D. S. Katzer, “Excited state spectroscopy of excitons in single quantum dots” *Appl. Phys. Lett.* 67, 2391(1995).
126. D. Rekioua, and E. Matagne, “Optimization of Photovoltaic Power Systems modelization, Simulation and Control”, *Green Energy and Technology*, Springer (2012) p 284.
127. S. Lalouni, and D. Rekioua, Modeling and simulation of a photovoltaic system using fuzzy logic controller 2009, *Proceedings-International conference on development in system Engineering*, DESE(2009).
128. F. Shafer, J.P. Reithmaier and A. Forchel, *Appl. Phys. Lett.* 74, 2915 (1999).
129. A. Martí, L. Cuadra, and A. Luque, “Quantum dot intermediate band solar cell,” in *Proc. 28th IEEE Photovolt. Specialists Conf.*, Sep. (2000) pp. 940-943.
130. Q. Shao, A. A. Balandin, A. I. Fedoseyev, and M. Turowski, “Intermediate band solar cells based on quantum dot supracrystals,” *Appl. Phys. Lett.*, vol. 91, no. 16163503-1_163503-3, (2007).
131. U. Sikder and A. Haque, “Optimization of Idealized Quantum Dot Intermediate Band Solar Cells Considering Spatial Variation of Generation Rates”, *IEEE Access*, 1 363-370 (2013).
132. A. Benahmed, A. Aissat A. Benkouider and J. P. Vilcot « Modeling and simulation of InAs/GaAs Quantum dots for solar cell applications » *IJLEO* 127 (7), 3531-3534 (2016).

133. M. Grundmann, O. Stier and D. Bimberg, "InAs/GaAs pyramidal quantum dots: strain distribution, optical phonons, and electronic structure", *Phys. Rev. B* 52, 11969 (1995).
134. M. Grundmann, R. Heitz, N. Ledentsov, O. Stier, D. Bimberg, V. M. Ustinov, P. S. Kop'ev, Zh. I. Alferov, S. S. Ruvimov, P. Werner, U. Gösele and J. Heydenreich, "Electronic structure and energy relaxation in strained InAs/GaAs quantum pyramids", *Super lattice & Microstructure* 19, 81(1996).
135. I. E. Itskevich, M. S. Skolnick, D. J. Mowbray, I. A. Trojan, S. G. Lyapin, L. R. Wilson, M. J. Steer, M. Hopkinson, L. Eaves and P. C. Main, "Excited states and selection rules in self-assembled InAs/GaAs quantum dots", *Phys. Rev. B* 60, R2185 (1999).
136. N. Oleksiy, "Simulation, fabrication et analyse de cellules photovoltaïques à contacts arrières interdigités", Institut national des sciences appliquées de Lyon (2005).
137. A. Aissat, M. El Bey, R. Bestam, and J.P. Vilcot, "Modeling and simulation of $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}/\text{InP}$ quaternary structure for photovoltaic", *Inter. Journal of Hydrogen Energy* 39 15287 (2014).
138. A. Luque, S. Hegedus "Handbook of photovoltaic science and engineering", EnglaWiley (2003).
139. I. Vurgaftman, J. R. Meyer and L. R. Ram-Mohan, "Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys", *J. Appl. Phys.* 89 5815-5875(2001).
140. P. M. Petroff, K. H. Schmidt, G. Medeiros-Ribeiro, A. Lorke and J. Kotthaus, "Size quantization and zero dimensional effects in self assembled semiconductor quantum dots", *Jpn. J. Appl. Phys.* 36, Part 1, 4068. (1997).
141. U. Banin, Y. Cao, D. Katz and O. Millo, "Identification of atomic-like electronic states in indium arsenide nanocrystal quantum dots", *Nature* 400, 542(1999).
142. G. Vanessa: "Caractérisations de matériaux et tests de composants des cellules solaires à base des nitrures des éléments III-V", thèse de Doctorat, Université Paris-Sud 11,(2012).
143. C. L. Garrido-Alzar, "Algorithm for Extraction of Solar Cell Parameters from I-V Curve Using Double Exponential Model", *Renewable Energy*, 10, No. 213, 125-128 (1997).

144. U. Rau, P. O. Grabitz, and J. H. Werner, "Resistive limitations to spatially inhomogeneous electronic losses in solar cells", *Appl. Phys. Lett.*, 85, No.24, 6010-6012, (2004).
145. K.H. Hussein, I.Muta, T.Hoshino and M. Oskada, "Maximum photovoltaic power tracking: an algorithm for rapidly changing atmospheric conditions" *IIIE Pro-Gener. Trans.Distrib*, Vol. 142, no. 1, pp 59-64 January 1995.
146. A. Askarzadeh, and A. Reza zadeh "Parameter identification for solar cell models using harmony search-based algorithms ", *Solar Energy*, 86, Issue 11, November, 3241-3249 (2012).
147. M. M. Rashidi. "A study of non-newtonian flow and heat transfer over a non-isothermal wedge using the homotopy analysis method" *Chemical Engineering Communications*, 199, Issue 2, (2012).
148. Hachana et al. Comparison of different metaheuristic algorithms for parameter identification of photovoltaic cell/module 09/2013.
149. F. Dkhichi, B. Oukarfi, A. Fakkar, and N. Belbounaguia "Parameter identification of solar cell model using Levenberg–Marquardt algorithm combined With simulated annealing" *Solar Energy* 110, 781–788 (2014).
150. F.Dkhichi and B.Oukarfi "Determination of Solar Cell Parameters using Neural Network Trained by Steepest Descent Algorithm" *www.ijarcse.com*, 4, Issue 8 (2014).
151. F. Dkhichi and B.Oukarfi "Conjugate gradient and steepest descent training algorithms in determination of solar cell Parameters" *International Journal of Emerging Trends in Engineering and Development* 5 Issue 4, (2014).
152. F.Dkhichi and Benyounes Oukarfi "Neural Network Training By Gradient Descent Algorithms: Application on the Solar Cell" *IJRSET* 3, Issue 8, (2014).
153. F. Dkhichi and B. Oukarfi "Levenberg-Marquardt and Conjugate Gradient Training Algorithms of Neural Network for Parameter Determination of Solar Cell" *IJIAS* 9 1869-1877 (2014).
154. A. Cheknane, T. Aernouts, and M. Merad Boudia "Modeling and simulation of organic bulk heterojunction solar cells" *International Conference for Renewable Energies and Sustainable Development ICRES-07*, 2007.
155. K. M. Coakley and M. D. McGehee "Conjugated Polymer Photovoltaic Cells", *Chem. Mater.*, 16 (23), 4533–4542 (2004).

156. N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, "Solid State Physics", Holt, Rinehart and Winston, New York, USA (1976), pp. 1–28.
157. W. Ma, C. Yang, X. Gong, K. Lee, and A. J. Heeger "Thermally stable, efficient polymer solar cells with nanoscale control of the interpenetrating network morphology" *Adv. Funct. Mater.*, 15, 1617 (2005).
158. J. Frenkel, "Some Remarks on the Theory of the Photoelectric Effect" Physical Review 38, 309 (1931).
159. I. G. Hill, A. Kahn, Z. G. Soos, and J. R. A. Pascal, *Chemical Physics Letters* 327, 181-188 (2000).
160. A. K. Ghosh and T. Feng, *Journal of Applied Physics* 49, 5982-5989 (1978).
161. C. Nasr, T. Taleb, R. M. Leblanc, and S. Hotchandani, *Applied Physics Letters* 69, 1823-1825 (1996).
162. D. Di, I. Perez-Wurfl, A. Gentle, D-Ho Kim, X. Hao, L. Shi, G. Conibeer, and M. A. Green, *Nanoscale Res. Lett.* 5, 1762 (2010).
163. D.L. King, J.A. Kratochvil, and W.E. Boyson. "Photovoltaic array performance model". Sandia National Laboratories, SAND2004-3535; 2004.
164. T.U. Townsend "A Method for Estimating the long term performance of direct_coupled photovoltaic systems" MS thesis, Solar Energy Laboratory, University of Wisconsin, Madison, 1989.
165. M. Chegaar, Z.Ouennoughi, and F. Guechi, "Extracting dc parameters of solar cells under illumination", *Vacuum*, 75, 367-372 (2004).
166. G. A. Gow and C. D. Maning, "Development of photovoltaic array model for use in power-electronics simulation studies", *IEE Proc. Electr. Power Appl.*, 146, No. 2 (1999).