

UNIVERSITE DE BLIDA 1

Faculté des Sciences

Département de Physique

Thèse de doctorat LMD

Spécialité physique fondamentale et appliquée

**NOUVEAUX ABSORBEURS POUR CELLULES SOLAIRES A HAUT
RENDEMENT**

Par

ABDELMOUMENE LAIDOUCI

Soutenu publiquement le 15/01/2022 devant le jury composé de :

M. DERBAL	Professeur, U. de Blida1	Président
A. AISSAT	Professeur, U. de Blida1	Directeur de thèse
B. REKIK	Professeur, U. de Blida1	Examinateur
K. RAHMOUN	Professeur, U. de Tlemcen	Examinatrice
B. DENNAI	Professeur, U. de Bechar	Examinateur
J.P VILCOT	DR, IEMN, U. de Lille1	Invité

Remerciements

Je remercie Allah le tout-puissant de m'avoir donné le courage, la patience et la volonté de mener à bien ce travail.

Ce travail de thèse a été effectué au sein de laboratoire de recherche (LATSI) de l'université de Blida 1, en collaboration avec le laboratoire (IEMN) de l'université de Lille1.

Je tiens à témoigner ma profonde reconnaissance à monsieur Aissat Abdelkader professeur à l'université de Blida 1, pour ses conseils, son soutien et son aide ainsi que pour la grande confiance qu'il m'a témoignée tout au long de ce travail.

Je remercie monsieur Jean Pierre VILCOT, directeur de recherche (IEMN-CNRS) à l'université des sciences et technologies de Lille1, d'avoir contribué à l'aboutissement de ce travail.

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

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

Monsieur REKIK Brahim, professeur à l'université de Blida1.

Madame RAHMOUN Khadidja, professeur à l'université de Tlemcen.

Monsieur DENNAI Benmoussa, professeur à l'université de Bechar.

Je tiens à remercier tous mes professeurs de la faculté des sciences et particulièrement les équipes des laboratoires LPTHIRM et LASICOM de l'université de Blida1.

Je remercie également le Pr. NACER Saïd, le Pr. SIDOUMOU Mohamed et le doctorant BENALLAL Youcef pour leurs encouragements et pour avoir, d'une manière ou d'une autre à contribuer à cette étude.

Enfin, mes vifs remerciements s'adressent particulièrement ceux qui m'ont encouragé et soutenu durant toutes ses années de thèse à toute ma famille.

لسنوات عديدة، أظهر البحث العلمي أهمية استخدام النماذج العددية والحاسوبية باستخدام برامج قادرة على نمذجة ومحاكاة كفاءة وأداء الأنظمة الفيزيائية المختلفة بما في ذلك تطبيقها بالتميز بالجوانب الفيزيائية والكيميائية للمواد الجديدة، مما يجلب المزيد من المنفعة الاقتصادية والاستثمار في البحث العلمي. الهدف الرئيسي من هذه الرسالة هو محاكاة خلايا كهروضوئية التي تحتوي على مواد جديدة (Zn-IV-N₂). ما دفعنا لاستخدامها هي مواد سوق جيدة لأنها تحتوي على مواد ذات عناصر وفيرة في الأرض وغير سامة وغير مكلفة مع خصائص الكهروضوئية مثيرة للاهتمام. جعلت الخصائص الفيزيائية المختلفة لمركبات (Zn-IV-N₂) واعتمادها على تركيب هدف هذا العمل. تمت دراسة خلايا شمسية تحتوي على Zn (Sn، Ge) N₂ ومقارنتها وتحسينها مع النتائج النظرية المتاحة باستخدام برامج مختلفة مثل : SCAPS-1D و SILVACO-TCAD .

Résumé

Pendant de nombreuses années, la recherche scientifique a montré l'importance de l'utilisation des modèles numériques et informatiques en utilisant des programmes capables de modéliser et simuler l'efficacité et les performances des différents systèmes physiques comprenant leur application permet de prévoir les aspects physico-chimiques des nouveaux matériaux, ce qui apporte un avantage économique plus d'investissement dans la recherche scientifique. L'objectif principal de ce travail de thèse vise à la simulation des cellules photovoltaïques à base de nouveaux matériaux (Zn-IV-N₂). L'utilisation de ces matériaux de bon marché et aussi le fait qu'ils sont constitués d'éléments abondants, non toxiques et peu coûteux et aussi des caractéristiques optoélectroniques intéressantes. Les différentes propriétés physiques (optiques, mécaniques et électroniques) des composés Zn-IV-N₂ et de leur dépendance à la composition ont fait l'objectif de ce travail. De nombreuses structures de cellules solaires à base de nouveau matériaux Zn (Sn, Ge) N₂ ont été étudiées, comparées et optimisées avec des résultats disponibles en utilisant les logiciels SCAPS-1D et SILVACO-TCAD.

Abstract

For many years, scientific research has shown the importance of using numerical and computer models by using programs capable of modeling and simulating the efficiency and performance of different physical systems including their application allows to predict the physico-chemical aspects of new materials, which brings more economic benefit from investment in scientific research. The main objective of this thesis work is to simulate photovoltaic cells based on new materials (Zn-IV-N₂). The use of these inexpensive materials and also the fact that they are made up of abundant, non-toxic, and inexpensive elements and also interesting optoelectronic characteristics. The different physical properties (optical, mechanical, and electronic) of Zn-IV-N₂ compounds and their dependence on the composition made the objective of this work. Many solar cell structures based on new Zn (Sn, Ge) N₂ materials have been studied, compared, and optimized with available results using SCAPS-1D and SILVACO-TCAD software.

TABLE DES MATIERES

LISTE DES ILLUSTRATIONS, GRAPHIQUES ET TABLEAUX	9
LISTE DES SYMBOLES ET DES ABREVIATIONS.....	14
INTRODUCTION GENERALE	17
REFERENCES	19
CHAPITRE 1 ETAT DE L'ART	20
1.1 Introduction.....	20
1.1.1 Contexte et objectifs de travail.....	20
1.1.2 La question de la complexité de la réalisation des cellules solaires à base de semiconducteurs III-V par rapport aux besoins industriels	20
1.1.3 Technologies photovoltaïques	22
1.1.4 Potentialités des nouvelles propriétés physiques des matériaux $ZnSnN_2$	25
1.1.5 Les aspects historiques du $ZnSnN_2$	26
1.1.6 La structure cristalline de $ZnSnN_2$	29
1.2 Potentialités des nouvelles propriétés physiques des matériaux $ZnGeN_2$ et $ZnSn_xGe_{1-x}N_2$.....	32
1.3 Spectre solaire	36
1.4 Fonctionnement d'une cellule photovoltaïque	38
1.5 Caractéristiques I-V et performance d'une cellule photovoltaïque.....	39
1.6 Le rendement quantique	42
1.7 Facteurs limitant le rendement de conversion	44
1.8 Les phénomènes de recombinaison	44
1.8.1 Les recombinaisons Auger	45
1.8.2 Les recombinaisons Shockley-Read-Hall	45
1.8.3 Les recombinaisons radiatives	46
1.9 Différentes technologies photovoltaïques	46
1.9.1 Le silicium.....	46
1.9.1.1 Le silicium monocristallin	47
1.9.1.2 Le silicium multicristallin (mc-Si)	47
1.9.1.3 Le silicium amorphe (a-Si)	48
1.9.2 Les technologies couches minces.....	49
1.9.3 Les technologies multi-jonctions à haut rendement	50
1.9.4 Les cellules organiques	51
1.9.5 Les cellules à base de colorant ou cellules Graëtzl	51
1.9.6 Les cellules à base de nanostructures	51
1.10 Conclusion	54

1.11 Références	55
CHAPITRE 2 PHYSIQUE DES CELLULES SOLAIRES	62
2.1 Introduction	62
2.1.1 Semiconducteur intrinsèque.....	63
2.1.2 Semiconducteur extrinsèque	69
2.1.2.1 Semiconducteur dopé de type n (Donneur).....	69
2.1.2.2 Semiconducteur dopé de type p (Accepteur)	69
2.1.2.3 Semiconducteur dégénéré.....	70
2.1.2.4 Semiconducteur compensés.....	70
2.2 La jonction p-n.....	71
2.2.1 La jonction p-n à l'équilibre thermodynamique.....	71
2.2.2 La jonction p-n hors équilibre (polarisée par un générateur de tension).....	75
2.2.3 Décalage de bandes dans l'hétérojonction.....	77
2.3 La densité du photocourant totale	79
2.4 Les interactions rayonnement - matière	81
2.4.1 Propriétés optiques.....	83
2.4.1.1 Indice de réfraction et coefficient d'extinction	83
2.4.1.1.1 Indice de réfraction (n).....	83
2.4.1.1.2 Coefficient d'extinction (k)	83
2.4.1.2 L'absorption	84
2.4.1.2.1 Pour le ZnSnN ₂ et le ZnGeN ₂	84
2.4.1.2.2 Pour le ZnSn _x Ge _{1-x} N ₂	85
2.4.1.3 La réflexion optique.....	86
2.4.1.4 La transmission optique.....	86
2.4.1.4.1 Pour le ZnSnN ₂ et le ZnGeN ₂	87
2.4.1.4.2 Pour le ZnSn _x Ge _{1-x} N ₂	87
2.5 L'effet de la température sur l'absorption	88
2.6 Propriétés mécaniques	92
2.6.1 Paramètre de maille.....	92
2.6.2 Désaccord paramétrique	92
2.6.2.1 Pour un substrat du GaN.....	94
2.6.2.2 Pour un substrat du Si _{1-y} Ge _y	94
2.6.3 L'épaisseur critique.....	95
2.6.3.1 Pour un substrat du GaN.....	96
2.6.3.1 Pour un substrat du Si _{1-y} Ge _y	97
2.7 Propriétés électroniques.....	97
2.7.1 La bande interdite	97
2.7.2 Mobilité des porteurs dans le ZnSnN ₂	99
2.7.3 Décalage de bandes entre le GaN et l'alliage ZnSn _x Ge _{1-x} N ₂	102
2.7.4 Longueur de diffusion	105
2.7.5 Pertes par recombinaison.....	105
2.8 L'outils de simulation.....	106

2.8.1 Présentation du logiciel de simulation SCAPS-1D	106
2.8.1.1 Principe de la simulation numérique	107
2.8.2 Présentation du logiciel de simulation SILVACO-TCAD	108
2.9 Conclusion	112
2.10 Références	113
CHAPITRE 3 SIMULATIONS DES CELLULES SOLAIRES A BASE DE ZnSnN₂ A L'AIDE DE LOGICIEL SCAPS-1D.....	120
3.1.1 Introduction.....	120
3.1.2 Structure des cellules solaires CdS/ZnSnN₂.....	120
3.1.3 Résultats et discussions.....	121
3.1.3.1 Effets de l'épaisseur de l'absorbeur ZnSnN ₂ sur la cellule solaire à couches minces.....	121
3.1.3.2 Effets de l'épaisseur de la couche tampon de CdS sur la cellule solaire ZnSnN ₂ à couche mince.....	124
3.1.3.3 Effets de la température sur les cellules solaires à couches minces en ZnSnN ₂	125
3.1.4 Conclusion	128
3.2.1 Simulation des cellules solaires CuCrO₂/ ZnSnN₂	129
3.2.2 Structure des cellules solaires CuCrO₂/ ZnSnN₂	129
3.2.3 Résultats et discussions.....	131
3.2.3.1 Les effets de l'épaisseur sur les paramètres photovoltaïques	131
3.2.3.2 L'optimisation de la température	133
3.2.3.3 Effets des résistances.....	135
3.2.3.4 Effets de la densité des défauts dans les cellules solaires à couche mince en ZnSnN ₂	136
3.2.3.5 Effets de la couche n-Si sur les cellules solaires à couche mince en ZnSnN ₂	138
3.2.4 Conclusion	141
3.3.1 Simulation des cellules solaires ultramine ZnSnN₂ /Si	141
3.3.2 Structure des cellules solaires ultramine ZnSnN₂ /Si.....	142
3.3.3 résultats et discussions.....	143
3.3.3.1 Les effets de l'épaisseur sur les paramètres photovoltaïques	144
3.3.3.2 L'optimisation de la température	146
3.3.3.3 Effet de la résistance en série.....	148
3.3.3.4 Effets de la densité des défauts dans la cellule solaire ZnSnN ₂ à couche ultra-mince.....	149
3.3.4 Conclusion	153
3.4 Références	154
CHAPITRE 4 SIMULATIONS DES CELLULES SOLAIRES A BASE DE ZnSn_xGe_{1-x}N₂ ET DE ZnGe_xSn_{1-x}N₂ A L'AIDE DE LOGICIEL SILVACO TCAD ...	156

4.1.1 Introduction.....	156
4.1.2 Structure des cellules solaires p-i-n à base de $ZnSn_xGe_{1-x}N_2$	156
4.1.3 Résultats et discussions.....	157
4.1.3.1 L'effet de la concentration d'étain	158
4.1.3.2 L'effet de la température de fonctionnement	164
4.1.3.3 L'effet de nombre de puits quantiques (N périodes)	165
4.1.4 Conclusion	166
4.2.1 Simulation des cellules solaires p-i-n à base de $ZnGe_xSn_{1-x}N_2$	168
4.2.2 Structure des cellules solaires p-i-n à base de $ZnGe_xSn_{1-x}N_2$	168
4.2.3 Résultats et discussions.....	169
4.2.3.1 L'effet de la température de fonctionnement	169
4.2.4 Conclusion	172
4.3 Références	173
CONCLUSION GENERALE	176
PUBLICATIONS ET CONFERENCES	178
ANNEXE A	180
ANNEXE B	184
REFERENCES	188

LISTE DES ILLUSTRATIONS, GRAPHIQUES ET TABLEAUX

Chapitre 01

Figure1.1 : L'abondance des éléments dans la croûte terrestre en fonction de leur numéro atomique (Z)	20
Figure1.2 : Capacité mondiale de l'énergie solaire photovoltaïque par certains pays et régions	21
Figure1.3 : Génération d'une paire électron-trou par absorption d'un photon	22
Figure1.4 : Graphique du NREL (National Renewable Energy Laboratory) de l'efficacité des cellules solaires au fil des ans	23
Figure1.5 : Cellule solaire à quatre jonctions avec un record mondial d'efficacité à 46.1%	24
Figure1.6 : Diagramme de la bande interdite et le paramètre de maille de la structure wurtzite pour : les III-N et les Zn-IV-N ₂ et leurs alliages	26
Figure1.7 : (a) Bande interdite en fonction de la concentration de porteurs, (b) évaluation de la bande interdite et du coefficient d'absorption du ZnSnN ₂ par des mesures optiques	27
Figure1.8 : Le spectre solaire AM1.5 et du coefficient d'absorption, comparant l'évaluation du coefficient d'absorption du ZnSnN ₂ avec d'autres matériaux	28
Figure1.9 : Structure cristalline orthorhombique de ZnSnN ₂ dans différentes directions	29
Figure1.10 : Structure cristalline hexagonale de ZnSnN ₂ dans différentes directions	30
Figure1.11 : Effet Burstein-Moss	31
Figure1.12 : Les enthalpies de formation calculées pour les alliages In _x Ga _{1-x} N et ZnSn _x Ge _{1-x} N ₂	35
Figure1.13 : Normes et conditions de mesure du spectre d'énergie lumineuse, émise par le soleil, notion de la convention Air Mass	36
Figure1.14 : Calcul de l'air masse par rapport à la Hauteur (H)	37
Figure1.15 : Variation spectrale de la puissance émise par le soleil	37
Figure1.16 : Schéma de principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque conventionnelle, (a) structure de la cellule et (b) diagramme des bandes d'énergie	38
Figure1.17 : Schéma électrique réel de la cellule solaire	39
Figure1.18 : (a) La caractéristique I-V d'une cellule à l'obscurité et sous éclairage, (b) les caractéristiques I(V) et P(V) délivrées par la cellule en fonction de la tension de polarisation	40
Figure1.19 : Schéma électrique réel de la cellule solaire à deux diodes	41
Figure1.20 : Rendement quantique externe d'une cellule photovoltaïque	43
Figure1.21 : Les différentes pertes existent dans les cellules solaires	44
Figure1.22 : Schéma de la recombinaison Auger	45
Figure1.23 : Schéma de la recombinaison Shockley-Read-Hall	45
Figure1.24 : Schéma de la recombinaison radiative	46
Figure1.25 : Silicium monocristallin	47
Figure1.26 : Silicium multicristallin	48
Figure1.27 : Cellule du silicium amorphe en couche mince	48
Figure1.28 : Structure d'une cellule standard	49
Figure1.29 : Évolution de la densité d'états avec le niveau de confinement quantique	53
Figure1.30 : Classification des principales technologies de cellule solaire PV	54

Chapitre 02

Figure2.1 : Schématisation des structures de bandes électroniques des conducteurs, isolants et semiconducteurs	62
Figure2.2 : Transitions électroniques interbandes dans les semiconducteurs. a) un SC à gap direct. b) un SC à gap indirect	63
Figure2.3 : Effet de la concentration d'étain sur la masse effective d'électron de l'alliage ZnSn _x Ge _{1-x} N ₂	65
Figure2.4 : Effet de la concentration d'étain sur la masse effective des trous de l'alliage ZnSn _x Ge _{1-x} N ₂	65
Figure2.5 : Effet de la température sur les densités d'états pour les deux bandes BC et BV pour le cas du ZnSnN ₂	66
Figure2.6 : Effet de la température sur les densités d'états pour les deux bandes BC et BV pour le cas du ZnGeN ₂	66

Figure2.7 : Effet de la concentration d'étain sur la bande de conduction pour l'alliage $ZnSn_xGe_{1-x}N_2$	67
Figure2.8 : Effet de la concentration d'étain sur la bande de valence pour l'alliage $ZnSn_xGe_{1-x}N_2$	67
Figure2.9 : Effet de la température sur la densité intrinsèque des porteurs pour le cas du $ZnSnN_2$	68
Figure2.10 : Effet de la température sur la densité intrinsèque des porteurs pour le cas du $ZnGeN_2$	68
Figure2.11 : Une jonction (p-n) à l'équilibre thermodynamique.....	71
Figure2.12 : La variation de V_0 en fonction de la densité de dopage N_d pour une homojonction de $ZnSnN_2$ à 300K.....	73
Figure2.13 : La variation de w en fonction de la densité de dopage N_d pour une homojonction de $ZnSnN_2$ à 300K	74
Figure2.14 : La variation de E_{max} en fonction de la densité de dopage N_d pour une homojonction de $ZnSnN_2$ à 300K.....	74
Figure2.15 : La variation de V_{tot} ($V_0 - V$) en fonction de la tension de polarisation V et de la densité de dopage.....	76
Figure2.16 : La variation de la largeur de la zone de charge d'espace w sous polarisation en fonction de la tension de polarisation V et de la densité de dopage.....	76
Figure2.17 : La variation de champ électrique sous polarisation en fonction de la tension de polarisation V et de la densité de dopage.....	77
Figure2.18 : Diagramme des énergies pour un matériau. q est la charge élémentaire, V le potentiel électrostatique pouvant régner dans le matériau, χ l'affinité électronique, ϕ le travail de sortie, et φ le potentiel d'ionisation.....	78
Figure2.19 : Diagramme de bande d'énergie pour une hétérojonction, comme compris par la règle d'Anderson.....	79
Figure2.20 : Les interactions rayonnement/matière.....	82
Figure2.21 : (a) Spectres d'indice de réfraction de $ZnSnN_2$ et $ZnGeN_2$, (b) les coefficients d'extinction de $ZnSnN_2$ et $ZnGeN_2$	84
Figure2.22: Coefficients d'absorption α en fonction de la longueur d'onde λ pour les matériaux $ZnSnN_2$ et $ZnGeN_2$	85
Figure2.23 : Coefficients d'absorption α en fonction de la longueur d'onde de la structure $ZnSn_xGe_{1-x}N_2$	85
Figure2.24 : La variation du coefficient de réflexion et du coefficient de transmission en fonction des longueurs d'ondes pour : (a) $ZnSnN_2$ et (b) $ZnGeN_2$	87
Figure2.25 : La variation du coefficient de réflexion et du coefficient de transmission en fonction des longueurs d'ondes pour l'alliage $ZnSn_xGe_{1-x}N_2$	88
Figure2.26 : Evolution du gap d'énergie en fonction de la température pour : (a) $ZnSnN_2$ et (b) $ZnGeN_2$	89
Figure2.27 : Evolution du gap d'énergie en fonction de la température calculée et mesuré par [49].....	89
Figure2.28 : Evolution du gap d'énergie en fonction de la température et de la concentration.....	90
Figure2.29 : Evolution de la longueur d'onde du gap en fonction de la température et de la concentration.....	90
Figure2.30 : Coefficients d'absorption α : (a) en fonction de la longueur d'onde λ pour différentes concentrations d'étains dans l'alliage $ZnSn_xGe_{1-x}N_2$ et (b) en fonction de la température.....	91
Figure2.31 : Paramètre de maille des alliages $ZnSn_xGe_{1-x}N_2$ et $In_xGa_{1-x}N$ en fonction de la concentration d'étain (Sn) et l'indium (In).....	92
Figure2.32 : Semiconducteurs A et B avant et après épitaxie.....	93
Figure2.33 : La variation du désaccord de maille en fonction de la concentration d'étain pour l'alliage $ZnSn_xGe_{1-x}N_2$ contraint sur GaN.....	94
Figure2.34 : La variation du désaccord de maille en fonction de la concentration d'étain et de germanium pour l'alliage $ZnSn_xGe_{1-x}N_2$ contraint sur un substrat du $Si_{1-y}Ge_y$. (a) 2D et (b) 3D.....	95

Figure2.35 : Variation de l'épaisseur critique de $ZnSn_xGe_{1-x}N_2$ en fonction de la concentration d'étain contraint sur GaN.....	96
Figure2.36 : Variation de l'épaisseur critique de $ZnSn_xGe_{1-x}N_2$ contraint sur $Si_{1-y}Ge_y$ en fonction de la concentration d'étain dans et de germanium.	97
Figure2.37 : Évolution du gap d'énergie interdite non contraint de $ZnSn_xGe_{1-x}N_2$ et $In_xGa_{1-x}N$, (a) en fonction de la concentration d'étain et l'indium et (b) pour différents paramètres de Bowing.....	98
Figure2.38 : Mobilité des électrons et des trous en fonction de la concentration de dopage pour le $ZnSnN_2$ à $T=300$ K.....	99
Figure2.39 : La variation de la conductivité électrique et de la mobilité pour un type n de $ZnSnN_2$ en fonction de la densité de dopage.....	101
Figure2.40 : La variation de la résistivité électrique et de la mobilité pour un type n de $ZnSnN_2$ en fonction de la densité de dopage.	101
Figure2.41 : Évolution des différents offsets de bandes ($\Delta E_{c,v}$) entre le GaN et l'alliage $ZnSn_xGe_{1-x}N_2$ en fonction de la composition x (Sn).....	103
Figure2.42 : Variation de l'affinité électronique de $ZnSn_xGe_{1-x}N_2$ en fonction de la concentration d'étain.....	104
Figure2.43 : Variation de la permittivité relative de $ZnSn_xGe_{1-x}N_2$ en fonction de la concentration d'étain.....	104
Figure2.44 : Diagramme de SILVACO-TCAD et les entrées-sorties d'ATLAS.....	109
Figure2.45 : Commandes du simulateur ATLAS (SILVACO-TCAD).....	109

Tableau 2.1 Données relatives à la dépendance du gap de $ZnSnN_2$ et le $ZnGeN_2$ en fonction de la température.....	88
--	----

Tableau 2.2 Décalage de bandes entre le GaN et l'alliage $ZnSn_xGe_{1-x}N_2$ en fonction de la composition x	102
--	-----

Chapitre 03

Figure3.1 Structure de la cellule solaire $ZnSnN_2$	120
Figure3.2 Effet de l'épaisseur de $ZnSnN_2$ sur le rendement quantique.....	122
Figure3.3 (a) La caractéristique J(V) pour différents w_p (w_{ZnSnN_2}), (b) la caractéristique P(V) pour différents w_p (w_{ZnSnN_2}) avec w_n (w_{CdS})=80nm à 300K.....	123
Figure3.4 (a) Variation de J_{cc} et V_{oc} en fonction de l'épaisseur de $ZnSnN_2$, (b) Variation de l'efficacité (%) et FF (%) en fonction de l'épaisseur de $ZnSnN_2$	124
Figure3.5 Effet de l'épaisseur de CdS sur le rendement quantique.....	125
Figure3.6 Effets de la température de fonctionnement sur le rendement quantique	126
Figure3.7 La caractéristique J(V) pour différentes températures de fonctionnement	127
Figure3.8 (a) Variation de J_{cc} et V_{co} en fonction de la température de fonctionnement. (b) Variation de l'efficacité (%) et FF (%) en fonction de la température de fonctionnement.....	127
Figure3.9 (a) Structure des cellules solaires en $ZnSnN_2$ [5], (b) le diagramme de bande des cellules solaires en $ZnSnN_2$	130
Figure3.10 Le rendement quantique externe des cellules solaires $ZnSnN_2$ (ZTN) en fonction de la longueur d'onde λ , où $w_n=1 \mu m$, $w_p=50$ nm, et avec des défauts.....	132
Figure3.11 (a) Variation de J_{cc} et V_{co} en fonction de la température de fonctionnement, (b) Variation de l'efficacité (%), et FF (%) en fonction de la température de fonctionnement, où $w_n=1 \mu m$, $w_p=50$ nm et avec des défauts	134
Figure3.12 Variation de l'efficacité (%) et FF (%) des cellules solaires $ZnSnN_2$ en fonction de la résistance série (R_s), où $w_n=1 \mu m$, $w_p=50$ nm et avec des défauts.....	135
Figure3.13 Variation de l'efficacité (%) et FF (%) des cellules solaires $ZnSnN_2$ en fonction de la résistance parallèle (R_p), où $w_n=1 \mu m$, $w_p=50$ nm et avec des défauts	136
Figure3.14 (a) Variation de J_{cc} et V_{co} en fonction de la densité de défauts de la couche absorbante de n- $ZnSnN_2$, (b) variation de l'efficacité (%) et FF (%) en fonction de la densité de	

défauts de la couche absorbante de n-ZnSnN ₂ , où $w_n=1\ \mu\text{m}$, $w_p=50\ \text{nm}$	137
Figure3.15 La caractéristique J(V) de la cellule solaire ZnSnN ₂ avec et sans défauts.....	137
Figure3.16 Structure des cellules solaires en ZnSnN ₂ avec Si sans défauts.....	138
Figure3.17 Variation de rendement quantique externe en fonction de la longueur d'onde pour deux cas avec et sans Si.....	139
Figure3.18 Variation de la caractéristique J-V pour une cellule solaire sans et avec le Si.....	140
Figure3.19 Structure de la cellule solaire ZnSnN ₂ ultra-mince.....	142
Figure3.20 Effet de l'épaisseur du ZnSnN ₂ sur l'efficacité quantique à 27°C (300K).....	144
Figure3.21 (a) caractéristique J(V) pour différents w_p (w_{ZnSnN_2}), (b) caractéristique P(V) pour différents w_p (w_{ZnSnN_2}), où w_n (w_{CdS})=80nm à 300K.....	145
Figure3.22 (a) Variation de Jcc et Vco en fonction de l'épaisseur de ZnSnN ₂ , (b) Variation de l'efficacité (%), et FF (%) en fonction de l'épaisseur de ZnSnN ₂	146
Figure3.23 J(V) caractéristique pour différentes températures de fonctionnement, où w_p (w_{ZnSnN_2}) =1 μm	147
Figure3.24 (a) Variation du Jcc et des Vco en fonction de la température de fonctionnement, (b) Variation de l'efficacité (%), et FF (%) en fonction de la température de fonctionnement. Où w_p (w_{ZnSnN_2}) =1 μm	147
Figure3.25 Variation de l'efficacité (%) et FF (%) du nouveau ZnSnN ₂ ultra-mince en fonction de la résistance en série (R_s).....	148
Figure3.26 J(V) caractéristique du nouveau ZnSnN ₂ ultra-mince avec et sans défauts.....	150
Figure3.27 (a) Variation de Jcc et Vco en fonction de la densité des défauts naturels dans la couche p-ZnSnN ₂ , (b) Variation de l'efficacité (%), et FF (%) en fonction de la densité des défauts naturels dans la couche p-ZnSnN ₂	150
Figure3.28 Histogrammes des paramètres de performance de la cellule solaire Jcc, Vco, et l'efficacité en fonction de l'épaisseur de ZnSnN ₂ (w_p) de 1 à 8 μm et T=300K	151
Figure3.29 L'effet de l'épaisseur de la couche absorbante ZTN et de la température de fonctionnement sur (a) rendement, (b) Vco et (c) Jcc.....	152
Tableau 3.1. Paramètres physiques utilisés dans la simulation.....	121
Tableau 3.2. Les effets de l'épaisseur de la couche absorbante en ZnSnN ₂ sur les paramètres photovoltaïques à 300K.....	124
Tableau 3.3 Les effets de l'épaisseur de la couche tampon de CdS sur les paramètres photovoltaïques à 300 K.....	125
Tableau 3.4 Les effets de la température de fonctionnement sur les paramètres Photovoltaïques.....	126
Tableau 3.5 Nos paramètres photovoltaïques basés sur la cellule solaire ZnSnN ₂ comparés à d'autres cellules solaires.....	128
Tableau 3.6 Paramètres physiques utilisés dans la simulation.....	130
Tableau 3.7 Paramètres physiques utilisés dans la simulation.....	130
Tableau 3.8 Toutes les épaisseurs étudiées (à T=300K).....	133
Tableau 3.9 Les effets de la température sur les paramètres photovoltaïques, où $w_n=1\ \mu\text{m}$ et $w_p=50\ \text{nm}$	134
Tableau 3.10 Les effets de la résistance série (R_s) et de la résistance parallèle (R_p) sur les paramètres photovoltaïques, où $w_n=1\ \mu\text{m}$ et $w_p=50\ \text{nm}$	135
Tableau 3.11 Nos paramètres photovoltaïques par rapport à [5], où [5] a été calculé à l'aide du logiciel wxAMPS.....	138
Tableau 3.12 Paramètres physiques utilisés dans la simulation.....	139
Tableau 3.13 Nos résultats de simulation pour les cellules avec et sans Si.....	140
Tableau 3.14 Paramètres physiques utilisés dans la simulation	143
Tableau 3.15 Paramètres physiques utilisés dans la simulation.....	144
Tableau 3.16 Les effets de l'épaisseur de la couche d'absorbante ZnSnN ₂ sur les paramètres photovoltaïques à 300K.....	143
Tableau 3.17 Les effets de la température de fonctionnement sur les paramètres photovoltaïques.....	148

Tableau 3.18 Les effets de la résistance en série (R_s) sur les paramètres photovoltaïques.....	149
Tableau 3.19 Nos paramètres photovoltaïques basés sur la cellule solaire ultra-minces à structure $ZnSnN_2$ comparées aux cellules solaires ultra-minces à structure CIGS ($w_p=2\mu m$).....	151

Chapitre 04

Figure4.1 (a) Structure de la cellule solaire p-i-n $ZnSnGeN_2$.(b) Structure de la cellule solaire à puits quantiques $ZnSn_xGe_{1-x}N_2 / GaN$	156
Figure4.2 Diagramme de bande de $ZnSn_xGe_{1-x}N_2 / GaN$ avec 50 périodes de puits quantique.....	157
Figure4.3 Variation de la bande interdite et de la déformation de la structure $ZnSn_xGe_{1-x}N_2$ sur substrat GaN en fonction de la concentration en étain Sn.....	158
Figure4.4 (a) Variation de l'épaisseur critique et (b) la déformation de la structure $ZnSn_xGe_{1-x}N_2$ sur substrat GaN en fonction de la concentration en étain (Sn).....	159
Figure4.5 Variation de l'EQE en fonction de la longueur d'onde pour différentes concentrations d'étain (Sn %) dans l'alliage $ZnSn_xGe_{1-x}N_2$	160
Figure4.6 (a) Variation de la densité de courant en fonction de la tension pour différentes concentrations d'étain. (b) Variation de la puissance en fonction de la tension pour différentes concentrations d'étain.....	161
Figure4.7 Effets de la concentration d'étain (Sn %)	162
Figure4.8 (a, b) La variation de la densité de courant et de la puissance en fonction de la concentration d'étain pour deux structures p-i-n (pour 0 et 50 périodes).....	163
Figure4.9 Caractéristiques J (V) pour différentes températures de fonctionnement.....	164
Figure4.10 Variation du V_{co} (V) et de l'efficacité η (%) en fonction de la température de fonctionnement pour $x=60\%$ et 50 périodes.....	165
Figure4.11 J (V) Cellule solaire à puits quantique de $ZnSn_{0.6}Ge_{0.4}N_2/GaN$, nombre de couches du puits = 0, 10, 30 et 50.....	166
Figure4.12 Structure de la cellule solaire à puits quantiques $ZnGe_{0.3}Sn_{0.7}N_2 / GaN$	168
Figure4.13 Variation de la bande interdite et de la déformation de la structure $ZnGe_xSn_{1-x}N_2$ sur substrat GaN en fonction de la concentration en germanium (Ge).....	169
Figure4.14 (a) J(V) de la cellule $ZnGe_{0.3}Sn_{0.7}N_2 / GaN$ avec 10 périodes en fonction de la température de fonctionnement. (b) P(V) de la cellule $ZnGe_{0.3}Sn_{0.7}N_2 / GaN$ avec 10 périodes en fonction de la température de fonctionnement.....	170
Figure4.15 (a) Variation de courant de court-circuit et la tension de circuit ouvert en fonction de la température de fonctionnement. (b) Evolution du rendement de conversion et le facteur de remplissage en fonction de la température de fonctionnement.....	171
Tableau 4.1 (a) et (b) Paramètres physiques utilisés dans la simulation.....	157
Tableau 4.2 (a) et (b) Présentent les résultats de la simulation du $ZnSn_xGe_{1-x}N_2 / GaN$	161
Tableau 4.3 Effets de la température de fonctionnement sur les paramètres photovoltaïques.....	164
Tableau 4.4 (a) et (b) Les paramètres caractéristiques d'une cellule solaire p-i-n et d'un puits quantique $ZnSn_{0.6}Ge_{0.4}N_2 / GaN$ pour un certain nombre de couches ou périodes de puits différentes par rapport à p-i-n $ZnSn_{0.6}Ge_{0.4}N_2$	165
Tableau 4.5 Paramètres caractéristiques d'une cellule à puits quantiques $ZnGe_{0.3}Sn_{0.7}N_2 / GaN$ avec 10 périodes pour différente température.....	171
Tableau 4.6 Paramètres photovoltaïques d'une cellule solaire à puit quantique d' $InGaN/GaN$ avec 10 périodes comparées avec nos résultats (à 300K).....	171

LISTE DES SYMBOLES ET DES ABREVIATIONS

$ZnSnN_2$	Zinc/ Étain/ Nitrure
$ZnGeN_2$	Zinc/ Germanium/ Nitrure
NREL	Laboratoire national des énergies renouvelables
MOVPE	Épitaxie en phase vapeur organo-métallique
VLS	Vapeur Liquide Solide
MOCVD	Dépôt de vapeur chimique organo-métallique
RF	Pulvérisation radiofréquence
MBE	Épitaxie par jets moléculaire
DFT	La théorie fonctionnelle de la densité
HSE	Heyd Scuseria Ernzerhof
RPE-MOVPE	Phase de vapeur organométallique améliorée par plasma à distance
PECVD	Dépôt chimique en phase vapeur assisté par plasma
ΔH_f	Enthalpie de formation
AM	Masse d'air
BC	Bande de conduction
BV	Bande de valence
CdS	Sulfure de Cadmium
CdTe	Tellurure de Cadmium
CIGS	Cuivre/Indium/Gallium/Sélénium
CIGSSe	Cuivre/Indium/Gallium/Sulfoséléniure
CZTSSe	Cuivre/Zinc/ Etain/ Soufre/ Sélénium
GaAs	Arséniure de gallium
Si	Silicium
c-Si	Silicium cristallin
mc-Si	Silicium multicristallin
EQE	Efficacité Quantique externe
EQI	Efficacité Quantique Interne
QE	Rendement quantique
RS	La réponse spectrale
HIT	Hétérojonction avec couche mince intrinsèque
MJ	Multi-jonction
PV	Photovoltaïque
TCO	Oxyde conducteur transparent
BSF	Champ de surface arrière
ZCE	Zone de charge électrique ou zone de déplétion
LED	Diode électroluminescente

<i>PQs</i>	<i>Puits quantiques</i>
<i>FQs</i>	<i>Fils quantiques</i>
<i>BQs</i>	<i>Boites quantiques</i>

Liste des paramètres		
<i>c</i>	<i>Vitesse de la lumière</i>	$299\,792\,458\text{ m.s}^{-1}$
ϵ_0	<i>Permittivité du vide</i>	$8,85 \times 10^{-12}\text{ F.m}^{-1}$
<i>h</i>	<i>Constante de Planck</i>	$4,136 \times 10^{-15}\text{ eV.s}$
\hbar	<i>Constante de Planck restreinte</i>	$6,582 \times 10^{-16}\text{ eV.s}$
<i>k</i>	<i>Constante de Boltzmann</i>	$8,617 \times 10^{-5}\text{ eV.K}^{-1}$
m_0	<i>Masse d'un électron</i>	$0,511\text{ MeV.c}^{-2}$
<i>q</i>	<i>Charge élémentaire</i>	$1,602 \times 10^{-19}\text{ C}$
<i>T</i>	<i>Température</i>	K
<i>a</i>	<i>Paramètre de maille d'un cristal dans le plan</i>	Å
C_{11}	<i>Constante élastique selon l'axe x</i>	GPa
C_{12}	<i>Constante élastique dans le plan (x,y)</i>	GPa
ϵ_{xx}	<i>Déformation dans le plan de la couche</i>	<i>s.d.</i>
ϵ_{zz}	<i>Déformation selon la direction de la croissance</i>	<i>s.d.</i>
ϵ_{total}	<i>Déformation totale</i>	<i>s.d.</i>
E_c	<i>Énergie de La bande de conduction</i>	eV
E_v	<i>Énergie de La bande de valence</i>	eV
E_g	<i>Énergie de La bande interdite</i>	eV
$\epsilon_{//}$	<i>Déformation parallèle</i>	<i>s.d.</i>
ϵ_{\perp}	<i>Déformation perpendiculaire</i>	<i>s.d.</i>
h_c	<i>Épaisseur critique</i>	Å ou nm
μ_{ϑ}^{min}	<i>Mobilité minimale</i>	$\text{Cm}^2.\text{v}^{-1}.\text{s}^{-1}$
γ	<i>Coefficient de poisson</i>	<i>s.d.</i>
<i>b</i>	<i>Paramètre de courbure dans la loi de Vegard</i>	eV
<i>D</i>	<i>Coefficient de diffusion des porteurs</i>	$\text{cm}^2.\text{s}^{-1}$
ϵ_r	<i>Permittivité relative du matériau ou constante diélectrique</i>	<i>s.d.</i>
χ	<i>Affinité électronique</i>	eV
ΔE_c	<i>discontinuité de la bande de conduction</i>	eV
ΔE_v	<i>discontinuité de la bande de valence</i>	eV
<i>E</i>	<i>Champ électrique</i>	V.m^{-1}
<i>FF</i>	<i>Facteur de forme d'une caractéristique courant-tension</i>	<i>s.d.</i>
<i>I</i>	<i>Courant</i>	A
I_{cc}	<i>Courant de court-circuit</i>	A
I_{max}	<i>Courant maximum fourni par une cellule</i>	A

I_{ph}	<i>Courant photo-généré</i>	A
I_s	<i>Courant de saturation</i>	A
J	<i>Densité de courant</i>	$A.cm^{-2}$
k	<i>Vecteur d'onde</i>	cm^{-1}
L	<i>Longueur de diffusion des porteurs</i>	m
m_e	<i>Masse d'un électron dans la bande de conduction</i>	$MeV.c^{-2}$
m_e^*	<i>Masse effective d'électron dans la bande de conduction</i>	$MeV.c^{-2}$
m_h	<i>Masse d'un trou dans la bande de valence</i>	$MeV.c^{-2}$
m_h^*	<i>Masse effective d'un trou dans la bande de valence</i>	$MeV.c^{-2}$
N_a	<i>Densité de dopants accepteurs ionisés dans un matériau P</i>	cm^{-3}
N_c	<i>Densité d'états au bord de la bande de conduction</i>	cm^{-3}
N_d	<i>Densité de dopants donneurs ionisés dans un matériau N</i>	cm^{-3}
N_v	<i>Densité d'états au bord de la bande de valence</i>	cm^{-3}
n	<i>Densité d'électrons libres</i>	cm^{-3}
n_i	<i>Densité de porteurs libres intrinsèques</i>	cm^{-3}
n_{id}	<i>Coefficient d'idéalité d'une diode</i>	s.d.
P_{in}	<i>Puissance incidente</i>	$W.m^{-2}$
P_{max}	<i>Puissance maximale fournie par une cellule</i>	$W.m^{-2}$
R_p	<i>Résistance parallèle</i>	Ω
R_s	<i>Résistance de série</i>	Ω
ρ	<i>Densité totale de charges</i>	$C.m^{-3}$
τ	<i>Temps de vie des porteurs</i>	s
μ	<i>Mobilité des porteurs</i>	$m.s^{-1}$
V	<i>Potentiel</i>	V
V_{max}	<i>Tension maximale fournie par une cellule</i>	V
V_{oc}	<i>Tension de circuit ouvert</i>	V
F_0	<i>Flux des photons incidents non réfléchis.</i>	$W.m^{-2}$
S_p	<i>Vitesse de recombinaison des trous minoritaires</i>	$cm^{-3}.s^{-1}$
S_n	<i>Vitesse de recombinaison de électrons minoritaires</i>	$cm^{-3}.s^{-1}$
A	<i>Spectre d'absorption (d'absorbance)</i>	$cm^{-1} (\%)$
α	<i>Coefficient d'absorption</i>	cm^{-1}
n	<i>Indice de réfraction</i>	s.d.
k	<i>Coefficient d'atténuation ou d'extinction</i>	s.d.
λ	<i>Longueur d'onde d'un photon</i>	nm
R	<i>Spectre de réflexion (réflectance)</i>	$cm^{-1} (\%)$
T	<i>Spectre de transmission (transmittance)</i>	$cm^{-1} (\%)$
ν	<i>Fréquence d'un photon</i>	cm^{-1}

INTRODUCTION GENERALE

Afin de permettre le déploiement prévu de la fourniture mondiale photovoltaïque à l'horizon 2030, l'obtention de cellules affichant un rendement supérieur à 30% apparaît comme un des défis primordiaux à relever. Néanmoins ceci ne peut se concevoir qu'en prenant en compte, et ceci dès les étapes de conception, les aspects de coût (€/w comparable à celui de la technologie silicium), de facteur d'échelle (procédés de fabrication et reproductibilité transférables au volume de masse) et de durabilité (durée de vie et utilisation de matériaux abondants) des technologies étudiées. Aucune des technologies étudiées jusqu'à maintenant (matériaux III-V, pérovskites, nanostructures...) ne laisse envisager une réponse positive pour l'ensemble de ces challenges [1-2].

Le matériau ZnSnN_2 , et plus généralement la filière Zn-IV-N_2 (ou $\text{IV} = \text{Sn, Ge, Si}$), est depuis peu envisagé comme pouvant répondre à de telles attentes, Il n'est composé que de matériaux dont les ressources terrestres sont abondantes et les quelques résultats publiés montrent une énergie de bande interdite de l'ordre de ~ 2 eV [2]. Néanmoins, il existe actuellement très peu d'études sur ce matériau et c'est donc un travail des plus exploratoires qui visera à déterminer les composés les plus favorables à pouvoir fournir les propriétés exigées pour cette filière (Zn-IV-N_2) [3].

L'objectif principal de ce travail de thèse vise à la simulation des cellules photovoltaïques à base de nouveaux matériaux.

Dans la première partie de la thèse, nous avons présenté une introduction bibliographique au travail de thèse. Nous avons soulevé la question de l'abondance des matériaux et du manque de certains éléments sur terre malgré leurs présences dans plusieurs dispositifs optoélectroniques. Ensuite, nous avons présenté également les différentes technologies photovoltaïques en cours de développement, mais nous voulons utilisés les technologies vertes qui peuvent être écologique donc plus respectueux de l'environnement, c'est-à-dire moins polluantes. Ce qui nous a motivé à utiliser des matériaux du bon marché qui contiennent des matériaux avec des éléments abondants, non toxique et peu couteux avec des caractéristiques optoélectroniques intéressantes.

Le deuxième chapitre est consacré à l'étude des propriétés physiques : optiques, mécaniques et électroniques des semiconducteurs (II-IV-N_2). En signalant également les

différentes jonctions p-n possibles par l'étude d'une jonction p-n abrupte à l'équilibre et hors équilibre (avec polarisation) pour le cas d'une homojonction et une hétérojonction ainsi les paramètres d'une cellule PV.

Le troisième chapitre sera consacré à la simulation des cellules solaires à couches minces basées sur de nouveaux matériaux en utilisant le logiciel SCAPS-1D.

Le quatrième chapitre sera consacré à la simulation des cellules conventionnelles (p-i-n) à base de nanostructures de l'alliage $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$ et de l'alliage $\text{ZnGe}_x\text{Sn}_{1-x}\text{N}_2$ (multi-puits quantiques) en utilisant le logiciel SILVACO-TCAD.

Enfin, les résultats obtenus sont discutés et nous terminons la thèse par une conclusion générale qui résume les travaux présentés ainsi que les différentes perspectives possibles afin d'éclairer cette filière de nouveaux matériaux.

REFERENCES

- [1] Lincot, D., Collin, S., Even, J., & Kleider, J.-P. (2015). Silicium, couches minces, pérovskites, photonique : De nouvelles avancées de la recherche sur les cellules photovoltaïques, Un bon signe pour la COP 21. *Photoniques*, 78, 23. <https://doi.org/10.1051/photon/20157823>.
- [2] Alnjiman, F. (2018). ZnSnN₂ thin films for photovoltaic applications [Phdthesis, Université de Lorraine]. <https://hal.univ-lorraine.fr/tel-02109767>.
- [3] Beddelem, N. (2019). Croissance et caractérisation de nitrures ZnGeN₂ pour applications optoélectroniques [Phdthesis, Université de Lorraine]. <https://hal.univ-lorraine.fr/tel-02141628>.

Chapitre 1 ETAT DE L'ART

ZnSnN₂ et ZnSn_xGe_{1-x}N₂ : Des nouveaux matériaux pour le photovoltaïque.

1.1 Introduction

Ce chapitre est dédié à une introduction bibliographique au travail de thèse.

1.1.1 Contexte et objectifs de travail

Au cours des dix dernières années, le développement de matériaux alternatifs pour le photovoltaïque a attiré une large attention et revêt actuellement une grande importance pour notre société, c'est pourquoi de nombreux projets de recherche sont consacrés à la découverte de nouveaux matériaux dans le monde.

1.1.2 La question de la complexité de la réalisation des cellules solaires à base de semiconducteurs III-V par rapport aux besoins industriels

Les dispositifs à grande échelle à base de semiconducteurs III-V (comme le InGaN) seront limités par la qualité du matériau (par exemple, l'incorporation de l'indium dans l'InGaN), mais aussi par la technologie de croissance utilisée (épitaxie). De plus, comme l'indium et le gallium ont des sources limitées et sont économiquement viables, la dépendance à l'indium et au gallium peut limiter leur utilisation à long terme dans les équipements solaires à grande échelle. Figure 1.1 nous montre que l'étain et le Zinc sont 10² à 10³ fois plus abondants que l'indium.

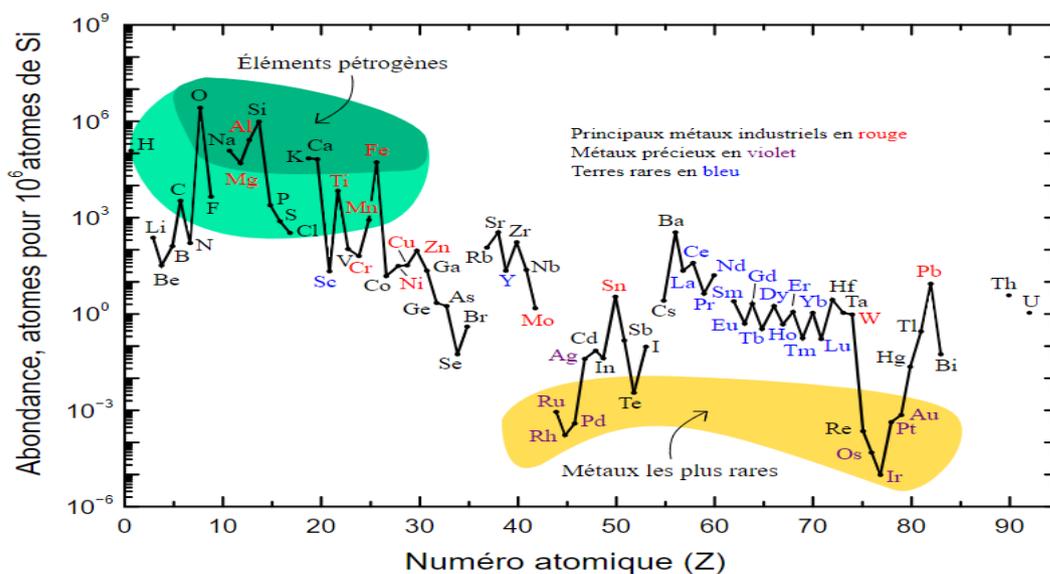
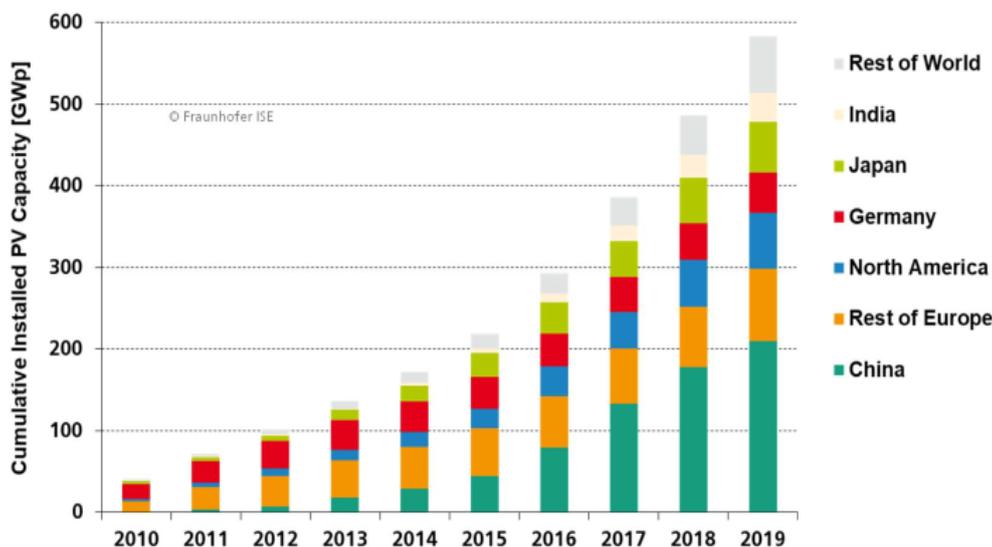


Figure 1.1 L'abondance des éléments dans la croûte terrestre en fonction de leur numéro atomique (Z) [1].

Selon une étude de l'agence internationale de l'énergie, la demande énergétique mondiale continue de croître, atteignant 14 milliards de tonnes équivalent pétrole [2]. Dans les statistiques actuelles, une grande partie de la production d'énergie utilise des ressources non renouvelables, telles que le pétrole, le charbon ou l'uranium. Au contraire, pour des raisons politiques, le marché photovoltaïque actuel est sous-développé. Elle a maintenant une capacité de production de 580 GW sur le marché. (Fig. 1.2) [3].



Data: IRENA 2020. Graph: PSE Projects GmbH 2020

Figure 1.2 Capacité mondiale de l'énergie solaire photovoltaïque par certains pays et régions [3].

Néanmoins, des efforts doivent encore être faits pour atteindre les objectifs mondiaux de production d'énergie verte et de production d'énergie décarbonisée (l'abandon des combustibles fossiles au profit d'énergies moins polluantes). Parmi les possibilités, la production d'électricité photovoltaïque verte est profondément étudiée. En effet, l'énergie provenant du soleil, une source abondante et gratuite, peut être considérée comme verte si les techniques de récolte de l'énergie solaire peuvent être écologiques (respectueux de l'environnement). Ce point nécessite l'amélioration de la compétitivité de la technique photovoltaïque afin de réduire le coût de l'électricité produite et de prendre soin de l'environnement et les techniques utilisés.

1.1.3 Technologies photovoltaïques

En 1839, un physicien français, Edmond Becquerel, avait découvert l'effet photovoltaïque et avait créé la première cellule photovoltaïque au monde [4]. Le principe du photovoltaïque est de convertir la lumière du soleil en électricité. L'absorption d'un photon dans un matériau signifie que son énergie est utilisée pour exciter un électron à partir d'une énergie initiale de niveau E_i dans la bande de valence jusqu'à un niveau d'énergie plus élevé final E_f dans la bande de conduction, comme le montre la figure 1.3. L'énergie du photon doit pouvoir être supérieure ou égale à l'énergie de la bande interdite E_g afin de créer une paire électron-trou.

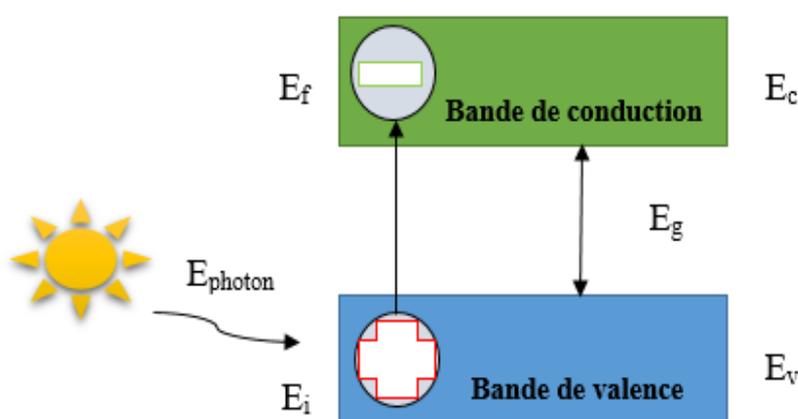


Figure 1.3 Génération d'une paire électron-trou par absorption d'un photon [4].

Cependant, il existe cinq grandes technologies de cellules solaires. Elles sont classées en fonction des matériaux utilisés et des méthodes de fabrication. Le laboratoire national des énergies renouvelables (NREL) a publié chaque année les meilleurs tableaux de rendement des cellules de recherche qui comprennent l'évolution au fil des ans pour les cinq principales générations indiquées dans la figure 1.4 tracé de 1976 à 2021.

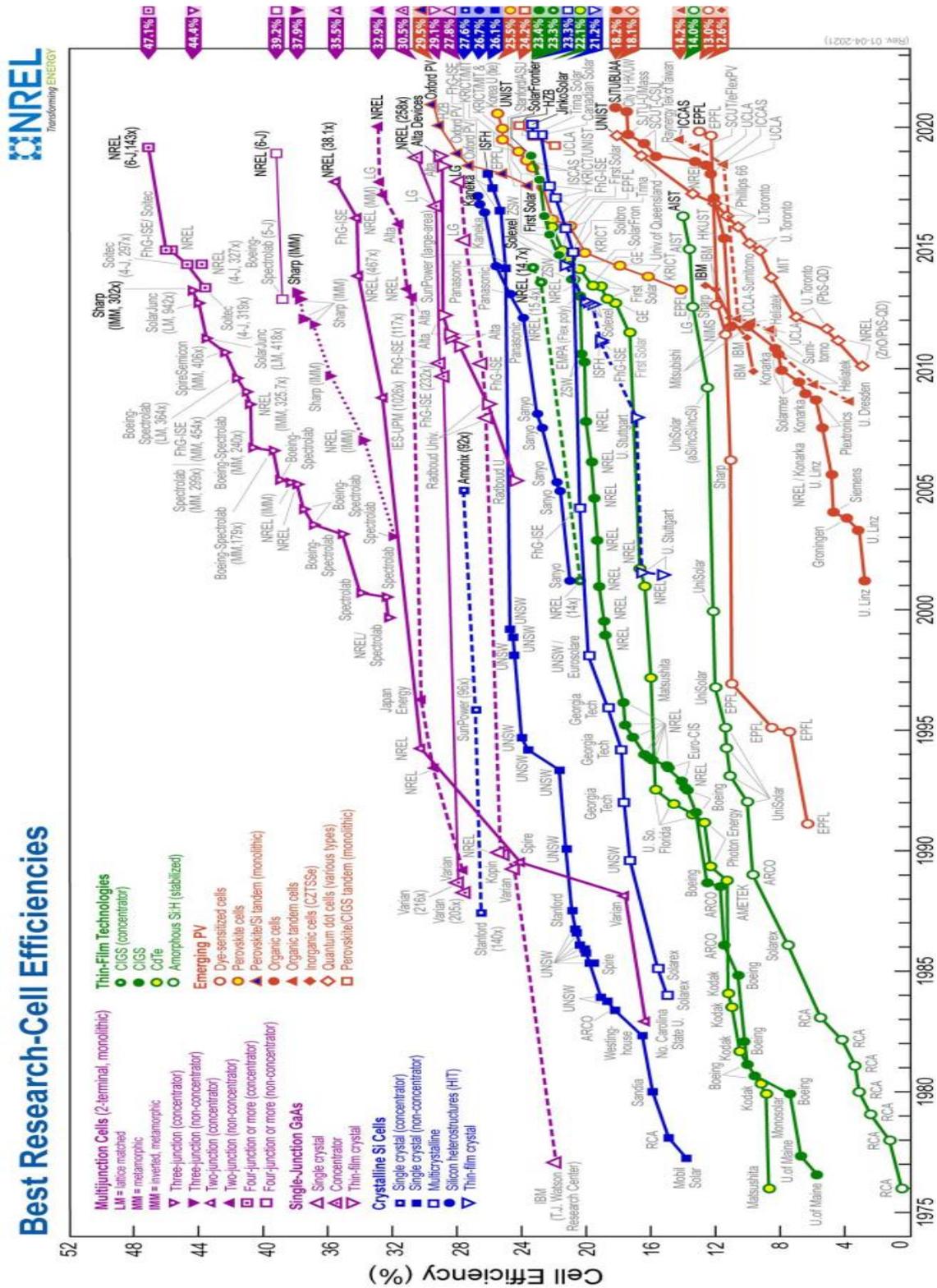


Figure 1.4 Graphique du NREL (National Renewable Energy Laboratory) de l'efficacité des cellules solaires au fil des ans [5].

Les cinq principales générations sont les suivantes : [5]

1. GaAs à simple jonction.
2. Cellules en Si cristallin.
3. Technologies à couches minces.
4. Les cellules à jonctions multiples.
5. PV émergents.

Parmi les cellules solaires possibles, celle à jonction multiple est la plus efficace et détient le record mondial actuel. La cellule solaire à jonctions multiples possède de multiples jonctions (p-n) réalisées avec différents matériaux semiconducteurs (de plusieurs homojonctions). Chaque jonction crée un courant électrique en réponse à différentes longueurs d'onde de la lumière incidente. L'utilisation de plusieurs matériaux semiconducteurs permet alors l'absorption d'une large gamme de longueurs d'onde de spectre solaire. Cependant, les cellules solaires à jonctions multiples ont atteint le rendement le plus élevé, soit environ 46 % selon F. Dimorthv et al. [6]. Un exemple de cellule solaire à jonction multiple est présenté à la figure 1.5.

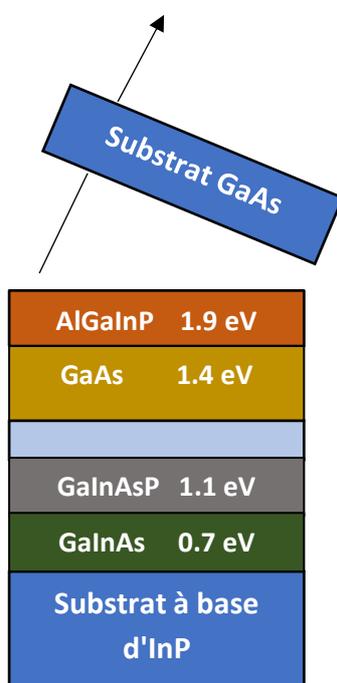


Figure 1.5 Cellule solaire à quatre jonctions avec un record mondial d'efficacité à 46.1% [6].

Comme déjà mentionné, le principal problème avec ce type de dispositif est la complexité de sa réalisation (élaboration) et l'utilisation de matériaux contenant du In et Ga. Une autre approche consiste à utiliser de nouveaux matériaux tels que le CuInGaS_2 (Se_2) (CIGS). Une telle approche a été largement développée au cours des dix dernières années, mais les rendements sont encore faibles, environ 22 % en laboratoire pour une cellule de $0,5 \text{ cm}^2$ avec CIGS [7]. De plus, les cellules CIGS contiennent de l'indium, ce qui pose un réel problème de rareté. En outre, ces autres technologies, qui sont en concurrence frontale avec celle du c-Si, souffrent également de graves problèmes de toxicité en nécessitant l'utilisation de couches alternatives contenant du Cd ou de la rareté (Te-0,005 ppm et Se-0,05 ppm) pour un éventuel déploiement à l'échelle TW. Différentes alternatives et solutions plus ou moins fructueuses ont donc été proposées ces dernières années pour remplacer la technologie CIGS, par le développement de matériaux $\text{I}_2\text{-II-IV-VI}_4$, par exemple $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ (CZTS), $\text{Cu}_2\text{ZnSnSe}_4$ (CZTSe) et $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S}, \text{Se})_4$ (CZTSSe). Cette approche pourrait être très intéressante, mais malheureusement, les rendements sont encore faibles, autour de 12 %. Actuellement, parmi les technologies émergentes, nous pouvons citer les matériaux organiques et inorganiques de type pérovskite hybride et pérovskite hybride halogénée [5]. L'efficacité de la pérovskite augmente aujourd'hui, mais la voie la plus efficace, stable et sans plomb, constitue cependant le plus grand défi. En fait, si les rendements sont élevés, la stabilité structurelle de la pérovskite est actuellement faible et la réalisation d'un dispositif stable malheureusement nécessite encore beaucoup d'effort, jusqu'à ce que Turren-Crus et al. [8] ont prouvé et démontré que les cellules solaires en pérovskite sont stables avec un rendement élevé.

1.1.4 Potentialités des nouvelles propriétés physiques des matériaux ZnSnN_2

Dans une première approche axée sur l'étude de nouveaux matériaux, nous souhaitons ouvrir une voie complémentaire utilisant des matériaux à base d'azote (N). En suivant la stratégie des couches minces inorganiques où les matériaux III-N se sont déjà avérés très stables, il est donc naturel de se concentrer sur une lignée de matériaux semiconducteurs encore peu étudiée, étroitement liée à la famille (In, Ga) N et pour laquelle l'élément de la colonne III est remplacé par un sous-réseau cationique ordonné composé d'un nombre égal d'atomes de Zn et de la colonne IV (Si, Ge, Sn). Le nitrure de zinc-étain (ZnSnN_2) est le dernier composé étudié de la famille des semiconducteurs Zn-IV-N_2 , où l'élément IV peut être (Si-Ge-Sn). Ce composé de Zn-IV-N_2 est étroitement lié aux semiconducteurs III-N [9-10] où les éléments III sont (Al-Ga-In). La famille des nitrures III-N sont des matériaux prometteurs pour les applications de dispositifs semiconducteurs, plus particulièrement pour les applications optoélectroniques pour

une large gamme d'énergies de photons. Ces composés ont des bandes interdites optiques de 6,2 eV pour l'AlN, 3,4 eV pour le GaN et 0,7 eV pour l'InN [11]. En outre, ce qui rend ces composés intéressants, c'est la possibilité d'accorder la bande interdite par l'alliage de III-V. Par exemple, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ est un semiconducteur à large bande interdite atteignant la plage de bande interdite de 6,2 eV à 3,4 eV en modifiant le rapport entre Ga et Al [12]. La même propriété est obtenue pour $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ avec la possibilité de régler la bande interdite entre 3,5 eV et 0,7 eV en utilisant un rapport différent entre Ga et In [13]. P. Quayle et al [14] ont comparé les énergies de la bande interdite entre ces deux familles de nitrures III-N et Zn-IV- N_2 . Ils ont rapporté les énergies de bande interdite par rapport aux paramètres de maille de la structure wurtzite (figure 1.6). Une telle représentation montre la possibilité d'obtenir une bande interdite réglable pour Zn-IV- N_2 , qui est alors un bon candidat potentiel pour remplacer les matériaux III-N.

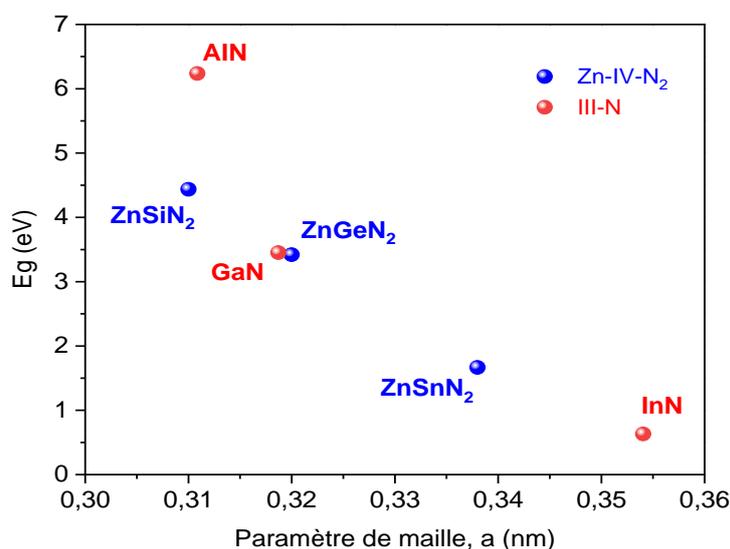


Figure 1.6 Diagramme de la bande interdite et le paramètre de maille de la structure wurtzite pour : les III-N et les Zn-IV- N_2 et leurs alliages [14].

1.1.5 Les aspects historiques du ZnSnN₂

Le ZnSnN₂ est un matériau semiconducteur appartenant à la famille des Zn-IV- N_2 . En changeant les éléments IV de (Si-Ge-Sn) la bande interdite et le paramètres de maille peuvent être réglés (modulable). Historiquement, Maunaye et al. [15] ont signalé pour la première fois en 1970 la croissance de ce type de matériau, précisément ZnGeN₂. En 1992, Endo et al [16] ont signalé la première croissance de ZnSiN₂ en utilisant la synthèse sous haute pression. Mais, les seules alliages ZnGeN₂ et ZnSiN₂ ont été synthétisés et relativement bien caractérisés. À

titre d'exemple, nous pouvons mentionner la croissance du ZnSiN_2 par la technique MOVPE (The metal-organic vapor phase epitaxy) [17] sur des substrats de saphir (Al_2O_3) ou de SiC. Des efforts plus importants ont été consacrés au ZnGeN_2 , les monocristaux ont été obtenue par la méthode VLS (vapeur-liquide-solide), des couches minces ont été déposées sur du verre et du silicium pulvérisé par la technique radiofréquence et la technique MOCVD (The metal-organic chemical vapor deposition) ont été utilisés pour la croissance sur saphir (Al_2O_3) et SiC [18]. Nous pouvons mentionner que le $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$ grandi par pulvérisation radiofréquence (RF) a également montré un réel potentiel d'application photonique et optoélectronique, résultats publiés en 2015 par A. M. Shing et al. [19]. Les études expérimentales sur le ZnSnN_2 sont plus rares et les propriétés de ce matériau ne sont pas bien connues. La première étude théorique a été réalisée par Paudel et al [9] en 2008. Les premiers développements de ZnSnN_2 en 2011 par N. Feldberg et al. [20]. Dans leur étude, le matériau est déposé en utilisant un procédé d'épitaxie par jets moléculaire ou la technique MBE (Molecular-Beam-Epitaxy). Les premiers résultats expérimentaux en 2011 [20] et une étude théorique de A. Punya et al. [10] ont évoqué l'intérêt du ZnSnN_2 pour l'optoélectronique. En 2013, l'institut de technologie de Californie (Atwater research group) a publié des résultats très intéressants de L. Lahourcade et al. [21], ils ont présenté certaines propriétés optiques des films de ZnSnN_2 obtenus par pulvérisation cathodique et présentant une bande interdite expérimentale de 1,8 eV (figure 1.7) qui s'oppose à la prédiction théorique de 1,42 eV. Ils expliquent cette déviation par l'existence d'un effet Burstein-Moss dû à un dopage de type n significatif de l'ordre de 10^{21} cm^{-3} .

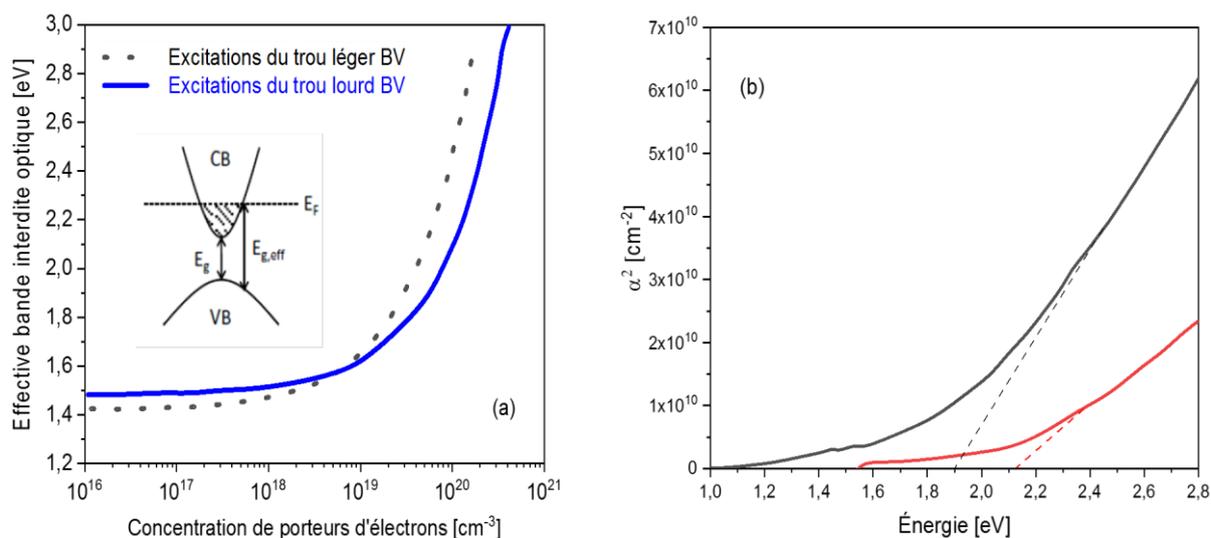


Figure 1.7 (a) Bande interdite en fonction de la concentration de porteurs, (b) évaluation de la bande interdite et du coefficient d'absorption du ZnSnN_2 par des mesures optiques [21].

En 2013, des nouvelles données optiques théoriques et expérimentales sur le ZnSnN_2 sont obtenus par épitaxie par jets moléculaire assistée par plasma d'azote [22]. Cependant, d'autres travaux contredisent les résultats des deux premières études mentionnées ci-dessus concernant la structure cristallographique. Ils ont constaté qu'il a une structure monoclinique au lieu d'une structure orthorhombique comme prévu. Cette modification de la structure cristalline a un impact sur l'énergie de la bande interdite, mais la question reste ouverte. Ils prédisent également la possibilité de réduire la bande interdite à 0,95 eV liés au désordre cationique, ce qui pourrait permettre un plus grand réglage de la bande interdite du matériau. En 2015, une étude d'un groupe chinois a rapporté une concentration d'électrons entre $2,3 \cdot 10^{17}$ et $1,6 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ avec une bande interdite estimée dans la gamme de 1,82-1,95 eV [23]. Ce groupe a également révélé que la plage d'absorption utile du composé ZnSnN_2 est comparable à celle des matériaux InP, GaAs (III-V) et CdTe (II-VI) (figure 1.8).

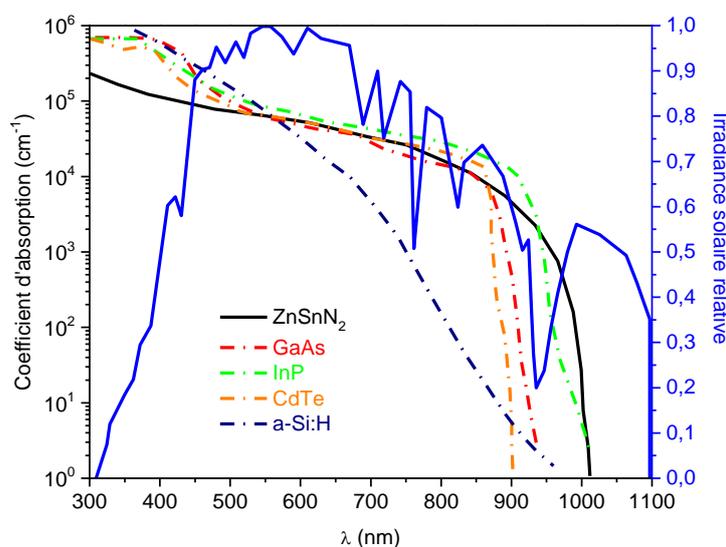


Figure 1.8 Le spectre solaire AM1.5 et du coefficient d'absorption, comparant l'évaluation du coefficient d'absorption du ZnSnN_2 avec d'autres matériaux [23].

Aussi, des densités de porteurs de $1,8 \cdot 10^{18}$ et $4,5 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ avec une mobilité maximale de $8 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ S}^{-1}$ ont été signalées. Les chercheurs ont également signalé la possibilité d'un contrôle antidopage dans le ZnSnN_2 par une variation de la stœchiométrie cationique [24]. En 2015, Veal et al. [25] a montré la possibilité de permettre la variation de la bande interdite entre 1,33 et 2,38 eV en ajustant le degré de désordre cationique en faisant varier la condition de croissance à l'aide d'un MBE assisté par plasma. Récemment, un groupe chinois a signalé le comportement de haute résistivité des films pulvérisés en ZnSnN_2 et a également démontré une courbe I(V)

(sous obscurité) de la jonction PN, ce qui encourage la réalisation de dispositifs photovoltaïques, R. Qin et al. [26].

1.1.6 La structure cristalline de ZnSnN_2

Le ZnSnN_2 est un matériau semiconducteur qui fait partie de la famille des II-IV- N_2 . La structure cristalline de cette nouvelle famille est considérée comme une structure de wurtzite avec une symétrie orthorhombique. T. R. Paudel et al. [9] dans l'étude des phonons sur les composés Zn-IV- N_2 ont défini la structure idéale comme structure de wurtzite avec des vecteurs de réseau orthorhombique a , b et c . Ces vecteurs sont liés aux vecteurs du réseau de la wurtzite a_w , b_w et c_w par $a=a_w$, $b= a_w + 2b_w$ et $c=c_w$. Pour le ZnSnN_2 , la structure cristalline la plus stable et la plus acceptée est orthorhombique (fig. 1.9) avec 16 atomes par cellule unitaire, 4 atomes de zinc, 4 atomes d'étain et 8 atomes d'azote. Le groupe d'espace pour l'orthorhombique est $\text{Pna}2_1$ qui est connu pour $\beta\text{-NaFeO}_2$ ou en général un composé I-III-VI₂. Par des calculs de DFT (Théorie de la fonctionnelle de la densité), T. D. Veal et al. [25] ont défini la différence entre les deux structures de l'orthorhombique et de la wurtzite par l'ordre du sous-réseau cationique de ZnSnN_2 . La structure orthorhombique a un ordre cationique complet alors que celle de la wurtzite a un sous-réseau cationique complet.

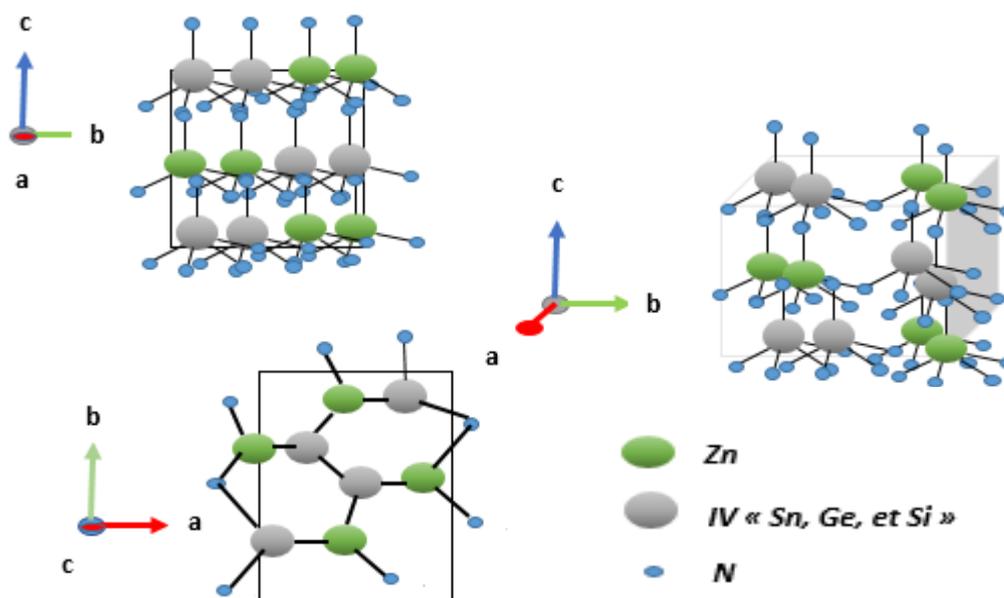


Figure 1.9 Structure cristalline orthorhombique de ZnSnN_2 dans différentes directions [9].

La structure de la wurtzite du ZnSnN_2 est proche du matériau nitrure III (Al, Ga, In)-N avec un réseau hexagonal et un groupe spatial $\text{P6}_3\text{mc}$. Cette structure est connue pour être celle du ZnO .

Comme nous l'avons déjà mentionné, la structure de la wurtzite de ZnSnN_2 correspond à la position du cation de désordre avec des atomes de Zn et Sn situés au hasard. (Figure 1.10).

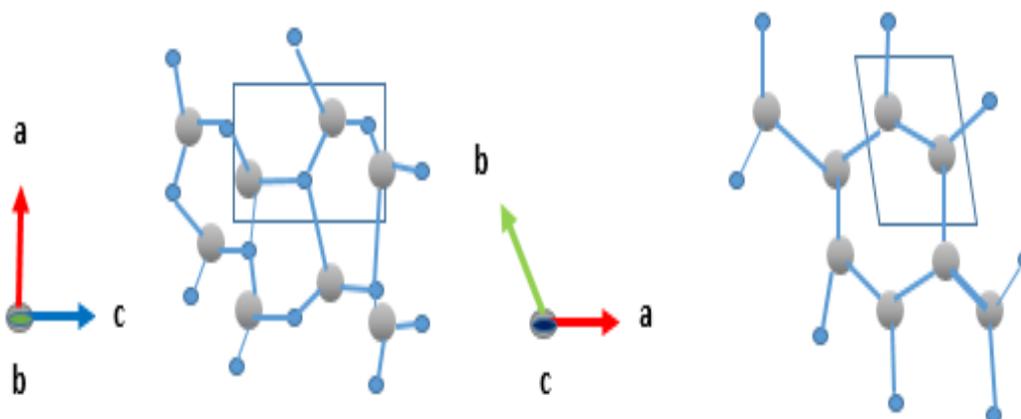


Figure 1.10 Structure cristalline hexagonale de ZnSnN_2 dans différentes directions [9].

L'un des défis majeurs est la compréhension de la structure cristalline de ce matériau. Les données extraites de la littérature et présentées dans le tableau 1.1 (Annexe A) [27]. Le problème est centré sur la nature de la structure cristalline du ZnSnN_2 . La plupart des processus utilisés dans la littérature ne sont pas à l'équilibre thermodynamique. Des structures métastables peuvent alors se former. Maintenant, la question de la structure électronique, des défauts et de la bande interdite (E_g) de semiconducteur ZnSnN_2 de type n qui a une bande interdite directe théorique comprise entre 1 et 2 eV selon le désordre cationique [20,22]. Concernant la structure, il y a deux possibilités pour la structure du ZnSnN_2 . La structure orthorhombique a un cation entièrement ordonné tandis que la structure wurtzite a un sous-réseau de cations entièrement désordonné. En utilisant des calculs de DFT (Théorie de la fonctionnelle de la densité), N. Feldberg et al [22] ont montré que pour le réseau orthorhombique parfaitement ordonné à zéro Kelvin (0K), la bande interdite de ZnSnN_2 est de 2,09 eV, tandis que la bande interdite calculée du réseau monoclinique désordonné est de 1,12 eV. T. D. Veal et al [25] ont confirmé expérimentalement ce comportement de ZnSnN_2 avec différents paramètres par la technique MBE (Molecular-Beam-Epitaxy) avec un bon contrôle de l'ordre des cations dans le film. Ils ont obtenu une bande interdite variant entre 1,33 et 2,38 eV, ce qui est en accord avec les résultats obtenus par N. Feldberg et al [23]. Le décalage de la bande interdite entre les données calculées et les données expérimentales peut être expliqué et interprété comme un décalage de Burstein-Moss dû à une forte concentration de porteurs dans le film (figure 1.11).

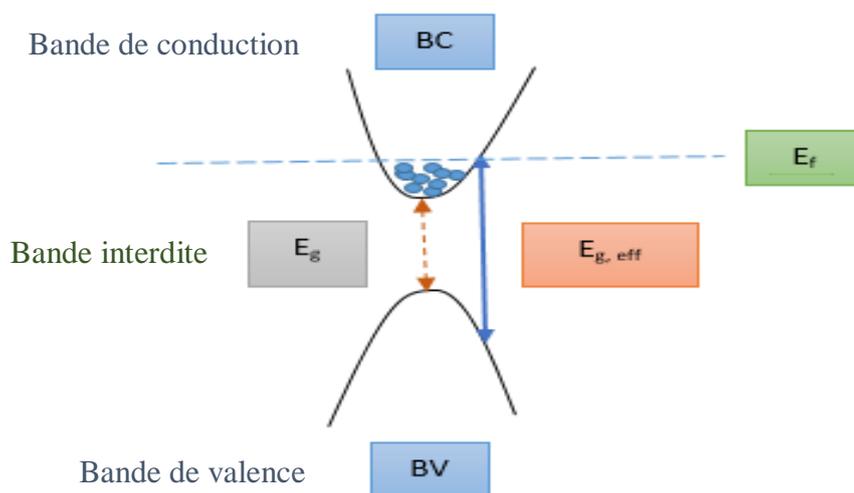


Figure 1.11 Effet Burstein-Moss.

L. Lahourcade et ses collaborateurs [21] ont calculé, en utilisant la méthode de la DFT (théorie de la fonctionnelle de la densité) avec un HSE hybride fonctionnel (Fonctionnel hybride de Heyd-Scuseria-Ernzerhof) à zéro Kelvin, une bande interdite directe de 1,42 eV pour une structure orthorhombique dans le groupe spatial le plus stable $Pna2_1$. À titre expérimental, ils utilisent l'ellipsométrie spectroscopique, ils ont obtenu une valeur de bande interdite optique proche de 2,0 eV. Là encore, la différence avec les résultats théoriques peut être attribuée à l'effet Burstein-Moss en raison des fortes concentrations de porteurs d'électrons mesurées par l'effet Hall. Dans le tableau 1.2 (Annexe A) sont résumées quelques valeurs de bande interdite extraites de travaux antérieurs du $ZnSnN_2$ [27]. D'autre part, des mesures de l'effet Hall ont été utilisées pour le $ZnSnN_2$ afin de mesurer les concentrations de porteurs d'électrons et la mobilité des électrons. Il est clair que l'effet Burstein-Moss peut apparaître dans les couches minces de $ZnSnN_2$ en raison des concentrations de porteurs d'électrons les plus élevées. Les valeurs des concentrations de porteurs d'électrons données dans la littérature varient sur une large gamme. Le premier rapport des mesures de concentration d'électrons dans le matériau $ZnSnN_2$ est donné par Lahourcade et al. [21], ils ont obtenu une concentration d'électrons dans la gamme $5 \cdot 10^{19} - 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ et donc l'effet Burstein-Moss prend en compte dû à cette grande concentration d'électrons. Cependant, la mobilité des électrons était d'environ $10 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$, cette faible mobilité a été attribuée à la petite taille des grains, qui est habituelle pour les matériaux élaborés par pulvérisation. D'autres travaux de Feldberg et al [22] ont mesuré la mobilité et la concentration en électrons du $ZnSnN_2$. Les films ont été élaborés par épitaxie par jets moléculaire donc par la technique MBE (Molecular-Beam-Epitaxy). Ils ont obtenu une mobilité mesurée d'environ $10 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ et la concentration en électrons est de l'ordre de $3 \cdot 10^{20}$ et $1,1 \cdot 10^{21} \text{ cm}^{-3}$. Dans d'autres cas, le $ZnSnN_2$ a été élaboré en utilisant la pulvérisation cathodique

par Deng et al. [23]. Les chercheurs ont mesuré la mobilité et la concentration en électrons après avoir recuit le film dans une atmosphère de N_2 à 300 et 400 °C. Ils ont obtenu une réduction de la concentration en électrons de $1,0 \cdot 10^{18}$ à $2,3 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ et une diminution de la mobilité de 3,98 à $1,86 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ lorsque la température de recuit augmente. De même, Qin et al. [26] ont élaborés du $ZnSnN_2$ par pulvérisation cathodique et ont mesuré la propriété électrique après recuit à 200, 300 et 350 °C. Ils ont obtenu des mobilités entre $0,37 - 2,07 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ et des concentrations d'électrons entre $2,77 \cdot 10^{17}$ et $6,78 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Enfin, Fioretti et al. [27] ont élaborés du $ZnSnN_2$ en utilisant la pulvérisation RF. Ils ont mesuré la mobilité et la concentration électronique en fonction de la stœchiométrie. Des mobilités comprises entre 1,1 et $8,3 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ et des densités de porteurs comprises entre $2 \cdot 10^{18} - 2 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ ont été obtenues et la concentration de porteurs la plus faible a été atteinte avec l'échantillon hors stœchiométrie avec $0,70 = Zn/(Zn+Sn)$. En 2017, Fioretti et al. [27] ont obtenu la valeur la plus faible de la concentration de porteurs pour un film mince de $ZnSnN_2$ riche en zinc en cultivant ce matériau dans le gaz de formation H_2/N_2 puis en le recuisant dans une atmosphère d'azote pendant 6 h à 300 °C. Avec cette méthode, ils ont obtenu une valeur de $4 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ qui est la plus faible. D'autre part, ils ont remarqué que la mobilité des électrons diminue de 5-8 à moins de $1 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ avec le recuit. Ils ont pensé que la diminution de la mobilité pourrait être liée à une augmentation de la diffusion des impuretés ionisées due à une augmentation des accepteurs activés. Feldberg et ses collègues chercheurs [20] ont été les premiers à cultiver le $ZnSnN_2$ en utilisant l'épitaxie par jets moléculaire assistée par plasma. Lahourcade et al. [21] ont élaborés du $ZnSnN_2$ par pulvérisation cathodique (RF). Quelques années plus tard, Veal et al. [25] ont également élaborés du $ZnSnN_2$ en utilisant la technique MBE (Molecular Beam Epitaxy). Quayle et al. [14] ont synthétisé ce composé en utilisant la technique de la vapeur liquide solide assistée par plasma. En utilisant la pulvérisation cathodique, Dang et al [23] ont élaborés une couche fine de $ZnSnN_2$. En 2015, Fioretti et al [27] ont réussi à synthétiser du $ZnSnN_2$ par pulvérisation cathodique RF. Kawamura et al [27] ont synthétisé ce composé sous forme de masse par une réaction de métathèse à haute pression. Enfin, Kuo et al. [27] ont réussi à cultiver ce composé en 2017 en utilisant une approche combinatoire (pulvérisation réactive combinatoire).

1.2 Potentialités des nouvelles propriétés physiques des matériaux $ZnGeN_2$ et $ZnSn_xGe_{1-x}N_2$

Avant d'entamer le deuxième nouveau matériau absorbeur $ZnSn_xGe_{1-x}N_2$ ($Zn-IV-N_2$) qui est à base de $ZnSnN_2$ et $ZnGeN_2$ semblent être de bons candidats pour remplacer les matériaux du

groupe III-V, ou IV référence à Sn, Ge ou Si contiennent des éléments abondants, non toxique et peu chers. Des études trouvent que le ZnGeN_2 respecte l'objectif écologique en termes de cout et l'efficacité de l'émission (LED) par rapport au InGaN , car les matériaux à base d'indium sont réputés pour être polluants, ainsi que l'indium est un métal lourd potentiellement bio-toxique [28]. Dans cette partie, on va parler brièvement sur les travaux précédents concernant les méthodes de synthèse de ZnGeN_2 et ses caractéristiques mesurées. En 1970, la première synthèse de ZnGeN_2 faites par Maunaye et al. [15]. Après, à l'aide de diffraction neutronique, Wintenberger et al. [28] effectuent une analyse cristalline de ZnGeN_2 en mettant en évidence la surstructure orthorhombique du matériau qui s'apparente à une maille monoclinique aux rayon X. En 1974, Larson et al. [28] rapportent la croissance des couches minces de ZnGeN_2 par croissance en phase vapeur. Le produit final de réaction est déposé sur un substrat de saphir. Les films obtenus sont polycristallins d'épaisseur environ 1 à 2 μm avec des tailles de cristallites de l'ordre de 0.1 à 0.5 μm . Ainsi, selon les études structurales de ZnGeN_2 indiquent une structure wurtzite qui est comparée à la structure monoclinique de Maunaye et al. [28]. Ils sont arrivés de l'étudier le comportement électrique et les propriétés optiques du ZnGeN_2 et trouvent une bande interdite de 2.67 eV, afin d'arriver aux similarités entre le ZnGeN_2 et le GaN au niveau de la structure cristalline et de la densité de porteur de charge. En 1992, Endo et al. [16] synthétisent le ZnGeN_2 de structure cristalline orthorhombique avec une caractéristique d'un semiconducteur selon sa résistivité électrique. En 1999, Kikkawa et al. [28] élaborent des couches minces de ZnGeN_2 par pulvérisation cathodique en radiofréquence, les substrats utilisés sont du verre ou du silicium, la croissance du ternaire (ZnGeN_2) fournit un film de silicium cristalline hexagonale. Des mesures d'absorption optique indiquent une bande interdite de 3.1 eV. En 1999, Zhu et al. [28] travaillent sur la croissance épitaxiale par MOCVD et la caractérisation structurale de ZnGeN_2 . Les couches minces obtenus sont d'une épaisseur de 0.6 à 1 μm . Le matériau est épitaxie sur des substrats en saphir et en SiC , il est monocristallin et présente une structure cristalline hexagonale de type wurtzite. En 2000, Osinky et al. [28] exploitent les couches minces de l'alliage $\text{ZnGe}_x\text{Si}_{1-x}\text{N}_2$, avec x allant de 0 à 1, élaboré également par MOCVD de la même manière que Zhu et al. [28]. Des analyses de diffraction de rayon X indiquent une structure orthorhombique et la transmittance optique indique une bande interdite de 3.2 eV. Pearton et al. [28] travaillent sur le ZnGeN_2 plus précisément sur les propriétés magnétiques de $\text{ZnGe}_x\text{Si}_{1-x}\text{N}_2$ implanté au manganèse. Muth et al. [28] rapportent l'étude des propriétés optique de film mince $\text{ZnGe}_x\text{Si}_{1-x}\text{N}_2$ élaboré de la même manière en MOCVD. La croissance des films épitaxies se fait sur un substrat de saphir d'une épaisseur d'environ 1 μm , transparent dans le visible avec une bande interdite de 3.16 eV. En 2001,

Viennois et al. [28] produisent du ZnGeN_2 en effectuant des réactions chimiques en formant des échantillons monophasés orthorhombique. Des mesures réflectance indiquent une forte absorption de la lumière autour de 3 eV, ainsi que le spectre de photoluminescence est semblable à celui de GaN. Dans la période de 2002 à 2004, Misaki et al. [28] rapportent la croissance des couches minces monocristallines sur un substrat du saphir par RPE-MOVPE (Remote-plasma-enhanced metalorganic-vapor-phase). La couche mince atteint une épaisseur de 200 nm après 2h de dépôt, la structure cristalline est orthorhombique et des mesures optiques indiquent une bande interdite direct comprise entre 3 et 3.3 eV. En relation avec les mesures en photoluminescence en température, la bande interdite est estimé à 3.3 eV. Depuis 2008, le groupe Kathleen Kash travaillent sur la synthèse de ZnGeN_2 par croissance en phase vapeur sous flux d'ammoniac (Du et al. [18], Peshek et al., Dyck et al. et Blanton et al. [28]), ils ont obtenu des aiguilles monocristallines de quelques dizaines de μm et quelque μm de plaquettes polycristallines, le spectre de photoluminescence à 4K présente une bande (jaune) autour de 2.6 eV et un pic à 3.4 eV. L'augmentation de la température de la croissance entraine un sous réseau plus ordonné, ils ont observé la transformation de la maille hexagonale en maille orthorhombique. En revanche, des études théoriques et expérimentales est mené sur la spectroscopie Raman, avec la modélisation des modes de vibration et le calcul de la densité d'états du matériau. En 2010, Zhang et al. [28] synthétisent du ZnGeN_2 et du $\text{ZnGeN}_2 : \text{Mn}^{2+}$ par réaction de réduction/nitruration en phase gazeuse sous un flux d'ammoniac. La structure cristalline de la poudre obtenue est orthorhombique. Des mesures en réflexion diffuse indiquent que l'absorption est autour de 3.3 eV. Shang et al. [28] synthétisent également du $\text{ZnGeN}_2 : \text{Mn}^{2+}$ et du ZnGeN_2 par ammonolyse hydrothermale. La structure cristalline est orthorhombique, des mesures en réflexion indiquent une bande interdite estimé à 3.5 eV. Le ZnGeN_2 présente un pic d'émission à 595nm (dans le visible) en photoluminescence. En 2017, Häusler et al. [28] élaborant du ZnGeN_2 par synthèse ammonothermale. De la poudre obtenue, le matériau présente une structure cristalline orthorhombique. Des mesures en réflexion diffuse indiquent une bande interdite estimé à 3.2 eV. Le groupe de Harry Atwater (chercheur américain) travaillent à ce jour sur l'élaboration de films minces de $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$ en copulvérisation cathodique radiofréquence (Coronel et al., Narang et al., et Shing et al. [18,28]). Le substrat est en saphir, ils ont élaboré des quaternaires de composites variables ($\text{AB}_x\text{C}_{1-x}\text{D}$), avec x allant de 0 à 1. Shing et al. [28] complètent l'étude de ce matériau avec une analyse des propriétés optique et électrique et élaborent également par la technique MBE (Molecular-Beam-Epitaxy) [28]. Les tableaux 1.3 et 1.4 (Annexe A) récapitulent les valeurs de paramètre de maille du ZnGeN_2 dans la littérature pour les structures cristallines (orthorhombique,

hexagonale et monoclinique) [28]. Le tableau 1.5 (Annexe A) récapitule les bandes interdites déterminées expérimentalement dans la littérature pour le matériau ZnGeN_2 , ainsi que la méthode utilisée [28]. Sur la base de plusieurs études théoriques, le $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$ devrait avoir des propriétés optiques et électroniques similaires à celles d' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ [29], et peut potentiellement être réglé (modulable) pour couvrir une plage d'énergie de 1,4 eV à 2,9 eV, qui couvre toujours la majorité du spectre visible. Bien que l'alliage ait une gamme plus courte de bandes interdites prédites, il a également une plus petite discordance de paramètre de maille entre ses matériaux constitutifs, ZnSnN_2 et ZnGeN_2 . Ceci est un avantage potentiel pour l'alliage car le grand décalage de réseau est un facteur majeur contribuant à la séparation de phase d' InN et de GaN . Un dispositif photovoltaïque efficace gradué ou multi-jonction pourrait être développé avec n'importe quelle combinaison de bandes interdites entre 1,4 eV et 2,9 eV. Il suffit de rechercher dans la littérature sur le $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ pour avoir une idée de la gamme d'appareils optoélectroniques qui pourraient bénéficier d'une alternative matériaux avec des éléments abondants. À titre de comparaison, la figure 1.12 représente les enthalpies de formation calculées pour les alliages $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ et $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$ indiquent que Sn et Ge sont attendus pour être mélangé plus facilement dans le sous réseau Sn/Ge pour les alliages $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$ que dans le In/Ga sous réseau pour les alliages $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ [29].

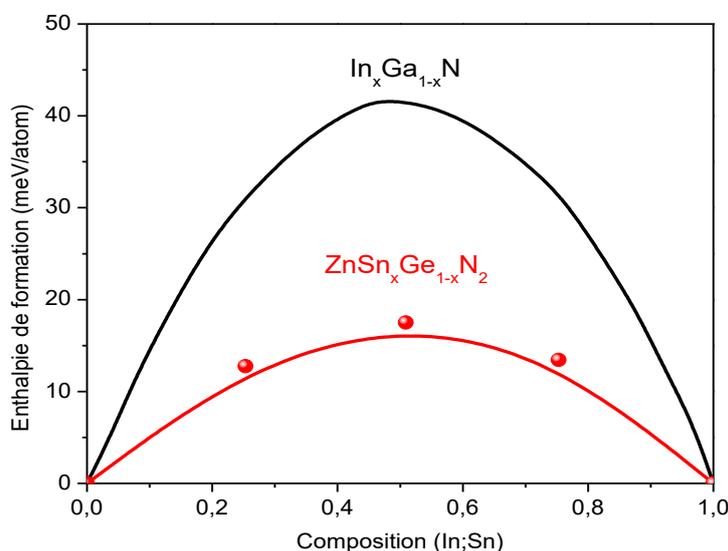


Figure 1.12 Les enthalpies de formation calculées pour les alliages $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ et $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$. [29]

1.3 Spectre solaire

La normalisation (ou la standardisation) du spectre solaire est nécessaire dans le domaine de développement de la cellule photovoltaïque car son fonctionnement varie en fonction de plusieurs paramètres et conditions comme lieu, météo, ..., etc. Pour notre étude, l'intérêt du spectre standard est de faire la comparaison des cellules solaires et d'interpréter leurs comportements dans les mêmes conditions. Pour l'expérimentation en mode réel, dans les laboratoires de caractérisation de la cellule solaire et des modules photovoltaïques on utilise des simulateurs solaires, tels que la distribution spectrale du rayonnement solaire utilisée proche du spectre normalisé. La distance parcourue par le rayonnement lumineux, depuis son entrée dans l'atmosphère allant jusqu'au sol, est exprimé par le terme « Air Mass » AM ou « masse d'air » [30]. La masse d'air permet de quantifier la puissance absorbée par l'atmosphère, en fonction de l'angle θ du soleil et par rapport à l'horizon (figure 1.13). Le nombre attribué à l'air masse est défini par sécante de l'angle entre le soleil et le zénith.

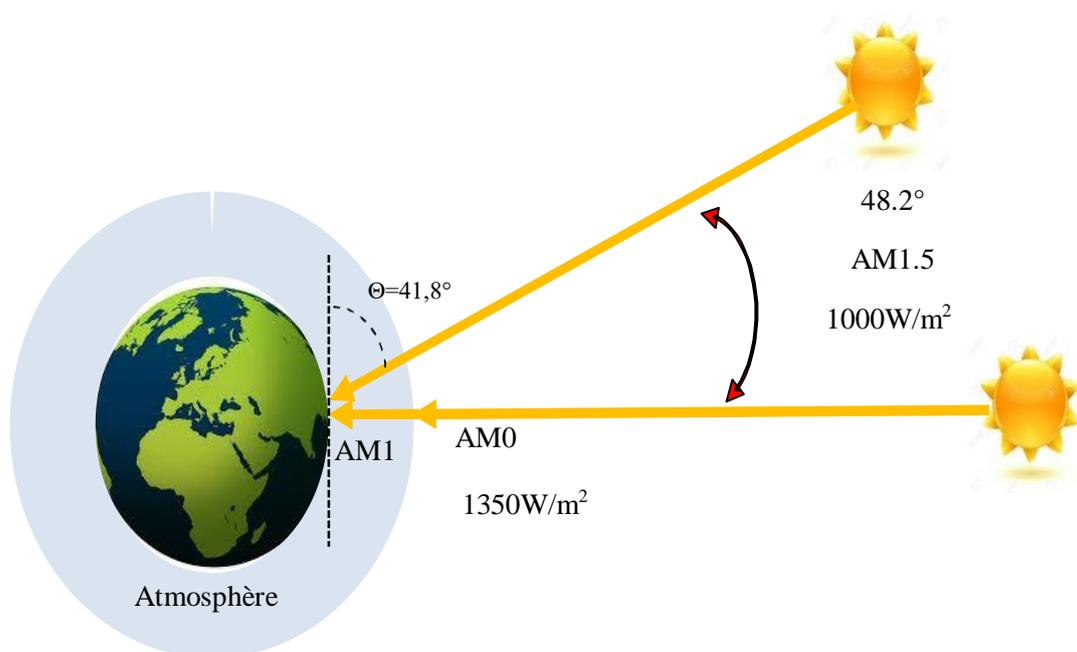


Figure 1.13 Normes et conditions de mesure du spectre d'énergie lumineuse, émise par le soleil, notion de la convention Air Mass [30].

$$AM (Air Mass) = \frac{1}{\cos(\theta)} \quad (1.1)$$

On note qu'au niveau de la terre, toujours $AM > 1$. [31]

$$AM (Air Mass) = \sqrt{1 + \left(\frac{S}{H}\right)^2} \quad (1.2)$$

Où S est la longueur de l'ombre créée par un objet de hauteur H (figure 1.14)

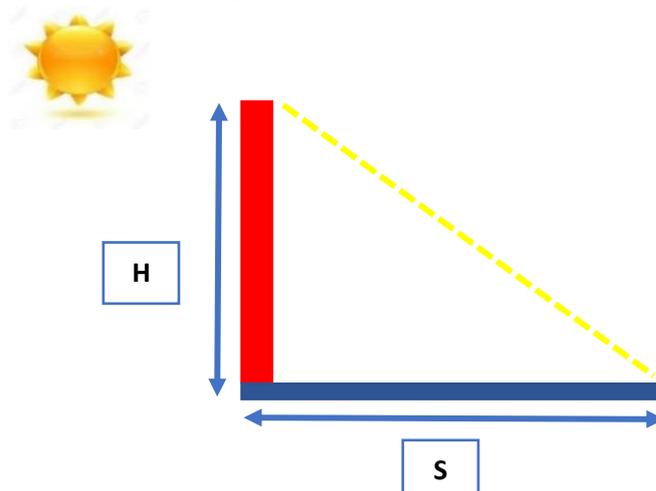


Figure 1.14 Calcul de l'air masse par rapport à H .

La figure 1.15 présente les spectres des rayonnements AM1.5 et AM1.5G (Global) ainsi que celui du rayonnement AM0.

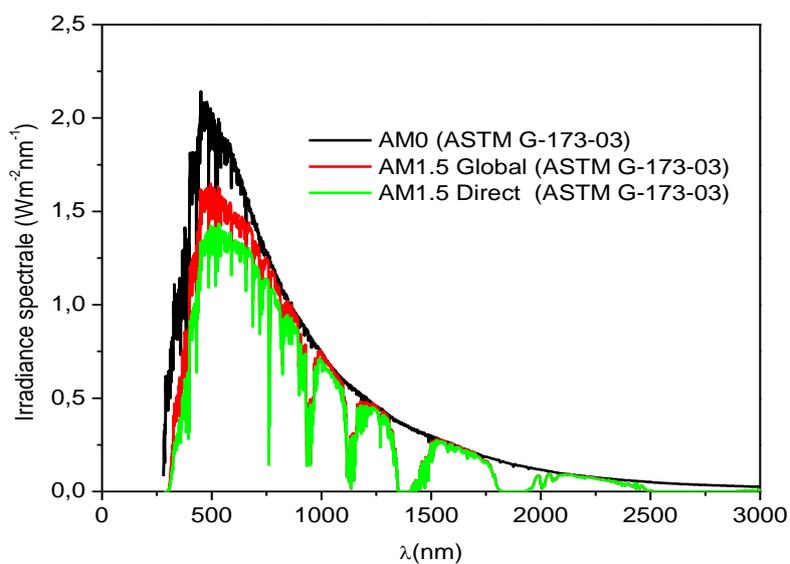


Figure 1.15 Variation spectrale de la puissance émise par le soleil [31].

1.4 Fonctionnement d'une cellule photovoltaïque

Le fonctionnement de la cellule solaire, autrement dit photopile, est basé sur les propriétés des matériaux semiconducteurs utilisées. La figure ci-dessous, la figure 1.16 (a et b) montre le principe de fonctionnement de la cellule solaire avec les principales régions (Émetteur, Base, et zone de charge d'espace (ou zone de déplétion) dans lesquelles les photons incidents peuvent créer des porteurs libres. Dans les zones électriquement neutres (n) et (p), les porteurs minoritaires générés par les photons diffusent, ceux qui atteignent (ZCE) sont propulsés par le champ électrique vers la région où ils deviennent majoritaires et donc ces porteurs de charges contribuent au courant de la cellule solaire par leur diffusion (courant de diffusion). Dans (ZCE), les paires électrons-trous créés par les photons sont dissociées par l'effet de champ électrique, l'électron propulsé vers la région de type n et le trou vers la région de type p, donnant la naissance de courant de génération. Comme nous avons dit dans 1.2, la conversion de l'énergie solaire en électricité est possible si et seulement si les trois phénomènes physiques ont lieu quasi simultanément [32] :

- (1) L'absorption d'un maximum de photons.
- (2) La transformation de l'énergie (effet photovoltaïque) par la génération de porteurs de charges.
- (3) La collecte sans perte de ces porteurs générés vers un circuit extérieur.

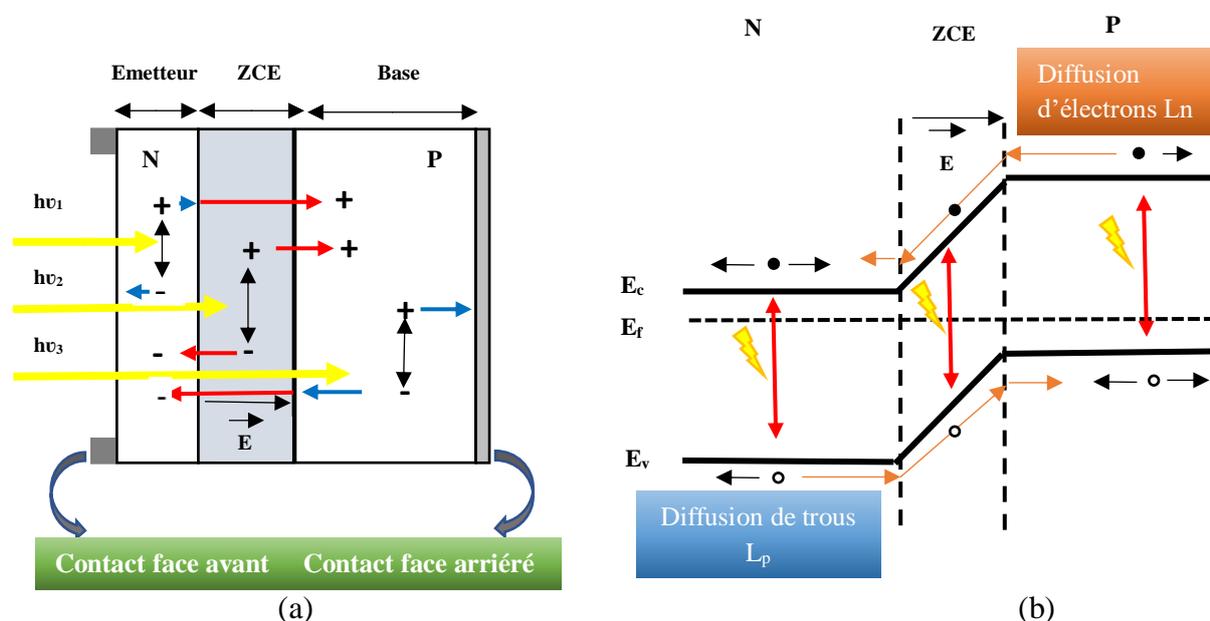


Figure 1.16 Schéma de principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque conventionnelle, (a) structure de la cellule et (b) diagramme des bandes d'énergie [32].

1.5 Caractéristiques I-V et performance d'une cellule photovoltaïque

On peut modéliser le fonctionnement d'une cellule solaire en considérant le schéma électrique équivalent ci-dessous figure 1.17. Pour le cas d'une cellule photovoltaïque idéale, la source de courant modélise le courant généré par les photons et la diode qui modélise la jonction PN. D'ailleurs, pour le cas d'une cellule photovoltaïque réel, le circuit équivalent doit intégrer les pertes. La résistance série (R_s) modélise les pertes résistives au sein de la photopile ou la cellule solaire. La résistance shunt (R_{sh}) modélisant les courants de fuite au niveau de la jonction PN [33].

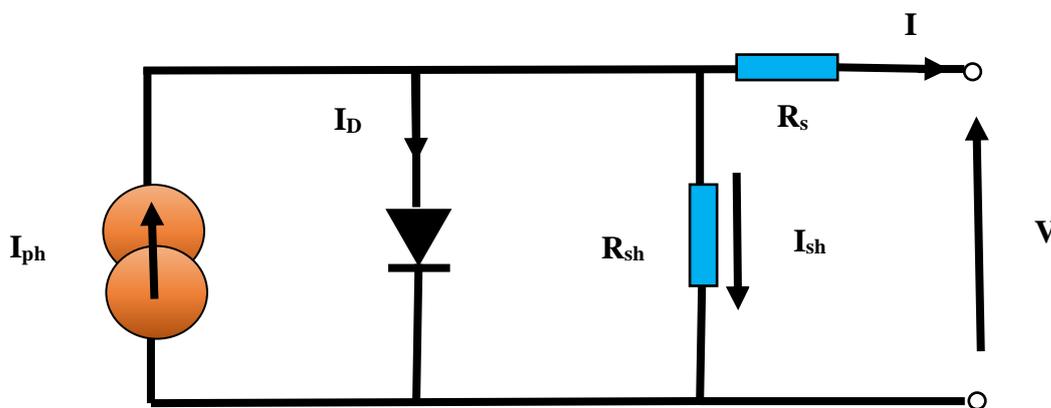


Figure 1.17 Schéma électrique réel de la cellule solaire [33].

Selon le schéma équivalent d'une cellule solaire dans La figure 1.17, on a :

$$I = I_{ph} - I_d - \left(\frac{V + IR_s}{R_{sh}} \right) \quad (1.3)$$

$$I = I_{ph} - I_s \left[\exp \left(\frac{V + IR_s}{nKT} \right) - 1 \right] - \left(\frac{V + IR_s}{R_{sh}} \right) \quad (1.4)$$

ou :

q : la charge élémentaire d'un électron égale à $1.602 \cdot 10^{-19}$ C.

K : constante de Boltzmann ($8.62 \cdot 10^{-5}$ eV/K).

T : température en Kelvin.

I_d : courant de la diode.

I_s : courant de saturation.

I_{ph} : courant photogénéré.

R_s : résistance série en Ω .

R_{sh} : résistance parallèle en Ω .

n : facteur d'idéalité.

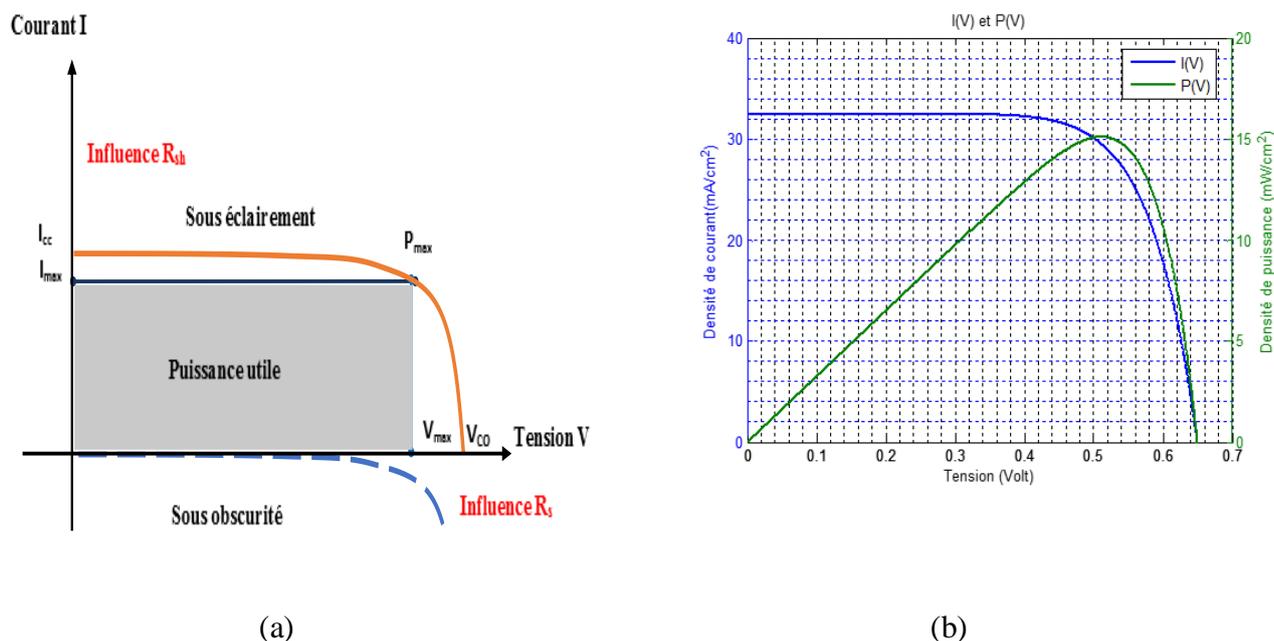


Figure 1.18 (a) La caractéristique I-V d'une cellule à l'obscurité et sous éclairement, (b) les caractéristiques $I(V)$ et $P(V)$ délivrées par la cellule en fonction de la tension de polarisation [33].

On introduit maintenant le modèle à deux diodes (la figure 1.19) en tenant compte les différents composants qui constituent une cellule réelle, parmi ces composants les résistances, comme nous avons cités précédemment. Nous parlerons et définirons en détail chacun séparément. La résistance série prend en compte la résistivité propre aux contacts entre les différentes régions constituent la cellule photovoltaïque, comme l'émetteur, la base et bien sûr les contacts métalliques, la R_s doit idéalement être la plus faible possible (contrairement à R_p) pour le bon fonctionnement de la cellule solaire, ainsi que le dopage élevé entraîne une augmentation de la probabilité de recombinaison des porteurs et donc la baisse de courant photogénéré ou J_{cc} . La R_p (résistance parallèle) ou shunt ou résistance de court-circuit traduit par le shunt à travers l'émetteur, causé par la présence de défauts. Contrairement à R_s , la valeur de R_p devra être la plus élevée possible. Le courant de la cellule photovoltaïque est donc donné par la relation suivante : [34]

$$I = I_{ph} - I_{d1} - I_{d2} - \left(\frac{V + IR_s}{R_{sh}} \right) \quad (1.5)$$

$$I = I_{ph} - I_{s1} \left(\exp \left(\frac{q(V + IR_s)}{n_1 kT} \right) - 1 \right) - I_{s2} \left(\exp \left(\frac{q(V + IR_s)}{n_2 kT} \right) - 1 \right) - \frac{V + IR_s}{R_p} \quad (1.6)$$

avec, q : la charge élémentaire d'un électron égale à $1.602 \cdot 10^{-19}$ C.

K : constante de Boltzmann ($8.62 \cdot 10^{-5}$ eV/K).

T : température en Kelvin.

I_{d1} : courant de la diode 1. / I_{d2} : courant de la diode 2.

I_{s1} : courant de saturation de la diode 1. (Ou courant de diffusion)

I_{s2} : courant de saturation de la diode 2. (Ou courant de diffusion)

I_{ph} : courant photogénéré.

R_s : résistance série en Ω .

R_{sh} : résistance parallèle en Ω .

n_1 : facteur d'idéalité de la diode 1, qui doit être ≥ 2 .

n_2 : facteur d'idéalité de la diode 2 doit être proche de 1.

On note que pour le cas réel de la cellule présente un courant total plus faible que celui de la cellule idéale.

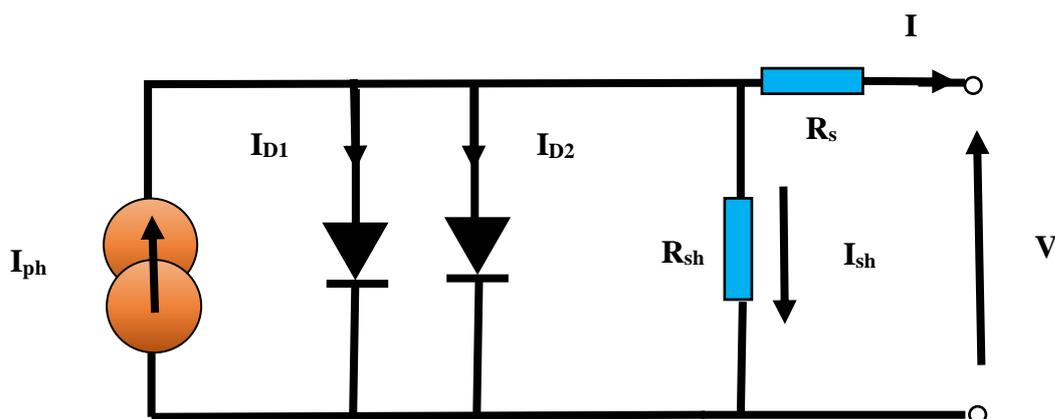


Figure 1.19 Schéma électrique réel de la cellule solaire à deux diodes [34].

En général, une cellule est caractérisée par sa caractéristique $I(V)$ sous un éclairement AM 1.5G dont un exemple est donné à la figure 1.18. À partir de courbe $I(V)$, on définit trois facteurs [35] :

- 1- I_{cc} le courant de court-circuit qui correspond au courant produit à tension nulle $V=0$ ($I_{cc}=I_{ph}$). Le courant devient plus élevé si l'absorption de la cellule est grande et les processus de recombinaisons sont faibles.
- 2- V_{co} la tension de circuit ouvert ou tension à vide qui correspond à la tension de la cellule à courant nul ($I=0$). Elle dépend en particulier de la température, de l'éclairement, du dopage et des matériaux utilisés. Le V_{co} est donnée par l'équation suivante :

$$V_{co} = \frac{nKT}{q} \ln\left(\frac{I_L}{I_0} + 1\right) \text{ à } I = 0 \quad (1.7)$$

On note que V_{co} dépend fortement à la température (T).

3- FF le facteur de forme (ou facteur de remplissage) défini par :

$$FF = \frac{(I_{max} \cdot V_{max})}{(I_{cc} \cdot V_{co})} \quad (1.8)$$

où V_{max} et I_{max} sont la tension et le courant obtenus au point de fonctionnement maximal (puissance maximale).

4- Le rendement η de la cellule peut ensuite être calculé à partir de ces facteurs :

$$\eta = \frac{P_{max}}{P_i} = \frac{(I_{cc} \cdot V_{co} \cdot FF)}{P_{incidente}} \quad (1.9)$$

avec $P_{incidente}$ la puissance lumineuse reçue.

1.6 Le rendement quantique

Il existe deux types d'efficacité quantique des cellules solaires qui sont l'efficacité quantique externe et efficacité quantique interne. Le rendement quantique externe (EQE) est défini comme le rapport du nombre de porteurs collectés sur le nombre de photons incidents d'une énergie ($h\nu$) donnée. Le comportement de l'efficacité quantique de région qui constitue la cellule solaire dépend de plusieurs facteurs comme l'énergie reçue. Parmi ces facteurs qui influent sur le rendement quantique externe, les phénomènes de recombinaison en surface et volume, la réflexion sur la face avant (pertes optiques) et la faible longueur de diffusion des porteurs. La figure 1.20 présente les différents facteurs qui influent sur le rendement quantique externe. Pour une longueur d'onde donnée, le rendement quantique extérieur est égal à 1 (100%) si chaque photon génère un électron.

En général, la réponse spectrale calculé à partir de rendement quantique externe est [36] :

$$SR \text{ (ou } RS) (\lambda) = \frac{q \cdot \lambda \cdot EQE(\lambda)}{h \cdot c} \quad (1.10)$$

L'efficacité quantique externe ou le rendement quantique externe est donnée par la relation suivante : [36]

$$EQE(\lambda) = [1 - R(\lambda)] \cdot [1 - \exp(-\alpha w)] \quad (1.11)$$

ou :

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

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

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

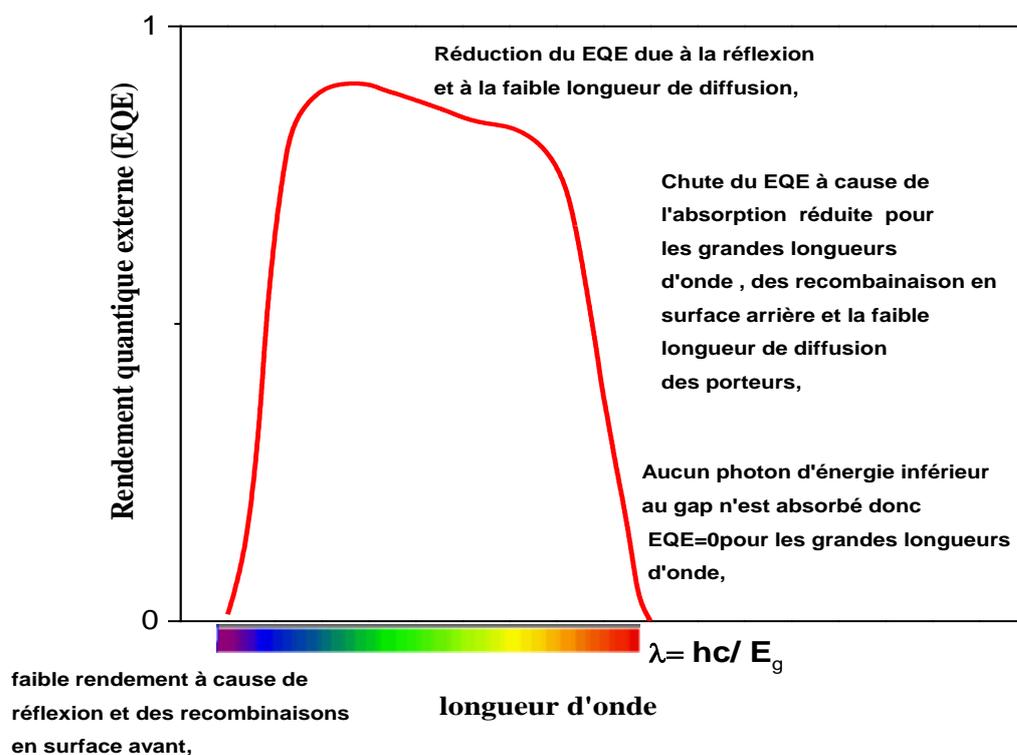


Figure 1.20 Rendement quantique externe d'une cellule photovoltaïque. [36]

Une fois le EQE total est calculé et l'introduction du spectre solaire (F) "AM1.5", le photocourant est déterminé par intégration [36] :

$$I_{ph}(\lambda) = q \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} F(\lambda) \cdot EQE(\lambda) \cdot d\lambda \quad (1.12)$$

avec, q : la charge élémentaire (c).

λ : la longueur d'onde (m)

$F(\lambda)$: spectre solaire.

$EQE(\lambda)$: efficacité quantique externe (%).

Le rendement quantique interne (IQE), si l'on prend en compte la réflectivité de la surface de la cellule photovoltaïque, on peut le calculer à partir de rendement quantique externe [36] :

$$IQE(\lambda) = \frac{EQE(\lambda)}{1-R(\lambda)} \quad (1.13)$$

avec , R le spectre de réflexion.

On note que IQE est égale au EQE : aucune perte de photons n'est donc considérée.

1.7 Facteurs limitant le rendement de conversion

En pratique, il y a plusieurs facteurs limitant le rendement de conversion, ces facteurs sont physique liées aux matériaux constituant la cellule, et techniques par les limites de processus de fabrication. La figure 1.21 montre les différentes pertes existant dans les cellules solaires.

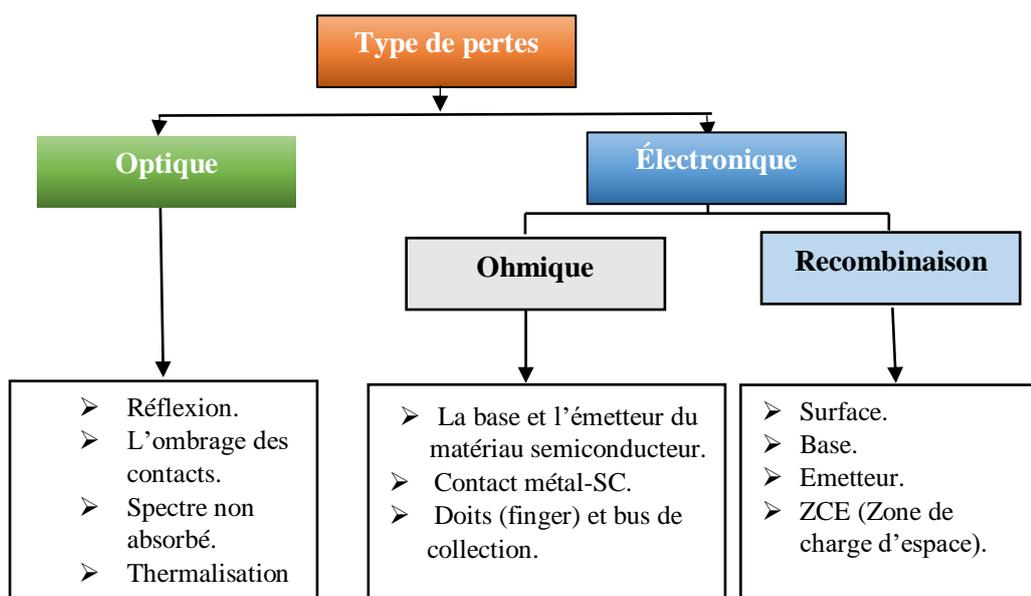


Figure 1.21 Les différentes pertes existant dans les cellules solaires. [36]

1.8 Les phénomènes de recombinaison

Comme nous avons cités précédemment sur le bon fonctionnement de la cellule solaire qui est basé sur la création et la séparation de charge pairs (e^- - trou) par absorption photonique de la lumière et sous l'action d'un champ électrique, dans ce contexte, il existe toujours des effets qui limitant les performances des cellules solaires, par exemple les recombinaisons de pairs (e^- - trou). Comme les cellules solaires est généralement à base des semiconducteurs, le mécanisme de recombinaison est caractérisé par un taux de recombinaisons représentent le nombre de recombinaison par unité de temps et volume. Il existe principalement trois mécanismes [37] :

- a. Les recombinaisons Auger.
- b. Les recombinaisons Shockley-Read-Hall.
- c. Les recombinaisons radiatives.

1.8.1 Les recombinaisons Auger

Ce mécanisme de recombinaison représenté sur la figure 1.22, il s'agit d'une recombinaison bande à bande, mais l'énergie libérée est transmise à un troisième porteur se retrouvant excité (un excès de l'énergie cinétique) dans un niveau supérieur de la bande de conduction. Le 3^{ème} porteur peut ensuite se thermaliser en émettant un ou plusieurs quanta de vibrations (ou phonons) également pour les trous dans la bande de valence [37]. Ce type de recombinaison est peu probable dans les matériaux à grand gap [38].

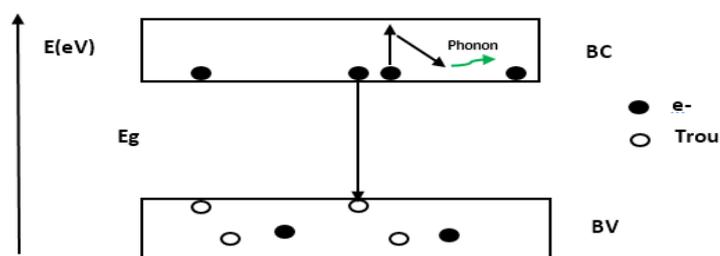


Figure 1.22 Schéma de la recombinaison Auger.

1.8.2 Les recombinaisons Shockley-Read-Hall

Ce mécanisme de recombinaison non radiative représenté sur la figure 1.23, ce mécanisme fait intervenir un défaut localisé dans la bande interdite du matériau semiconducteur, qui peut être un centre de recombinaison pour les porteurs libres. [37] Les défauts de ce type de recombinaison sont prépondérants dans les matériaux nitrures et donc nos matériaux étudiés. [39] Ainsi, il jouera un rôle important dans le fonctionnement des cellules solaires. [40]

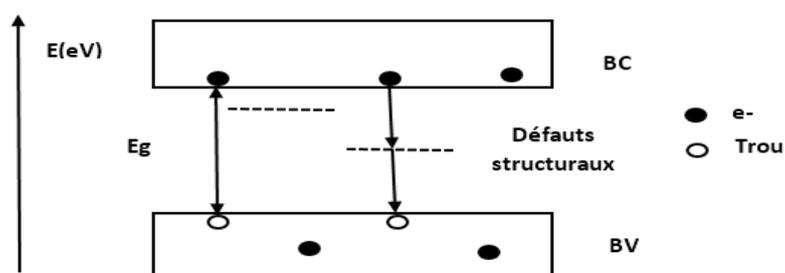


Figure 1.23 Schéma de la recombinaison Shockley-Read-Hall.

1.8.3 Les recombinaisons radiatives

Ce mécanisme de recombinaison représenté sur la figure 1.24, appelé aussi recombinaison bande à bande, correspond à la transition d'un électron (e^-) de la bande de conduction vers la bande de valence. S'accompagne de l'émission de la lumière (un photon) d'énergie proche de celle du gap du matériau (processus inverse de la photogénération ou la photoluminescence). Cette propriété est la base de nombreux appareils optoélectroniques comme émetteurs de lumière (comme les diodes électroluminescentes " LEDs") [41]. Ce type de recombinaison sont prépondérant dans les semiconducteurs à gap direct tels que les nitrures. [42]

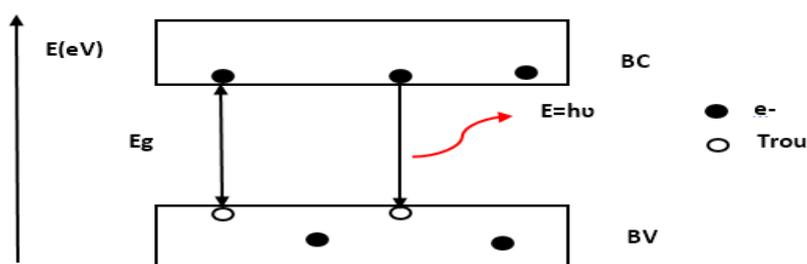


Figure 1.24 Schéma de la recombinaison radiative.

1.9 Différentes technologies photovoltaïques

1.9.1 Le silicium

Dans l'industrie, le silicium offre de nombreux avantages due à la non toxicité et l'abondance qui présente ~ 20 % dans la croute terrestre [43]. D'autre part, le silicium se forme de silice SiO_2 (un oxyde naturel) qui trouve de nombreuse application en microélectronique et optoélectronique. Enfin, il est possible de moduler et modifier les propriétés électriques du Si, par exemple le dopage par le bore (un dopage de type P) ou le phosphore (un dopage de type N), d'un point de vue optoélectronique qui nous intéressent. Le seul inconvénient du Si réside malheureusement dans sa structure électronique qui présente un gap indirect, $E_g=1.12$ eV à 300K, correspondant à $\lambda=1107$ nm [44]. Parmi les différentes formes sous lesquelles est employé le Si dans l'industrie photovoltaïque.

1.9.1.1 Le silicium monocristallin.

Pour la fabrication des dispositifs microélectronique et optoélectronique nécessite des substrats monocristallins semiconducteurs de grande pureté, par exemple du Si (IV), du Ge (IV), ou de GaAs (III-V) [45]. Dans le cas du Si, pour obtenir des lingots monocristallins de grande pureté, il existe plusieurs méthodes, comme la fusion de zone et le tirage en creuset (méthode de Czochralski « CZ ») [45]. Pour le photovoltaïque (PV), le silicium monocristallin (figure1.25) permet d'obtenir les meilleurs rendements du au faible défauts recombinaisons. Cependant, d'un point de vue économique, son élaboration est très couteuse, ce qui va ralentir son développement industriel pour les applications photovoltaïques. [45]

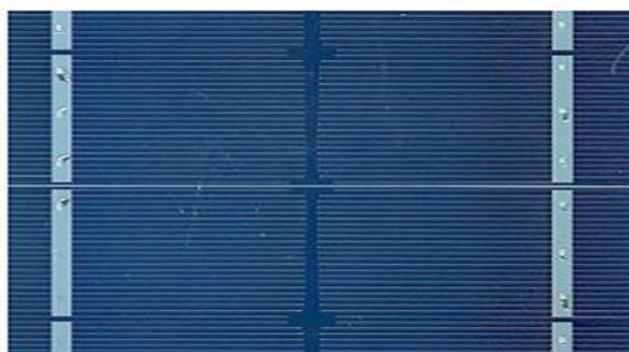


Figure 1.25 Silicium monocristallin. [46]

1.9.1.2 Le silicium multicristallin (mc-Si).

Afin de réduire les couts de production et la fabrication des cellules solaire à base de Si, le silicium multicristallin est moins cher que le silicium monocristallin, a été introduit la 1^{ère} fois dans les années 70 [47]. Le silicium multicristallin se situe entre celle du silicium monocristallin et celle du silicium amorphe il se présente se forme des lingots de silicium, constitué de grains (qqmm-qqcm) [47]. Comparant avec d'autres techniques de production du Si monocristallin, elle est plus simple donc moins cher à mettre en œuvre [47]. Mais la qualité de ce matériau est moins bonne pour le photovoltaïque car la présence de joints de grains (figure 1.26) donc moins homogénéités introduisent des zones fortement recombinaisons et donc la baisse de courant photogénéré de la cellule photovoltaïque ainsi que les liaisons pendantes à effet de réduire la durée de vie des porteurs caractérisés par un courant de fuite à travers la diode (la jonction). [47] Il existe deux types de défauts dans le silicium multicristallin (mc-Si) « intragranulaires et intergranulaires » [48].



Figure 1.26 Silicium multicristallin (mc-Si). [46,49]

1.9.1.3 Le silicium amorphe (a-Si)

Maintenant pour le cas de silicium amorphe (figure 1.27), il a une structure atomique désordonnée, non cristallisée et vitreuse, mais il possède un coefficient d'absorption bon par rapport au silicium cristallin ($\alpha_{a-Si} > \alpha_{c-Si}$). Le silicium amorphe est obtenu de façon simple par dépôt en phase vapeur sur des substrats moins chers donc économique tels que le verre [50].



Figure 1.27 Cellule du silicium amorphe en couche mince. [46]

Malgré que le marché soit dominé par le silicium, des nombreuses recherches sur les matériaux semiconducteurs, on conduit à l'apparition d'une diversité de technologies photovoltaïques utilisant des complexes matériaux. Parmi ces technologies, les couches minces (les cellules de deuxième génération), les cellules de troisième génération et les cellules de quatrième génération. En outre, le silicium amorphe, fait le lien entre deux technologies 1ère et 2^{ème} générations (couche minces).

1.9.2 Les technologies couches minces

Parmi les technologies plus courantes aujourd'hui produits industriellement sont :

- Le Tellure de Cadmium (CdTe), qui présente l'avantage d'une très grande stabilité dans le temps et d'un coût modéré [51].
- Le Cuivre/Indium/Sélénium (CIS) [52], le Cuivre/Indium/Gallium/Sélénium (CIGS) [53] et le Cuivre/Indium/Gallium/Diséléride/Disulphide (CIGSS) [54], qui présentent les rendements les plus élevés parmi les couches minces mais à un coût plus élevé.
- L'Arséniure de Gallium (GaAs) dont le haut rendement et le coût très élevé conduisent à en réserver l'usage essentiellement au domaine spatial [55].

Ces filières représentent plus de 23 % du marché photovoltaïque mondial actuel, mais on a vu récemment une élévation de la technologie CIGS malgré impact du COVID-19 sur le marché PV [56]. Le modèle de la cellule en couches minces est constitué d'un empilement de plusieurs composés qui sont représentés sur la figure 1.28 [57] :

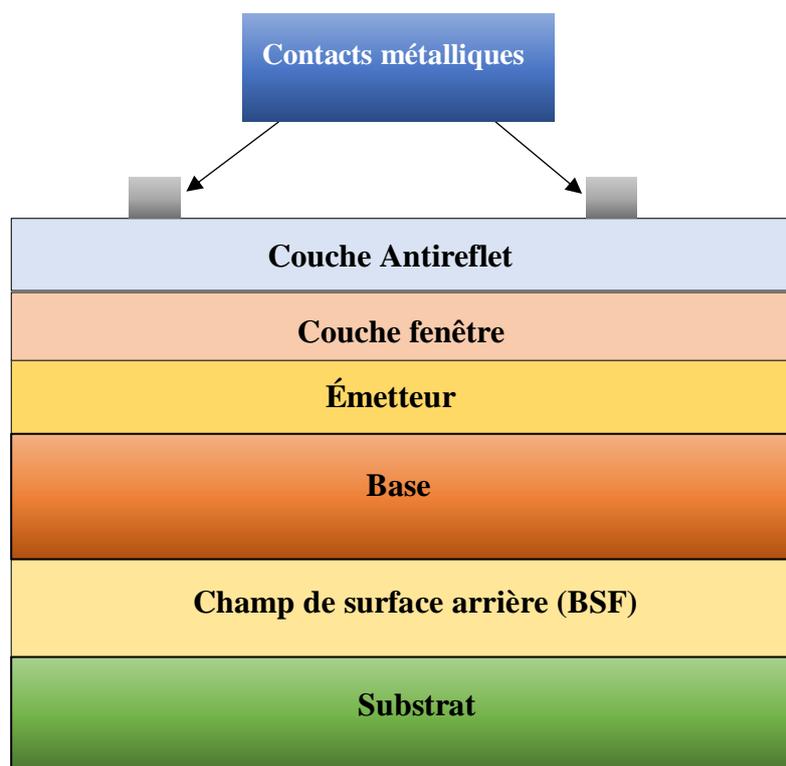


Figure 1.28 : Structure d'une cellule standard. [57]

- ❖ Couche antireflet : couche anti-réfléchissante est de réduire la réflectivité de la cellule au niveau de la face avant. [57]
- ❖ Couche fenêtre : une fine couche fortement dopée avec même type de dopage que celui de l'émetteur, pour créer une barrière de potentiel dont l'objectif est de minimiser la recombinaison sur la face avant de la cellule photovoltaïque. [57]
- ❖ Emetteur et base : l'émetteur une couche mince pour minimiser l'absorption, cette couche généralement est dopée (n) et la base dopée (p). Donc la base ou l'absorbeur ou la couche active constituée à partir deux matériaux, premier donneur (émetteur) et second accepteur(base) formant une jonction n-p (accepteur-donneur). [57]
- ❖ Champ de surface arrière (BSF) : une couche fortement dopée avec même type de dopage que celui de la base, sert à minimiser la recombinaison en face arrière de la cellule. [57]
- ❖ Substrat : Sur lequel est déposée la cellule photovoltaïque, il y a plusieurs facteurs pour le choix du substrat, des critères physico-chimiques et mécaniques. [57]
- ❖ Les contacts métalliques avant et arrière : constituant les électrodes négative (-) et positive (+) chargée pour collecter le courant photogénéré. [57]

1.9.3 Les technologies multi-jonctions à haut rendement

On remarque que la plupart des cellules photovoltaïques sont constituées d'une seule jonction PN comme nous avons cités dans 1.1.3, mais la gamme d'absorption du spectre solaire est limitée par le gap du matériau. De manière générale, les cellules photovoltaïques multi-jonctions peuvent être vues comme un empilement de matériaux avec des gaps décroissants (gamme d'absorption différente pour chaque matériau), donc est capable de convertir plus du spectre solaire avec des rendements très importants. D'après la figure 1.4, les cellules multi-jonctions à base de semiconducteurs III-V présentent les rendements les plus élevés ~ 40 % par l'association des matériaux du trois à quatre jonctions accordées en mailles [58]. Ce genre de cellule solaire servent aux applications spatiales depuis environ 25 ans [59].

1.9.4 Les cellules organiques

Les cellules solaires organiques ou « OPVCs » (Organic Photo Voltaic Cells), possèdent la particularité par rapport aux autres cellules solaires de l'utilisation de petites molécules organiques, ou des polymères organiques conjugués, ainsi qu'il est possible de transporter des porteurs de charges et pouvant être déposés soit par évaporation, soit par dépôt liquide, mais la voie liquide reste jusqu'à maintenant fortement attractive du fait de sa facilité de mise en forme et de son faible coût de fabrication ce qui est important dans la recherche sur les cellules photovoltaïques et parmi les critères de choix [60].

1.9.5 Les cellules à base de colorant ou cellules Graëtzel

En 1991, les cellules Graëtzel ont été mises au point par le groupe du professeur M. Graëtzel de l'Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, les cellules à base de colorant « DSCs » (Dye-sensitized Solar Cells) sont constituées d'un oxyde semiconducteur inorganique photosensibilisé par un colorant organique ou métallo-organique, ainsi que les principaux avantages qui caractérisent ce type de cellules, une fabrication moins d'énergie que les cellules à base de silicium, des performances qui ne sont pas affectées par la hausse de température, une mise en forme possible sur supports souples et un fonctionnement sous faible illumination [60]. Les meilleurs rendements de conversion de puissance obtenus en laboratoire pour ce type de technologie dépassent actuellement les ~14 % [61]. Selon ses caractéristiques, ce type de cellules solaires constitue une excellente alternative aux cellules solaires à base de silicium amorphe [60].

1.9.6 Les cellules à base de nanostructures

L'effet de confinement quantique est observé lorsque la taille de la particule est trop petite pour être comparable à la longueur d'onde de l'électron (la longueur de Broglie). Pour comprendre cet effet, nous expliquons les mots comme quantique et confinement, le mot confinement signifie confiner le mouvement d'un électron en mouvement aléatoire pour restreindre son mouvement à des niveaux d'énergie spécifiques (discrétion) et quantique reflète le domaine atomique des particules (monde géré par les statistiques et les probabilités). Ainsi, à mesure que la taille d'une particule diminue jusqu'à ce que nous atteignons une échelle nanométrique, la diminution de la dimension de confinement rend les niveaux d'énergie discrets et cela augmente ou élargit la bande interdite et finalement l'énergie de la bande interdite augmente également.

Cependant, leurs absorptions optiques et leurs émissions peuvent être réglées via l'effet de taille quantique. On constate que les propriétés physiques ou optoélectroniques en particulier qui nous intéressent, dépendent de la taille et de la forme de ces nanostructures [62]. Parmi les techniques de croissance de ces nanostructures le MBE (Molecular-Beam-Epitaxy) et le PECVD (Plasma-Enhanced Chemical-Vapour-Deposition), ont permis de réaliser en général des structures à base de semiconducteurs à dimensionnalité réduite [63]. Pour les applications photovoltaïques, l'utilisation de cette nanotechnologie consiste à optimiser l'absorption pour augmenter le rendement de conversion des cellules par l'insertion des nanostructures, ce qui peut être appelé « des atomes artificiels », dans une cellule à une jonction ou plusieurs jonctions p-n [64], ainsi les cellules conventionnelles (p-i-n), l'insertion des nanostructures dans la région intrinsèque. [65]. Si un semiconducteur ayant un gap optique E_{gA} appelé couche active est entouré par un matériau de gap E_{gB} plus grand, appelé barrière, ceci crée des zones dans lesquelles les porteurs (électrons/trous) sont confinés avec des énergies quantifiées [63]. Le nombre de degrés de liberté et les directions de confinement est indiquée dans tableau 1.6 (Annexe A) [62]. Une vue d'ensemble de la dimensionnalité des matériaux, de la relation de dispersion et de la correspondance la densité des états et la densité efficace des états près des minimum d'une bande de conduction est indiquée dans tableau 1.7 (Annexe A) [66].

Les différentes structurations de la matière (les puits quantiques, les fils quantiques et les boîtes quantiques) et leur densité d'états électroniques en fonction de l'énergie des électrons sont représentées dans la Figure 1.29 [66].

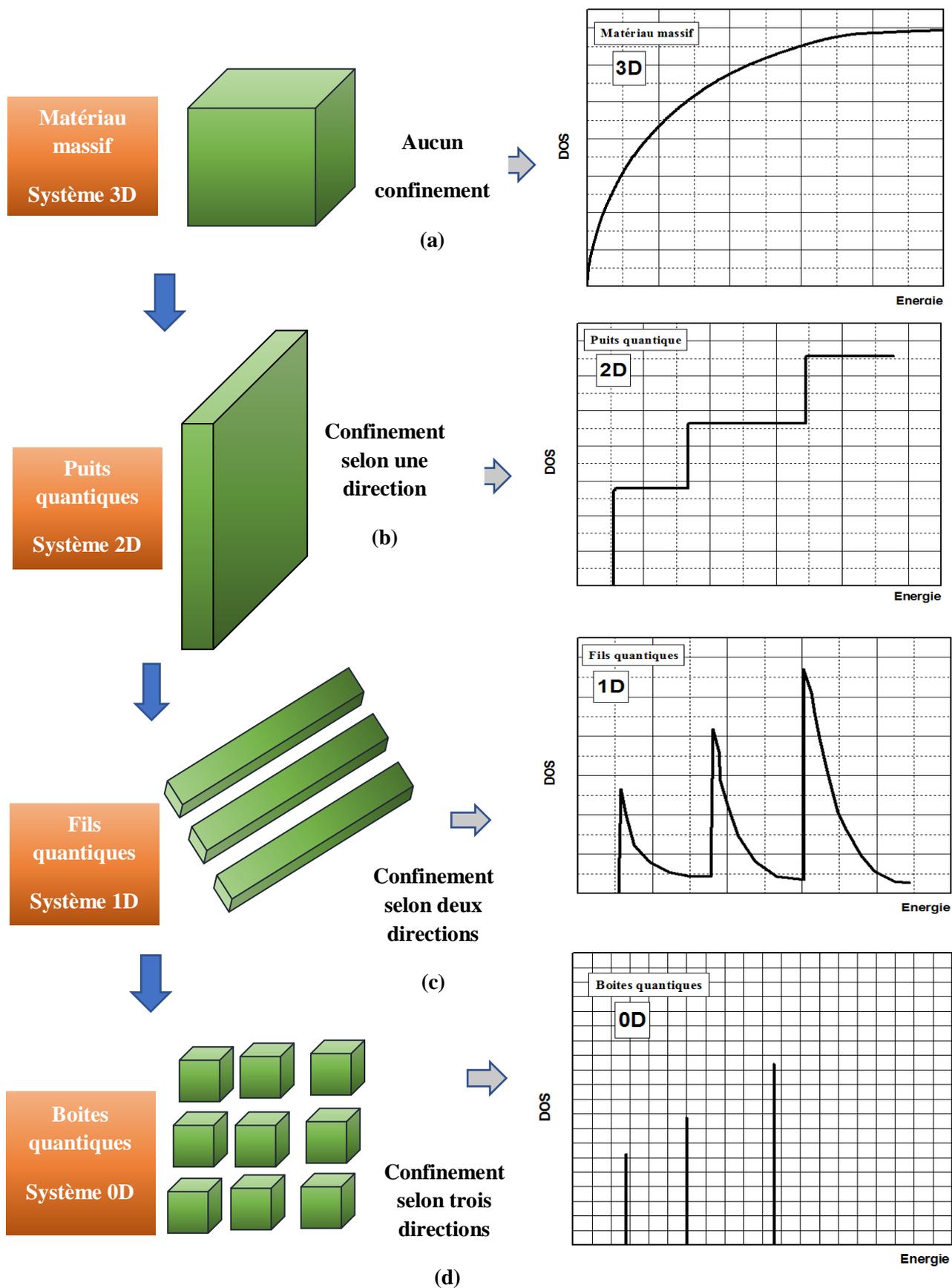


Figure 1.29 Évolution de la densité d'états avec le niveau de confinement quantique. [66]

Les cellules solaires peuvent être classées par catégorie dans quatre générations selon la figure 1.30 [67] :

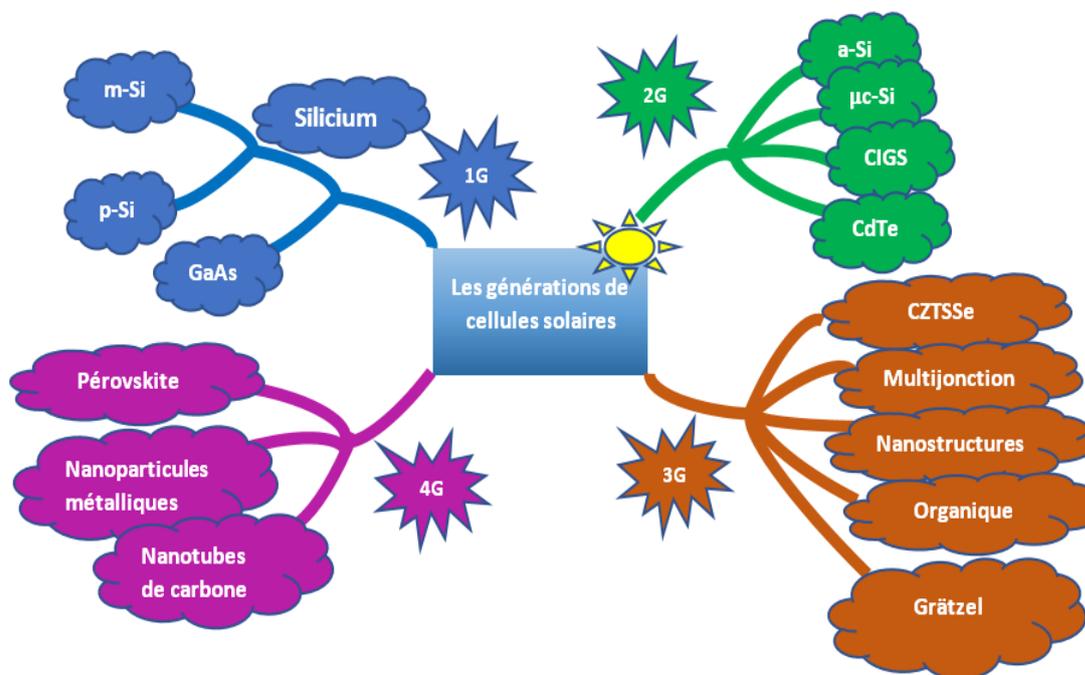


Figure 1.30 Classification des principales technologies de cellule solaire PV [67]

1.10 Conclusion

Le premier chapitre est une introduction bibliographique au travail de thèse. Nous avons soulevé la question de l'abondance des matériaux et du manque de certains éléments sur terre. Ensuite, nous avons soulevé la question de la demande d'énergie, en particulier la question de la production d'énergie. En revanche, le soleil est une réelle opportunité car c'est une source d'énergie gratuite qui pénètre dans la terre. Nous avons présenté également les différentes technologies photovoltaïques en cours de développement, mais nous voulons utiliser la technologie verte pour produire de l'électricité, c'est-à-dire utiliser des matériaux bon marché qui contiennent des éléments abondants, non toxiques et peu coûteux avec des caractéristiques optoélectroniques intéressantes.

1.11 Références

- [1] Rare Earth Elements—Critical Resources for High Technology | USGS Fact Sheet 087-02. (s. d.). Consulté 1 Décembre 2020, à l'adresse <https://pubs.usgs.gov/fs/2002/fs087-02/>.
- [2] Key World Energy Statistics 2020 – Analysis—IEA. (2020). Consulté 1 Décembre 2020, à l'adresse <https://www.iea.org/reports/key-world-energy-statistics-2020>.
- [3] Photovoltaics Report—Fraunhofer ISE. (2020). Fraunhofer Institute for Solar Energy Systems ISE. Consulté 1 Décembre 2020, à l'adresse <https://www.ise.fraunhofer.de/en/publications/studies/photovoltaics-report.html>.
- [4] Fatet, J. (2005). Les recherches d'Edmond Becquerel sur la nature de la lumière entre 1839 et 1843, histoire d'une interaction réussie entre science et photographie (Numéro 2005LYO10237) [Theses, Université Claude Bernard Lyon 1]. <https://hal.archives-ouvertes.fr/tel-01164450>.
- [5] Efficiency-chart.png (1200×665). (2021.). à l'adresse <https://www.nrel.gov/pv/cell-efficiency.html>.
- [6] Dimroth, F., Tibbits, T. N. D., Niemeyer, M., Predan, F., Beutel, P., Karcher, C., Oliva, E., Siefert, G., Lackner, D., Fuß-Kailuweit, P., Bett, A. W., Krause, R., Drazek, C., Guiot, E., Wasselin, J., Tauzin, A., & Signamarcheix, T. (2016). Four-Junction Wafer-Bonded Concentrator Solar Cells. *IEEE Journal of Photovoltaics*, 6(1), 343-349. <https://doi.org/10.1109/JPHOTOV.2015.2501729>.
- [7] Karg, F. (2012). High Efficiency CIGS Solar Modules. *Energy Procedia*, 15, 275-282. <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2012.02.032>.
- [8] Turren-Cruz, S.-H., Hagfeldt, A., & Saliba, M. (2018). Methylammonium-free, high-performance and stable perovskite solar cells on a planar architecture. *Science*. <https://doi.org/10.1126/science.aat3583>.
- [9] Paudel, T. R., & Lambrecht, W. R. L. (2008). First-principles study of phonons and related ground-state properties and spectra in Zn-IV-N₂ compounds. *Physical Review B*, 78(11), 115204. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.78.115204>.
- [10] Punya, A., Lambrecht, W. R. L., & van Schilfhaarde, M. (2011). Quasiparticle band structure of Zn-IV-N₂ compounds. *Physical Review B*, 84(16), 165204. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.84.165204>.
- [11] Mohamed Henini & M Razeghi. (2004). *Optoelectronic Devices: III Nitrides—1st Edition*. Consulté 1 Octobre 2020, à l'adresse <https://www.elsevier.com/books/optoelectronic-devices-iii-nitrides/henini/978-0-08-044426-0>.

- [12] Razeghi, M. (2002). Short-wavelength solar-blind detectors-status, prospects, and markets. *Proceedings of the IEEE*, 90(6), 1006-1014. <https://doi.org/10.1109/JPROC.2002.1021565>.
- [13] Yang, G. F., Zhang, Q., Wang, J., Lu, Y. N., Chen, P., Wu, Z. L., Gao, S. M., & Chen, G. Q. (2016). InGaN/GaN multiple quantum wells on selectively grown GaN microfacets and the applications for phosphor-free white light-emitting diodes. *Reviews in Physics*, 1, 101-119. <https://doi.org/10.1016/j.revip.2016.06.001>.
- [14] Quayle, P. C., He, K., Shan, J., & Kash, K. (2013). Synthesis, lattice structure, and band gap of ZnSnN₂. *MRS Communications*, 3(3), 135-138. <https://doi.org/10.1557/mrc.2013.19>.
- [15] Maunaye, M., & Lang, J. (1970). Preparation et proprietes de ZnGeN₂. *Materials Research Bulletin*, 5(9), 793-796. [https://doi.org/10.1016/0025-5408\(70\)90029-2](https://doi.org/10.1016/0025-5408(70)90029-2).
- [16] Endo, T., Sato, Y., Takizawa, H., & Shimada, M. (1992). High-pressure synthesis of new compounds, ZnSiN₂ and ZnGeN₂ with distorted wurtzite structure. *Journal of Materials Science Letters*, 11(7), 424-426. <https://doi.org/10.1007/BF00728730>.
- [17] Cloitre, T., Sere, A., & Aulombard, R. L. (2004). Epitaxial growth of ZnSiN₂ single-crystalline films on sapphire substrates. *Superlattices and Microstructures*, 36(4), 377-383. <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2004.09.056>.
- [18] Du, K., Bekele, C., Hayman, C. C., Angus, J. C., Pirouz, P., & Kash, K. (2008). Synthesis and characterization of ZnGeN₂ grown from elemental Zn and Ge sources. *Journal of Crystal Growth*, 310(6), 1057-1061. <https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2007.12.042>.
- [19] Shing, Amanda M., Coronel, N. C., Lewis, N. S., & Atwater, H. A. (2015). Semiconducting ZnSn_xGe_{1-x}N₂ alloys prepared by reactive radio-frequency sputtering. *APL Materials*, 3(7), 076104. <https://doi.org/10.1063/1.4927009>.
- [20] Feldberg, N., Keen, B., Aldous, J. D., Scanlon, D. O., Stampe, P. A., Kennedy, R. J., Reeves, R. J., Veal, T. D., & Durbin, S. M. (2012). ZnSnN₂: A new earth-abundant element semiconductor for solar cells. 2012 38th IEEE Photovoltaic Specialists Conference, 002524-002527. <https://doi.org/10.1109/PVSC.2012.6318108>.
- [21] Lahourcade, L., Coronel, N. C., Delaney, K. T., Shukla, S. K., Spaldin, N. A., & Atwater, H. A. (2013). Structural and Optoelectronic Characterization of RF Sputtered ZnSnN₂. *Advanced Materials*, 25(18), 2562-2566. <https://doi.org/10.1002/adma.201204718>.
- [22] Feldberg, N., Aldous, J. D., Linhart, W. M., Phillips, L. J., Durose, K., Stampe, P. A., Kennedy, R. J., Scanlon, D. O., Vardar, G., Field, R. L., Jen, T. Y., Goldman, R. S., Veal, T. D., & Durbin, S. M. (2013). Growth, disorder, and physical properties of ZnSnN₂. *Applied Physics Letters*, 103(4), 042109. <https://doi.org/10.1063/1.4816438>.

- [23] Deng, F., Cao, H., Liang, L., Li, J., Gao, J., Zhang, H., Qin, R., & Liu, C. (2015). Determination of the basic optical parameters of ZnSnN₂. *Optics Letters*, 40(7), 1282-1285. <https://doi.org/10.1364/OL.40.001282>.
- [24] Chinnakutti, K. kumar, Panneerselvam, V., & Thankaraj Salammal, S. (2021). Ba-acceptor doping in ZnSnN₂ by reactive RF magnetron sputtering: (002) faceted Ba-ZnSnN₂ films. *Journal of Alloys and Compounds*, 855, 157380. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2020.157380>.
- [25] Veal, T. D., Feldberg, N., Quackenbush, N. F., Linhart, W. M., Scanlon, D. O., Piper, L. F. J., & Durbin, S. M. (2015). Band Gap Dependence on Cation Disorder in ZnSnN₂ Solar Absorber. *Advanced Energy Materials*, 5(24), 1501462. <https://doi.org/10.1002/aenm.201501462>.
- [26] Qin, R., Cao, H., Liang, L., Xie, Y., Zhuge, F., Zhang, H., Gao, J., Javaid, K., Liu, C., & Sun, W. (2016). Semiconducting ZnSnN₂ thin films for Si/ZnSnN₂ p-n junctions. *Applied Physics Letters*, 108(14), 142104. <https://doi.org/10.1063/1.4945728>.
- [27] Alnjiman, F. (2018). ZnSnN₂ thin films for photovoltaic applications [Phdthesis, Université de Lorraine]. <https://hal.univ-lorraine.fr/tel-02109767>.
- [28] Beddelem, N. (2019). Croissance et caractérisation de nitrures ZnGeN₂ pour applications optoélectroniques [Phdthesis, Université de Lorraine]. <https://hal.univ-lorraine.fr/tel-02141628>.
- [29] Shing, A. M., Coronel, N. C., Lewis, N. S., & Atwater, H. A. (2015). Fabrication and characterization of ZnSn_xGe_{1-x}N₂ alloys for light absorbers. 2015 IEEE 42nd Photovoltaic Specialist Conference (PVSC), 1-4. <https://doi.org/10.1109/PVSC.2015.7355918>.
- [30] Riordan, C., & Hulstron, R. (1990). What is an air mass 1.5 spectrum? (Solar cell performance calculations). *IEEE Conference on Photovoltaic Specialists*, 1085-1088 vol.2. <https://doi.org/10.1109/PVSC.1990.111784>.
- [31] Montasir Mirghani. (2021). Spectral Irradiance. Consulté 1 janvier 2021, à l'adresse <https://www.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/52938-spectral-irradiance>.
- [32] I. M. Dharmadasa. (2018). *Advances in Thin-Film Solar Cells*. Routledge & CRC Press. Consulté 1 janvier 2021, à l'adresse <https://www.routledge.com/Advances-in-Thin-Film-Solar-Cells/Dharmadasa/p/book/9789814800129>.
- [33] Bayod-Rújula, A. A. (2019). Chapter 8—Solar photovoltaics (PV). In F. Calise, M. D. D'Accadia, M. Santarelli, A. Lanzini, & D. Ferrero (Éds.), *Solar Hydrogen Production* (p. 237-295). Academic Press. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-814853-2.00008-4>.

- [34] Wolf, M., Noel, G. T., & Stirn, R. J. (1977). Investigation of the double exponential in the current—Voltage characteristics of silicon solar cells. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 24(4), 419-428. <https://doi.org/10.1109/T-ED.1977.18750>.
- [35] Hovel, H. J. (Éd.). (1975). Chapter 3 Solar Cell Electrical Characteristics. In *Semiconductors and Semimetals* (Vol. 11, p. 48-70). Elsevier. [https://doi.org/10.1016/S0080-8784\(08\)62359-5](https://doi.org/10.1016/S0080-8784(08)62359-5).
- [36] Mahfoud, A. (2018). Modélisation des cellules solaires tandem à couches minces et à haut rendement [Thesis]. <http://dspace.univ-setif.dz:8888/jspui/handle/123456789/1785>.
- [37] Sayad, Y. (2009). Détermination de la longueur de diffusion des porteurs de charge minoritaires dans le silicium cristallin par interaction lumière matière [These de doctorat, Lyon, INSA]. <http://www.theses.fr/2009ISAL0053>.
- [38] Olivier, F., Daami, A., Licitra, C., & Templier, F. (2017). Shockley-Read-Hall and Auger non-radiative recombination in GaN based LEDs : A size effect study. *Applied Physics Letters*, 111(2), 022104. <https://doi.org/10.1063/1.4993741>.
- [39] Chang, J.-Y., Shih, Y.-H., Huang, M.-F., Chen, F.-M., & Kuo, Y.-K. (2018). Shockley-Read-Hall and Auger Recombination in Blue InGaN Tunnel-Junction Light-Emitting Diodes. *Physica Status Solidi (a)*, 215(21), 1800271. <https://doi.org/10.1002/pssa.201800271>.
- [40] Aissat, A., Arbouz, H., Nacer, S., Benyettou, F., & Vilcot, J. P. (2016). Efficiency optimization of the structure pin-InGaN/GaN and quantum well-InGaN for solar cells. *International Journal of Hydrogen Energy*, 41(45), 20867-20873. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.06.028>.
- [41] David, A., Hurni, C. A., Young, N. G., & Craven, M. D. (2017). Field-assisted Shockley-Read-Hall recombinations in III-nitride quantum wells. *Applied Physics Letters*, 111(23), 233501. <https://doi.org/10.1063/1.5003112>.
- [42] Meyer, J., Liu, R., Schaller, R. D., Lee, H.-P., & Bayram, C. (2020). Systematic study of shockley-read-hall and radiative recombination in GaN on Al₂O₃, freestanding GaN, and GaN on Si. *Journal of Physics: Photonics*, 2(3), 035003. <https://doi.org/10.1088/2515-7647/ab9072>.
- [43] Ali, A., Cheow, S. L., Azhari, A. W., Sopian, K., & Zaidi, S. H. (2017). Enhancing crystalline silicon solar cell efficiency with Si_xGe_{1-x} layers. *Results in Physics*, 7, 225-232. <https://doi.org/10.1016/j.rinp.2016.11.060>.
- [44] Lars Korte, Wilfried van Sark & Francesco Roca. (2012). *Physics and Technology of Amorphous-Crystalline Heterostructure Silicon Solar Cells* | Wilfried G. J. H. M. van Sark | Springer. <https://www.springer.com/gp/book/9783642222740>.

- [45] Kefif, K. (2015). Elaboration et caractérisation optique des semiconducteurs amorphes et nanocristallins de silicium (a-Si :H, nc-Si :H) et de carbure de silicium (a-SiC :H, nc-SiC :H). <https://theses.univ-oran1.dz/these.php?id=12201520t>.
- [46] Les différents types de cellules photovoltaïques—Ecosources. (s. d.). Consulté 15 Avril 2020, à l'adresse https://www.ecosources.info/dossiers/Types_de_cellules_photovoltaiques
- [47] SILINI, S. (2013). Les contraintes internes et l'effet des traitements thermiques sur les défauts et la ségrégation des impuretés dopantes dans le silicium polycristallin pour des applications photovoltaïques. https://biblio.univ-annaba.dz/?page_id=2454.
- [48] Said-Bacar, Z. (2012). Elaboration et caractérisations de silicium polycristallin par cristallisation en phase liquide du silicium amorphe [Phdthesis, Université Paris Sud - Paris XI]. <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00680303>.
- [49] Nadri, A. (2012). Modélisation de la microstructure des grains dans le silicium multicristallin pour le photovoltaïque [Phdthesis, Université de Grenoble]. <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00870335>.
- [50] Gajović, A., Gracin, D., Jurać, K., Sancho-Parramon, J., & Čeh, M. (2009). Correlating Raman-spectroscopy and high-resolution transmission-electron-microscopy studies of amorphous/nanocrystalline multilayered silicon thin films. *Thin Solid Films*, 517(18), 5453-5458. <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2009.01.086>.
- [51] C. R., Phillips, A. B., Heben, M. J., Ellingson, R. J., & Yan, Y. (2020). Maximize CdTe solar cell performance through copper activation engineering. *Nano Energy*, 73, 104835. <https://doi.org/10.1016/j.nanoen.2020.104835>.
- [52] Kamikawa, Y., Nishinaga, J., Shibata, H., & Ishizuka, S. (2020). Efficient Narrow Band Gap Cu(In,Ga)Se₂ Solar Cells with Flat Surface. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 12(40), 45485-45492. <https://doi.org/10.1021/acsami.0c11203>.
- [53] Mufti, N., Amrillah, T., Taufiq, A., Sunaryono, Aripriharta, Diantoro, M., Zulhadjri, & Nur, H. (2020). Review of CIGS-based solar cells manufacturing by structural engineering. *Solar Energy*, 207, 1146-1157. <https://doi.org/10.1016/j.solener.2020.07.065>.
- [54] Choi, W.-J., Park, W. W., Kim, Y., Son, C. S., & Hwang, D. (2020). The Effect of ALD-Zn(O,S) Buffer Layer on the Performance of CIGSSe Thin Film Solar Cells. *Energies*, 13(2), 412. <https://doi.org/10.3390/en13020412>.
- [55] Hung-Ling Chen, Andrea Cattoni, Romaric De Lépinau, Alexandre W. Walker, Oliver Höhn, David Lackner, Gerald Siefer, Marco Faustini, Nicolas Vandamme, Julie Goffard, Benoît Behaghel, Christophe Dupuis, Nathalie Bardou, Frank Dimroth & Stéphane Collin. (2019). A 19.9%-efficient ultrathin solar cell based on a 205-nm-thick GaAs absorber and a

silver nanostructured back mirror | Nature Energy. Consulté 12 janvier 2021, à l'adresse <https://www.nature.com/articles/s41560-019-0434-y>.

[56] Thin-Film Solar PV Market | Growth, Trends, and Forecast (2020—2025). (2021). Consulté 5 Janvier 2021, à l'adresse <https://www.mordorintelligence.com/industry-reports/global-thin-film-solar-collector-market-industry>.

[57] Bellil, W. (2020). Simulation et optimisation des structures à base de nouveaux matériaux pour améliorer le rendement des cellules solaires [Thesis, univ-blida1]. <http://di.univ-blida.dz:8080/jspui/handle/123456789/8740>.

[58] Friedman, D. J., Olson, J. M., & Kurtz, S. (2010). High-Efficiency III–V Multijunction Solar Cells. In *Handbook of Photovoltaic Science and Engineering* (p. 314-364). John Wiley & Sons, Ltd. <https://doi.org/10.1002/9780470974704.ch8>.

[59] Bestam, R., Aissat, A., & Vilcot, J. P. (2016). High efficiency quadruple junction solar cells. *Superlattices and Microstructures*, 91, 22-30. <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2015.12.038>.

[60] Sousa, S. de. (2013). Ingénierie, synthèse et étude de chromophores organiques et organométalliques pour cellules solaires à colorant [Thèse de doctorat, Université Bordeaux 1]. <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00952228>.

[61] Ji, J.-M., Zhou, H., Eom, Y. K., Kim, C. H., & Kim, H. K. (2020). 14.2% Efficiency Dye-Sensitized Solar Cells by Co-sensitizing Novel Thieno[3,2-b]indole-Based Organic Dyes with a Promising Porphyrin Sensitizer. *Advanced Energy Materials*, 10(15), 2000124. <https://doi.org/10.1002/aenm.202000124>.

[62] Paul Harrison. (2005). *Quantum Wells, Wires and Dots : Theoretical and Computational Physics of Semiconductor Nanostructures*, 2nd Edition | Wiley. Consulté 10 Mars 2020, à l'adresse <https://www.wiley.com/en-dz/Quantum+Wells,+Wires+and+Dots:+Theoretical+and+Computational+Physics+of+Semic+onductor+Nanostructures,+2nd+Edition-p-9780470010815>.

[63] Rachid, B. (2017). Modélisation et simulation d'une structure à base de semiconducteur III_V pour le photovoltaïque [Thesis, univ-blida 1]. <http://di.univ-blida.dz:8080/jspui/handle/123456789/9653>.

[64] Gérard, J.-M., Moreau, E., Robert, I., Abram, I., & Gayral, B. (2002). Les boîtes quantiques semi-conductrices : Des atomes artificiels pour l'optique quantique. *Comptes Rendus Physique*, 3(1), 29-40. [https://doi.org/10.1016/S1631-0705\(02\)01290-2](https://doi.org/10.1016/S1631-0705(02)01290-2).

[65] Aissat, A., Benyettou, F., Nacer, S., & Vilcot, J. P. (2017). Modeling and simulation of solar cells quantum well based on SiGe/Si. *International Journal of Hydrogen Energy*, 42(13), 8790-8794. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.07.042>.

[66] Edvinsson, T. (2018). Optical quantum confinement and photocatalytic properties in two-, one- and zero-dimensional nanostructures. *Royal Society Open Science*, 5(9), 180387. <https://doi.org/10.1098/rsos.180387>.

[67] Et-taya, L., Ouslimane, T., & Benami, A. (2020). Numerical analysis of earth-abundant $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S}_x\text{Se}_{1-x})_4$ solar cells based on Spectroscopic Ellipsometry results by using SCAPS-1D. *Solar Energy*, 201, 827-835. <https://doi.org/10.1016/j.solener.2020.03.070>.

Chapitre 2 PHYSIQUE DES CELLULES SOLAIRES

2.1 Introduction

Les semiconducteurs ont acquis une importance considérable dans notre société et vie quotidienne. Ils sont à la base de plusieurs composants électroniques et optoélectroniques qui entrent dans nombreux dispositifs de photovoltaïques et de télécommunications.[1]

On appelle semiconducteur un matériau électriquement intermédiaire entre conducteur et isolant (non conducteur). Ainsi que le niveau de Fermi est dans la bande interdite dont la largeur est faible ($E_g \sim 1\text{eV}$) (figure 2.1) [2]. Des électrons peuvent, par une excitation thermique, passer de la bande de valence vers la bande de conduction [2]. La résistivité (ρ) varie de 10^{-3} à $10^4 \Omega\cdot\text{cm}$. [3] Dans la physique de semiconducteur, la bande interdite d'un semiconducteur est toujours un de deux types, d'un gap direct ou d'un gap indirect. L'état minimal d'énergie dans la bande de conduction et l'état maximal d'énergie dans la bande de valence sont caractérisés par une certaine quantité de mouvement (vecteur k) dans la zone de Brillouin. Si les vecteurs K sont identiques, ce s'appelle " un gap direct". S'ils sont différents, ce s'appelle " un gap indirect" (figure 2.2). [4] Dans un gap indirect, un photon ne peut pas être émis parce que l'électron doit passer par un état intermédiaire et de transférer une quantité de mouvement au réseau cristallin (contribution d'un phonon).

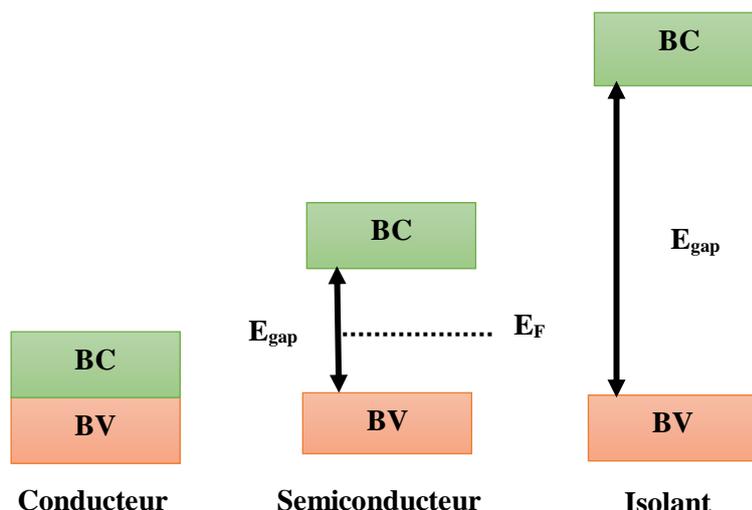


Figure 2.1 Schématisation des structures de bandes électroniques des conducteurs, isolants et semiconducteurs. [2]

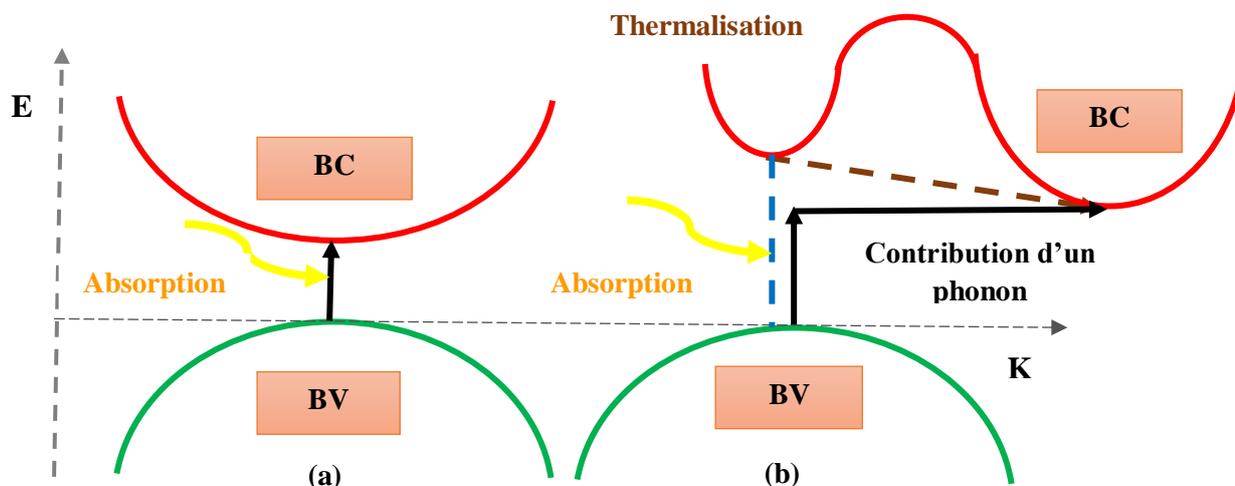


Figure 2.2 Transitions électroniques interbandes dans les semiconducteurs. a) un SC à gap direct. b) un SC à gap indirect. [4]

2.1.1 Semiconducteur intrinsèque

Un semiconducteur intrinsèque est un matériau idéal (parfait) ne contenant aucun défaut ni défaut physique ni chimique c.-à-d., ses propriétés et ses caractéristiques sont dues uniquement au semiconducteur lui-même. Les concentrations des électrons et des trous sont égales à la concentration intrinsèque « n_i ». Sachant que ($n=p=n_i$) [5]. La densité intrinsèque des porteurs et le niveau de fermi intrinsèque (E_{fi}) sont donnés par les expressions suivantes : [6]

$$n_i = (N_c N_v)^{1/2} \exp(-E_g/2K_B T) \quad (2.1)$$

$$E_f = \frac{1}{2}(E_c + E_v) + \frac{3}{4} K_B T \cdot \log\left(\frac{m_h^*}{m_e^*}\right) \quad (2.2)$$

avec :

N_c : densité effective d'état des électrons.

N_v : densité effective d'état des trous.

E_g : énergie de la bande interdite.

E_c : énergie de la bande de conduction.

E_v : énergie de la bande de valence.

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

K_B : constante de Boltzmann.

T : température en K.

La densité d'état dépend de caractéristiques du matériau et de la température. Pour le $ZnSnN_2$, la densité d'état aux bords des bandes de conduction et de valence, N_c et N_v respectivement, est donnée par [7] :

$$N_c = 2 \left(\frac{2 \pi T m_e K_B}{h^2} \right)^{3/2} \approx 4.82 \cdot 10^{15} \left(\frac{m_e}{m_0} \right)^{3/2} T^{3/2} \quad (2.3)$$

$$N_v = 2 \left(\frac{2 \pi T m_h K_B}{h^2} \right)^{3/2} \quad (2.4)$$

avec :

m_0 : la masse d'un électron (9.109×10^{-31} kg ou 0.5101 MeV/c²)

h : la constante de Planck ($4,136 \times 10^{-15}$ eV. s)

m_e : la masse effective des électrons dans la bande de conduction ($m_e=0,12 m_0$ pour le $ZnSnN_2$ et $0,15 m_0$ pour $ZnGeN_2$) [MeV.c⁻²] [8]

m_h : la masse effective des trous dans la bande de valence ($m_h=1,79 m_0$ pour le $ZnSnN_2$ et $1.90 m_0$ pour $ZnGeN_2$) [MeV.c⁻²] [8]

Les figures 2.3 et 2.4 montrent l'effet de la concentration d'étain dans l'alliage $ZnSn_xGe_{1-x}N_2$ sur les masses effectives de porteurs pour les électrons et les trous, respectivement.

Pour calculer les masses effectives de porteurs de l'alliage $ZnSn_xGe_{1-x}N_2$, on a utilisé la loi de Vegard selon la formule suivante : [9]

$$m_{e/h}^*(ZnSn_xGe_{1-x}N_2) = x \cdot m_{e/h}^*(ZnSnN_2) + (1-x) \cdot m_{e/h}^*(ZnGeN_2) \quad (2.5)$$

On remarque à partir des figures 2.3 et 2.4 que les masses effectives diminuent régulièrement avec l'augmentation de la concentration d'étain.

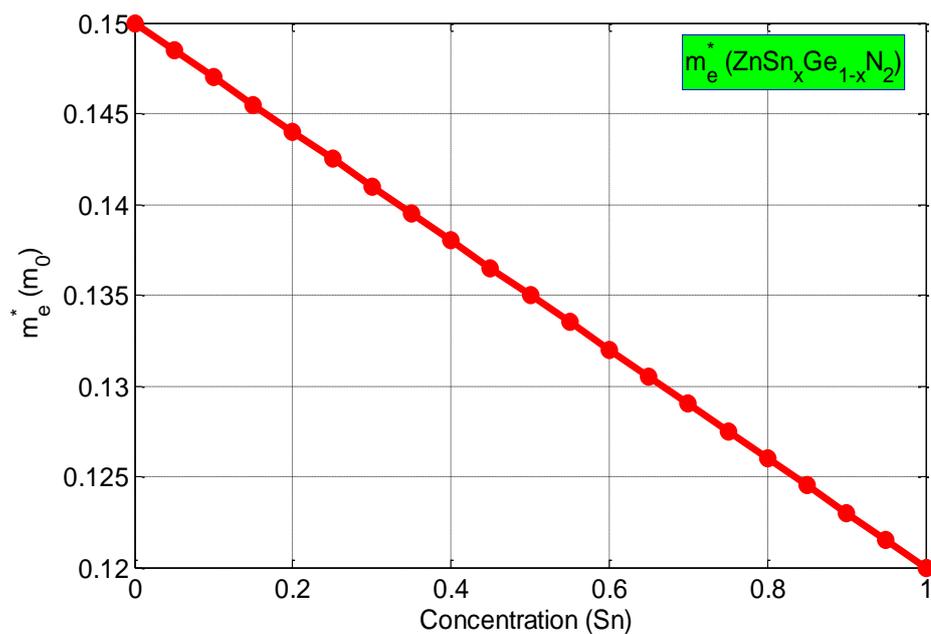


Figure 2.3 Effet de la concentration d'étain sur la masse effective d'électron de l'alliage $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$.

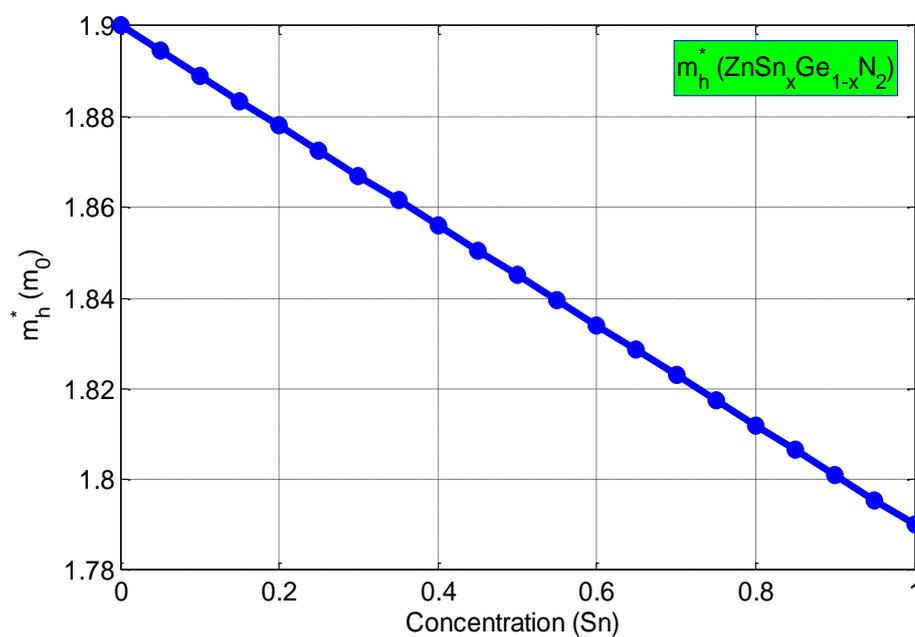


Figure 2.4 Effet de la concentration d'étain sur la masse effective des trous de l'alliage $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$.

Les relations (2.3) et (2.4), illustrés dans les figures 2.5 et 2.6 pour les deux matériaux ZnSnN_2 et ZnGeN_2 . On remarque que les densités d'états des deux bandes BV et BC augmentent avec la température.

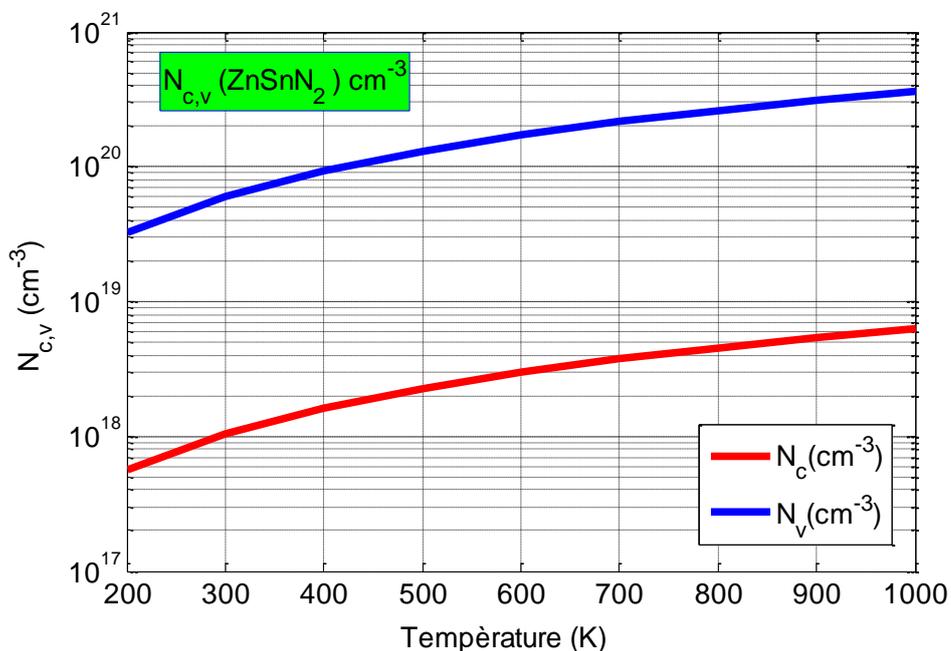


Figure 2.5 Effet de la température sur les densités d'états pour les deux bandes BC et BV pour le cas du ZnSnN_2 .

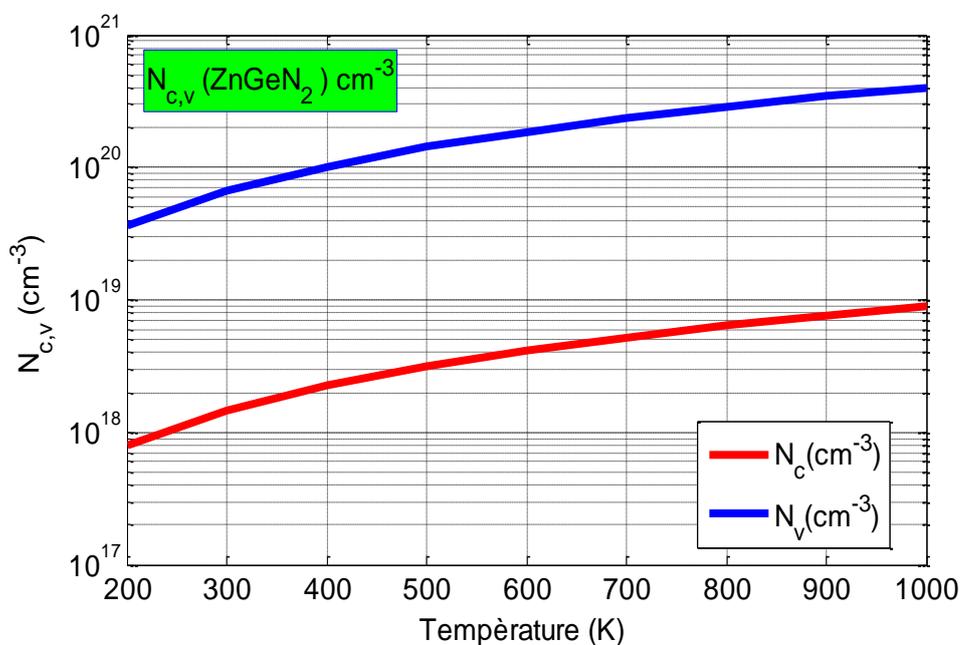


Figure 2.6 Effet de la température sur les densités d'états pour les deux bandes BC et BV pour le cas du ZnGeN_2 .

D'après les figures (2.7) et (2.8), on remarque également que les densités d'états des bandes (N_c et N_v) de l'alliage $ZnSn_xGe_{1-x}N_2$ diminuent régulièrement avec l'augmentation de la concentration d'étain. Pour calculer les densités d'états effectives des bandes (N_c et N_v) de l'alliage $ZnSn_xGe_{1-x}N_2$, on a utilisé également la loi de Vegard selon la formule suivante : [10]

$$N_{c/v}(ZnSn_xGe_{1-x}N_2) = x \cdot N_{c/v}(ZnSnN_2) + (1-x) \cdot N_{c/v}(ZnGeN_2) \quad (2.6)$$

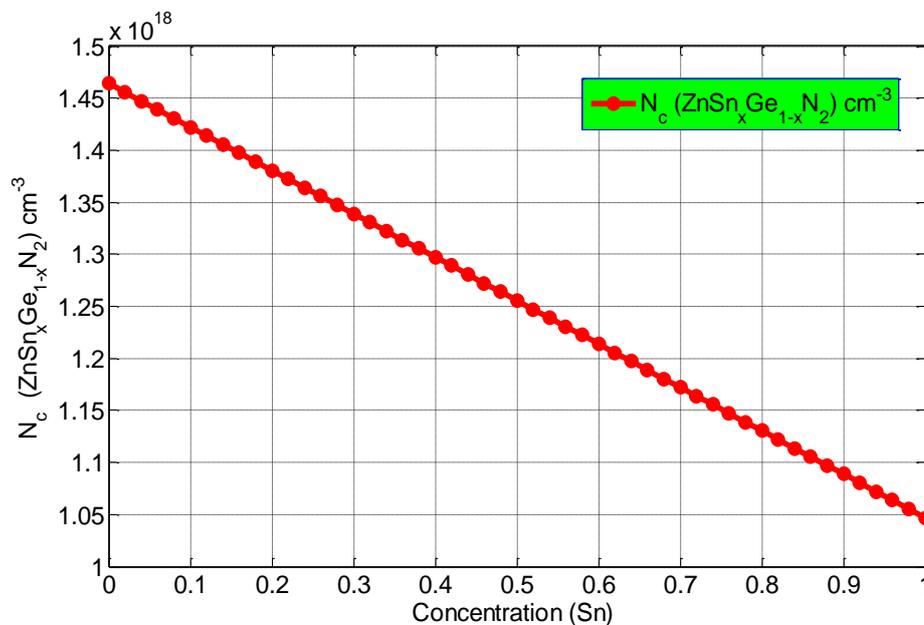


Figure 2.7 Effet de la concentration d'étain sur la bande de conduction pour l'alliage $ZnSn_xGe_{1-x}N_2$.

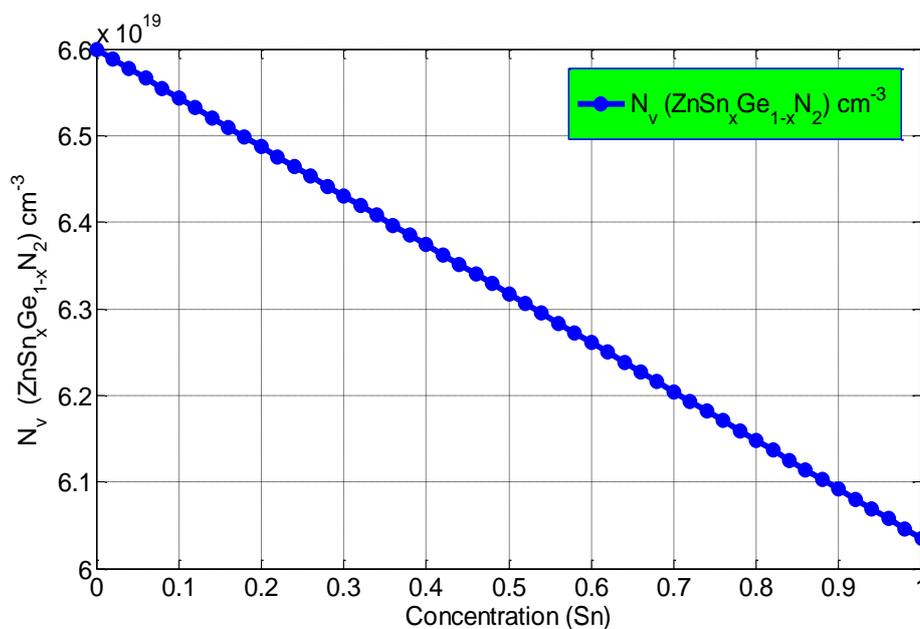


Figure 2.8 Effet de la concentration d'étain sur la bande de valence pour l'alliage $ZnSn_xGe_{1-x}N_2$.

La relation (2.1), illustré dans les figures 2.9 et 2.10, pour les deux matériaux ZnSnN_2 et ZnGeN_2 , traduit le fait que plus la température est élevée, plus il est fréquent qu'un électron obtient l'énergie nécessaire pour franchir E_g (bande interdite). Pour les matériaux à grand gap comme le ZnGeN_2 (~ 3.4 eV), l'énergie qu'un électron doit acquérir devient importante ce qui implique qu'un matériau à grand gap a une meilleure stabilité en température [11]. Lorsque la température augmente, la quantité de chaleur absorbé par le matériau créera un certain nombre de porteurs (e^- -trou) ceci implique que la conductivité du matériau augmente. Le nombre de porteurs intrinsèque augmente de façon logarithmique, ceci est montré dans les figures 2.9 et 2.10.

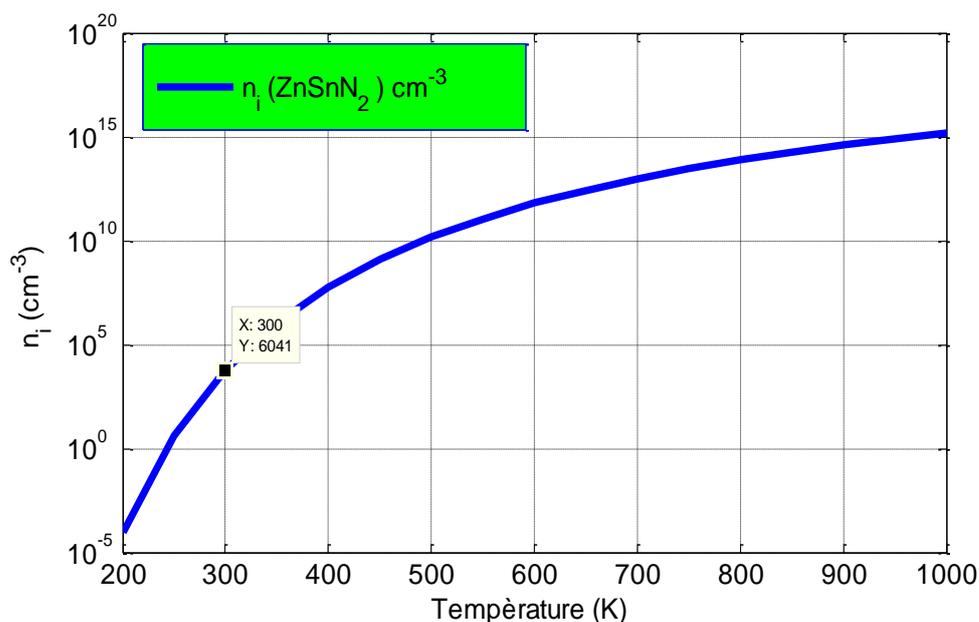


Figure 2.9 Effet de la température sur la densité intrinsèque des porteurs pour le cas du ZnSnN_2 .

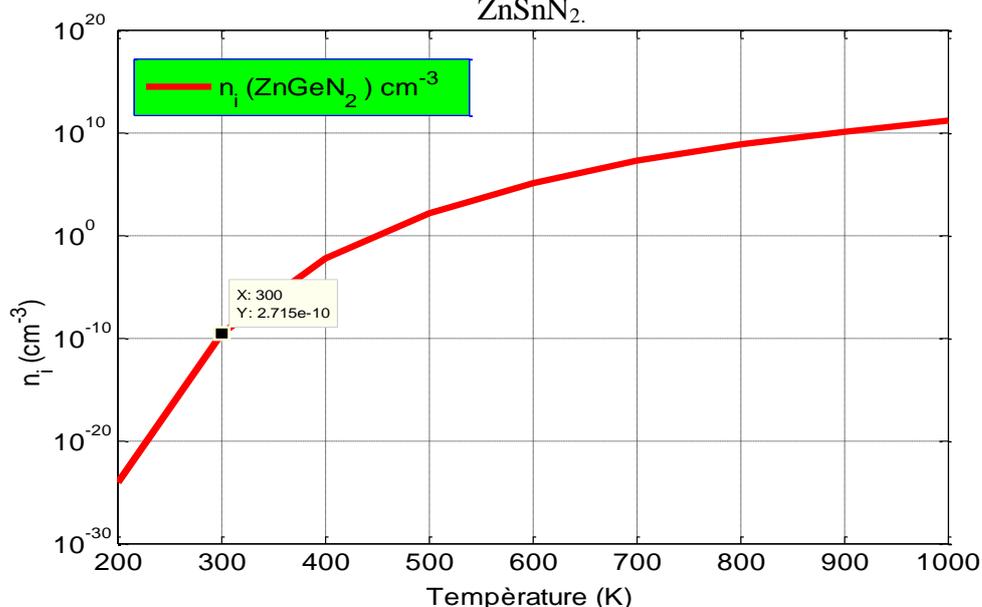


Figure 2.10 Effet de la température sur la densité intrinsèque des porteurs pour le cas du ZnGeN_2 .

2.1.2 Semiconducteur extrinsèque

Dans les dispositifs optoélectroniques, les semiconducteurs intrinsèque ne sont pas d'une grande utilité. Ce type de dispositifs sont à la base des semiconducteurs dopés car il est possible de modifier les propriétés électriques en le dopant de manière contrôlée avec des atomes spécifiques (impuretés). Il existe deux types de semiconducteurs extrinsèque : [12]

2.1.2.1 Semiconducteur dopé de type n (Donneur)

On parle d'un semiconducteur dopé n, lorsque la densité de donneurs supérieure à la densité d'accepteurs, $N_d > N_a$. Prenons l'exemple d'un élément V (ayant 5 électrons dans la couche de valence), pour des températures supérieures à 0K, les atomes sont ionisés lorsqu'un électron passe de niveau donneur vers la bande de conduction (génération d'électrons). La densité des porteurs libres du semiconducteurs lorsque tous les donneurs sont ionisés, devient alors [13] :

$$n = n_0 + N_d \quad (2.7)$$

avec :

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

N_d : concentration des atomes donneurs.

2.1.2.2 Semiconducteur dopé de type p (Accepteur)

On parle d'un semiconducteur dopé p, lorsque la densité d'accepteurs supérieure à la densité de donneurs, $N_a > N_d$. Prenons l'exemple d'un élément III (ayant 3 électrons dans la couche de valence), pour des températures supérieures à 0K, les atomes sont ionisés lorsqu'un électron passe de la bande de valence vers le niveau accepteur (génération de trous). La densité des porteurs libres du semiconducteurs lorsque tous les donneurs sont ionisés, devient alors [13] :

$$p = p_0 + N_a \quad (2.8)$$

avec :

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

N_a : concentration des atomes accepteurs.

2.1.2.3 Semiconducteur dégénéré

Un semiconducteur dégénéré est un semiconducteur fortement dopé, au point d'avoir un comportement plus proche de celui d'un métal que d'un semiconducteur. [14]

2.1.2.4 Semiconducteur compensés

Un semiconducteur compensé, s'il contient un nombre des impuretés positives égales exactement au nombre des impuretés négatives. On dit alors que l'on a un semiconducteur intrinsèque par compensation. [15]

2.2 La jonction p-n

2.2.1 La jonction p-n à l'équilibre thermodynamique

Une cellule solaire photovoltaïque comporte comme un capteur photonique qui a composée à la base d'une jonction p-n. En général, la couche supérieure étant un matériau de type n et la couche inférieure de type p. La mise en contact de ces matériaux génère une barrière de potentiel à la base du champ électrique permanent. Parmi les jonctions p-n qui existent abrupte et graduelle [16]. Dans ce chapitre, on va concéder le cas le plus étudié, le cas d'une jonction p-n abrupte à l'équilibre et hors équilibre thermodynamique (avec polarisation). L'équilibre thermique est atteint quand la diffusion des porteurs est annulée par le champ électrique créé par la barrière de potentiel repoussant la diffusion des porteurs majoritaires. Dans cette condition, le courant global de diffusion est nul car l'équilibre dans les courants de diffusion des porteurs majoritaires et des porteurs minoritaires et apparition d'une zone de déplétion (zone de charge d'espace), comme illustre la figure (2.11) [17]

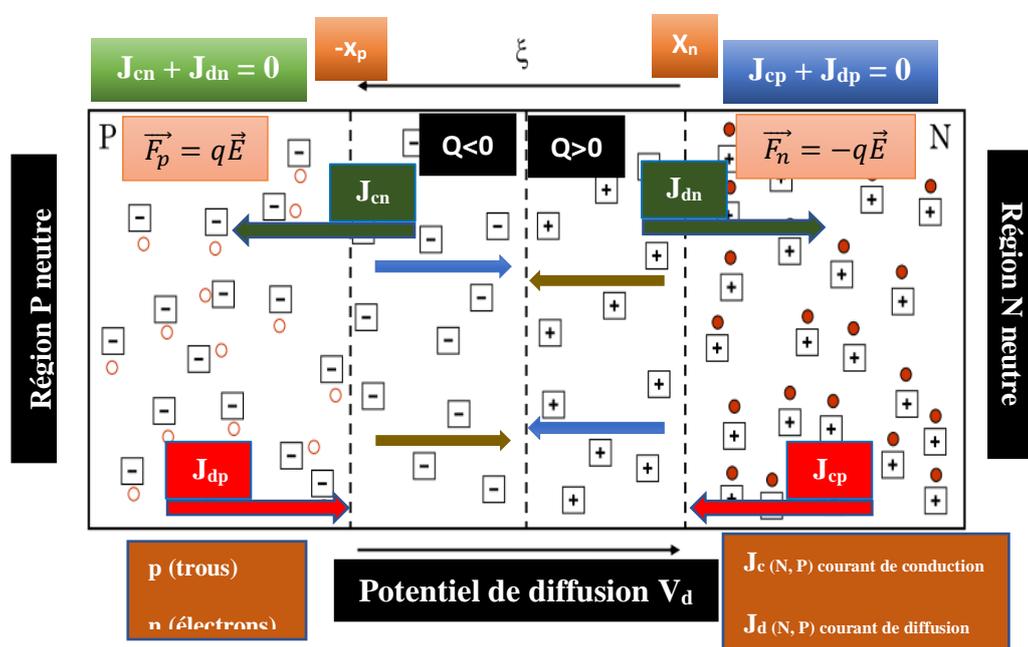


Figure 2.11 Une jonction (p-n) à l'équilibre thermodynamique. [17]

La jonction p-n à l'équilibre thermodynamique se caractérise par un potentiel de diffusion (V_0) et une largeur de la zone de charge d'espace w définis par : [18] (cas d'une homojonction)

$$V_0 = \frac{KT}{q} \ln \left[\frac{N_a N_d}{n_i^2} \right] \quad (2.9)$$

$$w = \sqrt{\frac{2\varepsilon}{q} \left(\frac{N_a + N_d}{N_a N_d} \right) V_0} \quad (2.10)$$

où : k : constante de Boltzmann.

T : température (K).

q : charge élémentaire.

n_i : la concentration intrinsèque.

N_d : densité de donneurs.

N_a : densité de accepteurs.

ε : permittivité .

A partir des équations (2.9) et (2.10) , on peut déterminer le champ électrique (E_{max}) : [19]

$$E_{max} = \frac{2 V_0}{w} \quad (2.11)$$

Pour le cas d'une hétérojonction (jonction entre deux matériaux différents), les expressions de la largeur de la zone de déplétion dans chacun des semiconducteurs sont données par [20]:

$$w_1 = \left(\frac{2 \cdot N_a \cdot \varepsilon_1 \cdot \varepsilon_2}{e \cdot N_d \cdot (\varepsilon_1 \cdot N_d + \varepsilon_2 \cdot N_a)} \right)^{1/2} (V_d)^{1/2} \quad (2.12)$$

$$w_2 = \left(\frac{2 \cdot N_d \cdot \varepsilon_1 \cdot \varepsilon_2}{e \cdot N_a \cdot (\varepsilon_1 \cdot N_d + \varepsilon_2 \cdot N_a)} \right)^{1/2} (V_d)^{1/2} \quad (2.13)$$

L'épaisseur totale de la cellule : H ou $W = w_n + w_p$ (région matériau 1 + région matériau 2)

avec : $x_n = W_n - w_1$ et $x_p = x_n + w_1 + w_2$.

Le potentiel de diffusion (V_d) de la jonction donnée par :

$$V_d = \frac{1}{q} [E g_2 + (\chi_2 - \chi_1)] + \frac{K_B T}{q} \ln \left[\frac{N_a \cdot N_d}{N_{c1} \cdot N_{v2}} \right] \quad (2.14)$$

Le potentiel thermodynamique (V_t) est donné par :

$$V_t = \frac{K_B T}{q} \sim 25 \text{ mV} \quad (2.15)$$

La somme des deux équations (2.12) et (2.13) donne la largeur totale de la zone de déplétion (w) [21] :

$$W = \left(\frac{2 \cdot \varepsilon_1 \cdot \varepsilon_2 \cdot (\varepsilon_1 \cdot N_d + \varepsilon_2 \cdot N_a)^2}{e \cdot N_d \cdot N_a \cdot (\varepsilon_1 \cdot N_d + \varepsilon_2 \cdot N_a)} \right)^{1/2} (V_d)^{1/2} \quad (2.16)$$

Pour le cas d'une jonction p-n abrupte de ZnSnN₂ (avec $E_g = 1.5$ eV et $n_i = 2.4333 \cdot 10^6$ cm⁻³), se compose d'une région de type p, la densité des accepteurs ($N_a = 1.001 \cdot 10^{19}$ cm⁻³) et une région de type n, la densité des donneurs ($N_d = 1.005 \cdot 10^{19}$ cm⁻³) [22]. Nous avons utilisé les relations (2.9), (2.10) et (2.11) pour calculer le potentiel de diffusion, la largeur de la zone de déplétion et le champ électrique. Nous avons respectivement trouvé $V_d = 1.5013$ V, $w = 2.2431 \cdot 10^{-6}$ cm et $E = 1.3386$ MV/cm. La figure (2.12) montre la variation de V_o en fonction de la densité de dopage N_d (en donneurs) pour une homojonction de ZnSnN₂ à 300K (avec $N_a = 1.001 \cdot 10^{19}$ cm⁻³ et $E_g = 1.5$ eV [22]). Si la concentration en impuretés de type donneur (N_d) est augmentée comme indiqué sur la figure (2.12), le nombre de porteurs de charge augmente également. En raison du nombre accru de porteurs de charge, la quantité de diffusion augmente et, à son tour, la recombinaison des trous et des électrons augmente, c'est-à-dire que la barrière potentielle augmente.

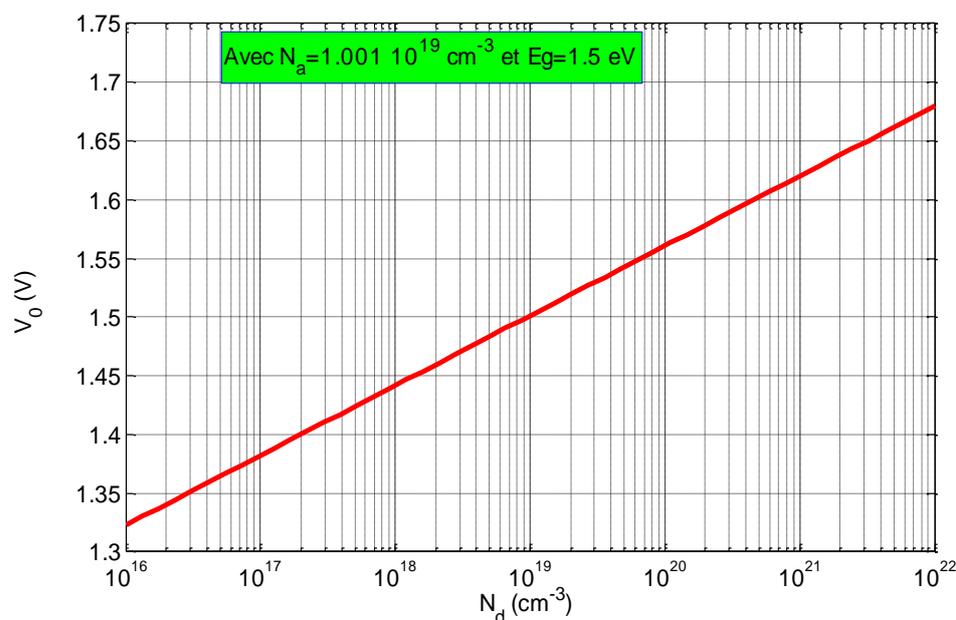


Figure 2.12 La variation de V_o en fonction de la densité de dopage N_d pour une homojonction de ZnSnN₂ à 300K.

La figure (2.13) montre la variation de w en fonction de la densité de dopage N_d (en donneurs) pour une homojonction de ZnSnN₂ à 300K. La largeur de la zone de déplétion dans une diode à jonction p-n est inversement proportionnelle à la concentration de dopage des régions n et p. Ainsi, à mesure que le dopage augmente, la largeur de la zone de déplétion devient plus étroite.

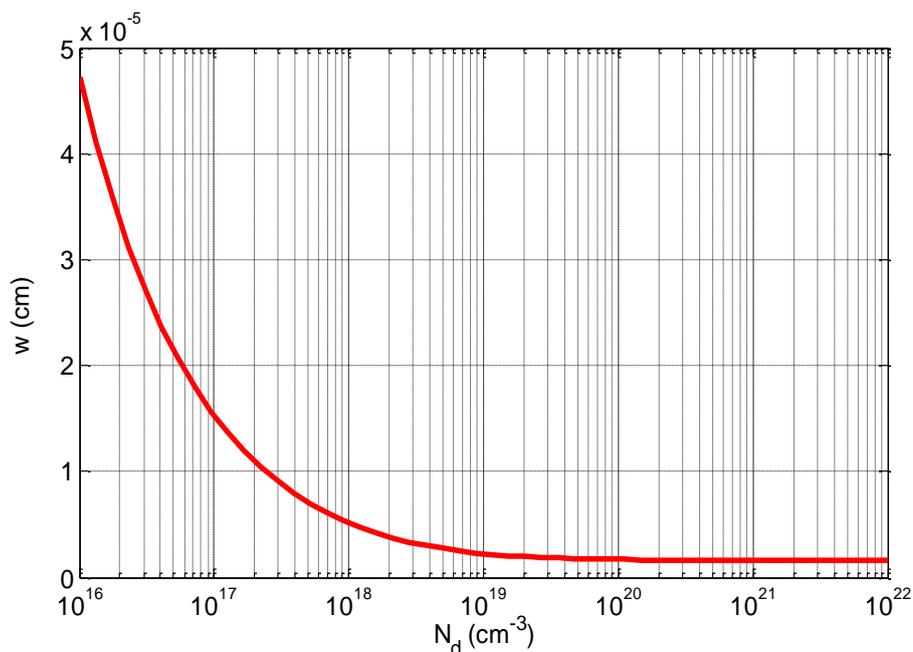


Figure 2.13 La variation de w en fonction de la densité de dopage N_d pour une homojonction de ZnSnN_2 à 300K.

La figure (2.14) montre la variation de E_{max} en fonction de la densité de dopage N_d (en donneurs) pour une homojonction de ZnSnN_2 à 300K, Selon la figure précédente (2.13), plus la largeur de la zone de déplétion est petite, plus le champ électrique sera plus grand. Ce champ électrique élevé exercera une force sur les électrons et les trous délimités par des liaisons covalentes, et les fera se déplacer à travers la jonction en rompant la liaison.

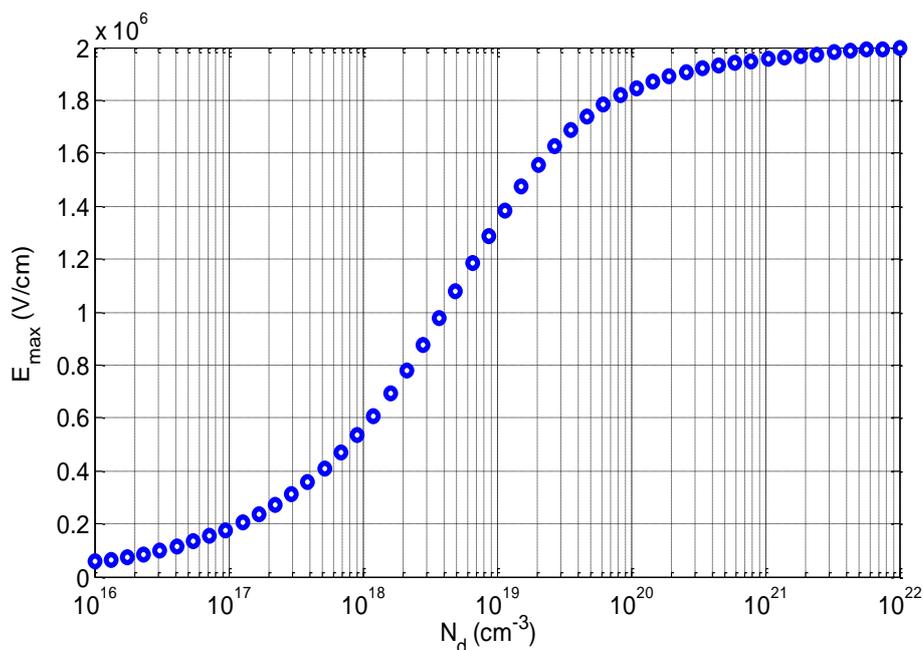


Figure 2.14 La variation de E_{max} en fonction de la densité de dopage N_d pour une homojonction de ZnSnN_2 à 300K.

2.2.2 La jonction p-n hors équilibre (polarisée par un générateur de tension)

En appliquant maintenant une tension positive externe ($V > 0$), cette polarisation directe est caractérisée par l'application de tension positive externe coté p et de tension négative coté n. La tension externe va réduire le champ électrique interne (E_i) et, par conséquent, le potentiel de diffusion va diminuer car ($V_{tot} = V_d - V$), ainsi que l'épaisseur de la zone de déplétion va réduire, ce qui facilite la diffusion de porteurs majoritaires entraînant le passage d'un courant dans le sens direct. D'autre part, en polarisation inverse, quand nous inversons maintenant la tension externe ($V < 0$), nous augmentons la barrière du potentiel de diffusion, et aucun courant de diffusion ne peut circuler car ($V_{tot} = V_d + V$), ainsi que l'augmentation de l'épaisseur de la zone de déplétion, dans ce cas-là, seuls les porteurs minoritaires qui sont présents dans chaque région contribuent au courant par conduction, mais ce courant il est très faible. [23]

Si l'on y applique une polarisation directe ($V > 0$) et sous éclaircissement, l'équilibre entre les courants de diffusion et les courants de conduction est modifié. Le nouveau potentiel de diffusion s'écrit [24]: (cas d'une homojonction)

$$V_{tot} = V_0 - V = \frac{KT}{q} \ln \left[\frac{N_a N_d}{n_i^2} \right] - V \quad (2.17)$$

et la largeur de la zone de déplétion w sous polarisation ($V > 0$) s'écrit alors :

$$w = \sqrt{\frac{2\varepsilon}{q} \left[\frac{N_a + N_d}{N_a N_d} \right] (V_0 - V)} \quad (2.18)$$

A partir des équations (2.17) et (2.18), on peut déterminer le champ électrique (E_{max_tot}) : [25]

$$E_{max} = \frac{2V_{tot}}{w} \quad (2.19)$$

Si nous prenons maintenant l'effet de la polarisation et la densité des donneurs en considération, nous avons obtenu de nouvelles valeurs et les résultats ont été présentés et commentés ci-dessous. La figure (2.15) montre la variation de V_{total} ($V_0 - V$) en fonction de la tension de polarisation V et de la densité de dopage N_d (en donneurs). Lorsque nous appliquons une polarisation directe ($V > 0$), cela réduit efficacement la tension V_{total} jusqu'à -0.2 V. D'autre part, la concentration en impuretés de type donneur (N_d) a l'effet d'augmenter la tension V_{total} comme nous l'avons fait remarquer précédemment.

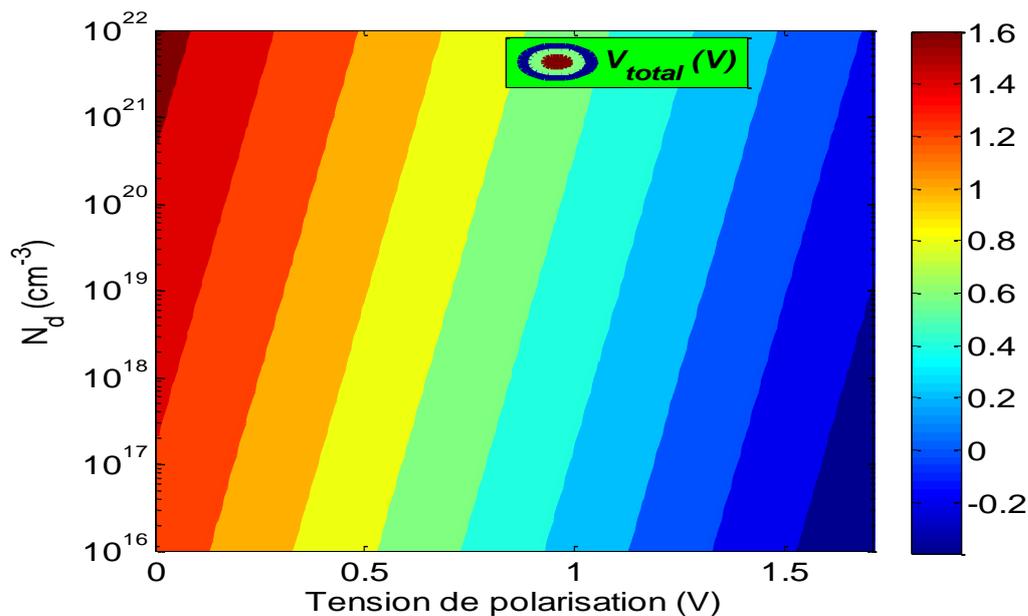


Figure 2.15 La variation de V_{tot} (V_0-V) en fonction de la tension de polarisation V et de la densité de dopage.

La figure (2.16) montre la variation de la largeur de la zone de charge d'espace w sous polarisation en fonction de la tension de polarisation V et de la densité de dopage N_d (en donneurs), on remarque que l'augmentation de la tension de polarisation et de la densité de dopage a rendu la zone de déplétion mince ($w < 10^{-5}$ cm).

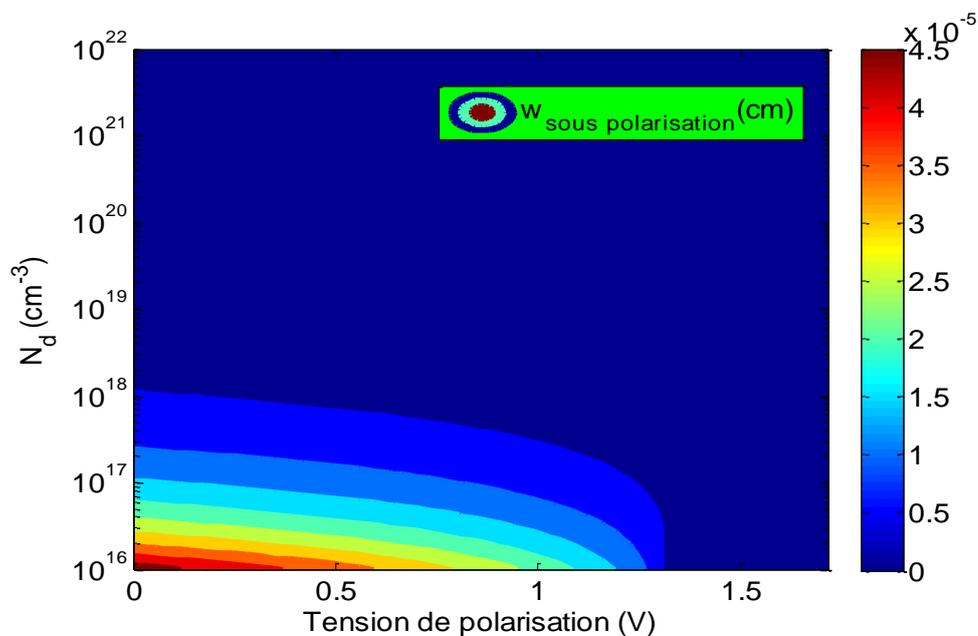


Figure 2.16 La variation de la largeur de la zone de charge d'espace w sous polarisation en fonction de la tension de polarisation V et de la densité de dopage.

La figure (2.17) montre la variation de champ électrique sous polarisation en fonction de la tension de polarisation V et de la densité de dopage N_d (en donneurs). Dans les fortes concentrations en dopants ($N_d > 10^{18} \text{ cm}^{-3}$) et selon la figure (2.17), le champ dans la zone de déplétion sera réduit ($E_{\text{max}} < 10^5 \text{ V/cm}$) par l'effet de polarisation directe ($V > 0$) ceci facilite la diffusion des porteurs dans la zone de déplétion et conduit à une augmentation du courant de diffusion.

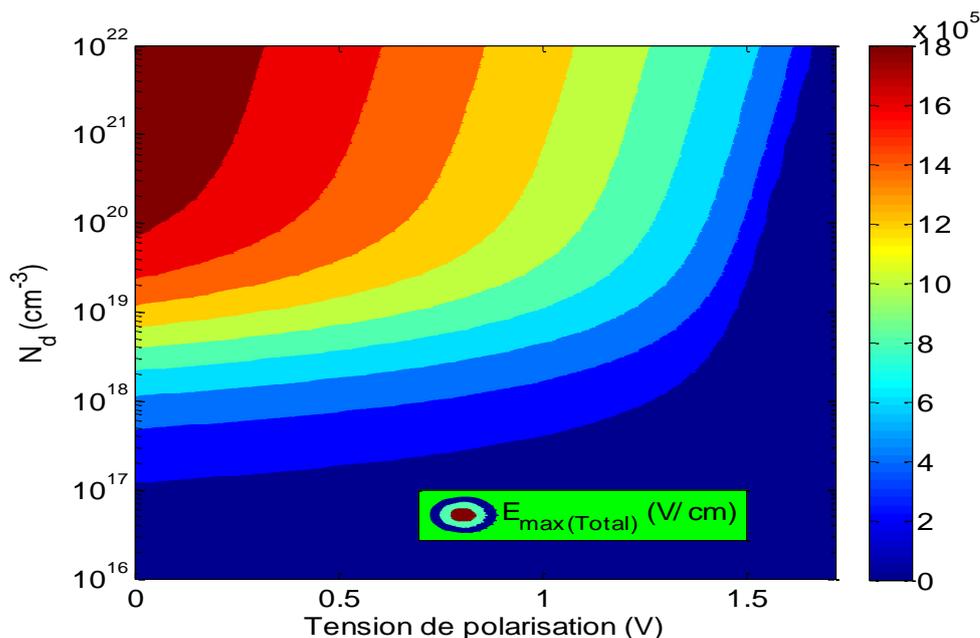


Figure 2.17 La variation de champ électrique sous polarisation en fonction de la tension de polarisation V et de la densité de dopage.

2.2.3 Décalage de bandes dans l'hétérojonction

Les propriétés électriques d'un matériau proviennent de son gap (bande interdite), et sa densité de porteurs (électron/trou). Le gap est défini comme étant la différence d'énergie entre le haut de la bande de valence et le bas de la bande de conduction. Le diagramme d'énergie d'un matériau est présenté dans la figure ci-dessous (figure 2.18).

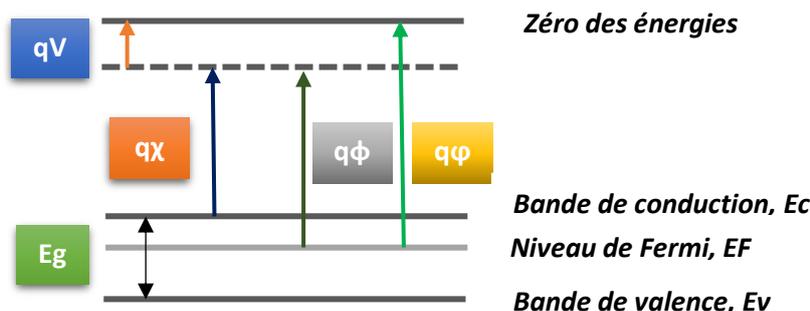


Figure 2.18 Diagramme des énergies pour un matériau. q est la charge élémentaire, V le potentiel électrostatique pouvant régner dans le matériau, χ l'affinité électronique, ϕ le travail de sortie, et ϕ le potentiel d'ionisation [7].

Maintenant, si on a l'alignement des bandes, pour une hétérojonction de deux différents semiconducteurs 1 et 2, les énergies d'alignement être obtenu si on mesure toutes les énergies de bandes qui est fournie par niveau de vide (figure 2.19). Le niveau de vide est l'énergie d'un électron libre (un électron en dehors du semiconducteur) qui est au repos en ce qui concerne le semiconducteur, l'affinité électronique est l'énergie exigée pour déplacer un électron du bas de la bande de conduction au niveau de vide et est une constante de matériau. La règle d'affinité électronique pour l'alignement de la bande indique qu'à une hétérojonction entre différents semiconducteurs, l'alignement relatif des bandes est accouplé par leurs affinités électroniques, comme représenté sur la figure ci-dessous. La règle d'affinité électronique implique que l'alignement de la bande de conduction à une interface d'hétérojonction est égal à la différence d'affinités électroniques entre les deux semiconducteurs. Ceci est montré dans le diagramme de bande ci-dessous. Selon la règle d'affinité électroniques, l'alignement de la bande de conduction est donné comme, [26] :

$$\Delta E_c = q (\chi_2 - \chi_1) \quad (2.20)$$

L'alignement de la bande de valence est alors,

$$\Delta E_v = \Delta E_g - \Delta E_c = (E_{g1} - E_{g2}) - \Delta E_c \quad (2.21)$$

avec :

$$\Delta E_c + \Delta E_v = \Delta E_g \quad (2.22)$$

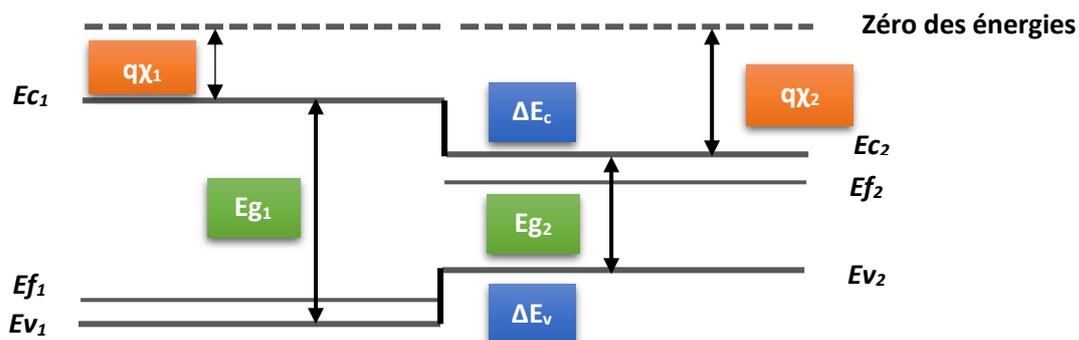


Figure 2.19 Diagramme de bande d'énergie pour une hétérojonction, comme compris par la règle d'Anderson [26].

2.3 La densité du photocourant totale

Quand la lumière est exposée sur une jonction p-n (émetteur-base), un nombre de porteurs d'électrons et de trous sont générés à une distance (x), avec un taux de génération des photons porteurs (G), il est donné par la relation suivante : [27]

$$G = \alpha(\lambda) \cdot F_0 \cdot (1 - R(\lambda)) \cdot e^{(-\alpha(\lambda) x)} \quad (2.23)$$

où : F_0 : le flux des photons incidents non réfléchis.

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

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

La densité du photocourant totale (J_{total}) est la somme des densités des courants (J_n , J_p , J_{ZCE}) respectivement dans les régions n, p et ZCE. En effet, la densité du photocourant totale est indépendante de la tension de polarisation mais proportionnelle à l'éclairement donc elle est donnée en fonction de la longueur d'onde du rayonnement incident sous la forme [28] :

$$J_{total}(\lambda) = J_p(\lambda) + J_n(\lambda) + J_{ZCE}(\lambda) \quad (2.24)$$

$$J_p = \left[\frac{qF(1-R)\alpha L_p}{\alpha^2 L_p^2 - 1} \right] \cdot \left[\frac{\left(\frac{S_p L_p}{D_p} + \alpha L_p \right) e^{(-\alpha x_j)} \left(\frac{S_p L_p}{D_p} \cosh \frac{x_j}{L_p} + \sinh \frac{x_j}{L_p} \right)}{\frac{S_p L_p}{D_p} \sinh \frac{x_j}{L_p} + \cosh \frac{x_j}{L_p}} - \alpha L_p e^{(-\alpha x_j)} \right] \quad (2.25)$$

$$J_n = \left[\frac{qF(1-R)\alpha L_n}{\alpha^2 L_n^2 - 1} \right] e^{-\alpha(x_j+w)} \left[\alpha L_n - \frac{\frac{S_n L_n}{D_n} \left(\cosh \frac{\hbar}{L_n} - e^{(-\alpha \hbar)} \right) + \sinh \frac{\hbar}{L_n} + \alpha L_n e^{(-\alpha \hbar)}}{\frac{S_n L_n}{D_n} \sinh \frac{\hbar}{L_n} + \cosh \frac{\hbar}{L_n}} \right] \quad (2.26)$$

La densité du courant de la zone de charge est donnée par :

$$J_{ZCE} = -q \cdot F_0(\lambda) \cdot (1 - R) \cdot e^{(-\alpha x_j)} [1 - e^{-(\alpha w)}] \quad (2.27)$$

où :

S_p : vitesse de recombinaison des trous minoritaires photo-crées dans l'émetteur.

S_n : vitesse de recombinaison de électrons minoritaires photo-crées dans la base.

D_p : le coefficient de diffusion des trous minoritaires photo-crées dans l'émetteur.

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

L_p : la longueur de diffusion des trous minoritaires photo-crées dans l'émetteur.

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

τ_n : durée de vie moyenne des électrons minoritaires photo-crées dans la base.

τ_p : durée de vie moyenne des trous minoritaires photo-crées dans l'émetteur.

Le photocourant J_{ph} est calculé en intégrant sur l'ensemble du spectre solaire en fonction de λ [29]:

$$J_{ph} = \int_{\lambda_{min}}^{\lambda_{max}} (J_n + J_p + J_{zce}) d\lambda \quad (2.28)$$

La densité de courant totale est donnée par [29] :

$$I(V) = I_{ph} - I_{obs}(V) \quad (2.29)$$

2.4 Les interactions rayonnement - matière

Lorsque la lumière atteint un objet, certaines longueurs d'onde (λ) sont absorbées cependant d'autres sont réfléchies par l'objet (figure ci-dessous). Une partie du rayonnement peut être transmise à travers l'objet si celui-ci est plus ou moins transparent, avec un changement de direction de la propagation dû à la réfraction. La partie du rayonnement qui est absorbée modifie l'énergie interne (E_i) de l'objet et produit de la chaleur qui sera émise sous forme d'un rayonnement aux fréquences les plus basses. [30]. En termes physiques, la lumière est un genre d'énergie ou un rayonnement électromagnétique propageant dans l'espace à très grande vitesse. Plus précis, la lumière est comprise car une onde électromagnétique voyageant dans l'espace (à 3D), donc une énergie radiante. L'énergie de la lumière oscille périodiquement entre un minimum et un maximum en fonction de temps, comme une onde. La distance entre deux des maximum ou deux minimums, respectivement de l'onde électromagnétique est définis comme longueur d'onde, donnée dans le nanomètre (nm) [31]. Chaque couleur a une longueur d'onde spécifique, par exemple la lumière rouge a une longueur d'onde dans [620-750] nm, alors que la lumière verte a une longueur d'onde dans [495-570] nm [32]. Ainsi, les différents composants de la lumière sont caractérisés par une longueur d'onde caractéristique. La somme de toutes les longueurs d'onde, s'appelle un spectre (ensemble de raies) et chaque raie signifié une transition contrôlée par les règles de sélections déterminées par la mécanique quantique. Plus spécifiquement, un spectre représente une distribution d'énergie radiante. Par exemple, le spectre électromagnétique de la lumière visible s'étend approximativement de 390 nm jusqu'à approximativement à 780 nm [33]. On note que selon Einstein l'énergie des ondes électromagnétiques est liée à leurs longueurs d'onde, plus la longueur d'onde est courte, plus haut l'énergie. Par exemple, la lumière violette a une longueur d'onde plus courte que la lumière rouge et donc, une énergie plus élevée, tandis que la lumière infrarouge a moins d'énergie que la lumière visible due à sa plus longue longueur d'onde. Tous les matériaux sont caractérisés par un coefficient d'absorption (noté α), un coefficient de transmission (noté τ), et un coefficient de réflexion (noté R), qui expriment respectivement la part d'énergie absorbée, transmise et réfléchi. Ces trois coefficients ont des valeurs qui varient entre 0 et 1 et leur somme est toujours égale à 1, selon le principe de la conservation de l'énergie [34] :

$$\alpha + \tau + R = 1 \quad (2.30)$$

avec :

α : coefficient d'absorption à la longueur d'onde λ .

τ : coefficient de transmission à la longueur d'onde λ .

R : coefficient de réflexion à la longueur d'onde λ .

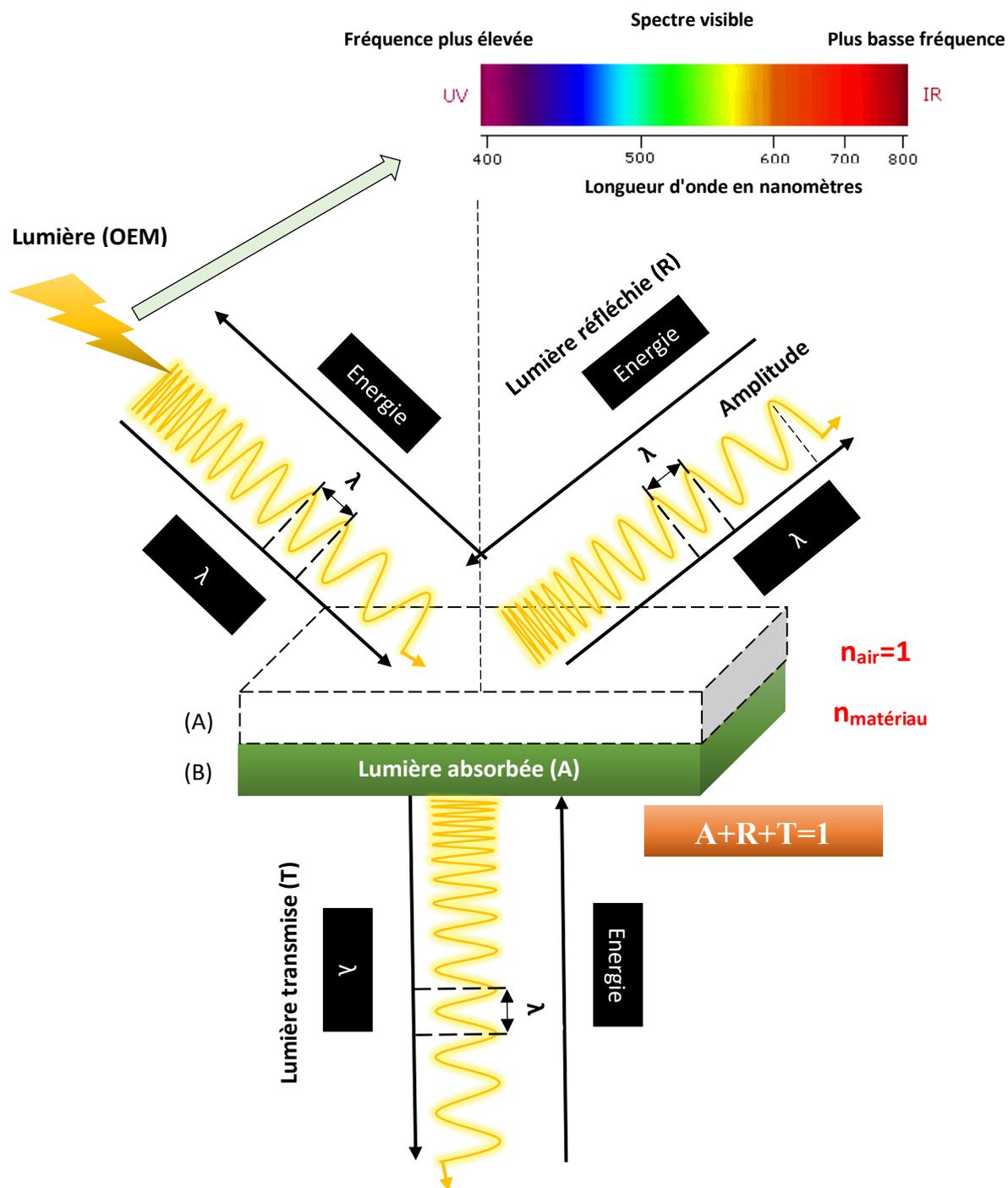


Figure 2.20 Les interactions rayonnement/matière. [35]

2.4.1 Propriétés optiques

Les propriétés optiques des semiconducteurs sont liées à leur structure électronique dans la mesure où elles mettent en jeu des transitions entre différents états électroniques [36]. Plusieurs domaines dans lesquels la lumière réagit avec la matière sont d'intérêt pratique. L'étude des propriétés optiques des matériaux (absorption, réflexion et transmission...) a été prouvée pour être un outil qui aide les chercheurs pour mieux comprendre de la structure électronique et atomique des matériaux [37].

2.4.1.1 Indice de réfraction et coefficient d'extinction

Lorsque l'absorption se produit dans un matériau, l'indice de réfraction est défini avec une composante complexe ($\tilde{n}(\lambda) = n(\lambda) + ik(\lambda)$) [31].

avec k le coefficient d'extinction [s.d]

2.4.1.1.1 Indice de réfraction (n)

Pour un matériau, l'indice de réfraction est donné par la relation suivante [38] :

$$n = \sqrt{\epsilon_r \mu_r} \quad (2.31)$$

avec

μ_r : La perméabilité magnétique relative du milieu ; ϵ_r : La permittivité relative d'un matériau

Pour un matériau non-magnétique ($\mu_r=1$), donc [39] :

$$n = \sqrt{\epsilon_r} \quad (2.32)$$

2.4.1.1.2 Coefficient d'extinction (k)

Le coefficient d'extinction (ou atténuation) d'un matériau, est une mesure qui caractérise la capacité du matériau à absorber la lumière à une longueur d'onde particulière. Le coefficient d'extinction (k) relie au coefficient d'absorption par l'expression [40]:

$$k(\lambda) = \frac{\lambda a(\lambda)}{4\pi} \quad (2.33)$$

Nous avons rappelé également que les parties réelle ($\epsilon_1 = n^2 - k^2$) et imaginaire ($\epsilon_2 = 2 n.k$) de la constante diélectrique peuvent être obtenus à partir de n et K [41].

Les constantes optiques extraites n et k pour les deux matériaux ZnSnN_2 et ZnGeN_2 sont illustrés en fonction de longueur d'onde sur la figure (2.21). [42-43]

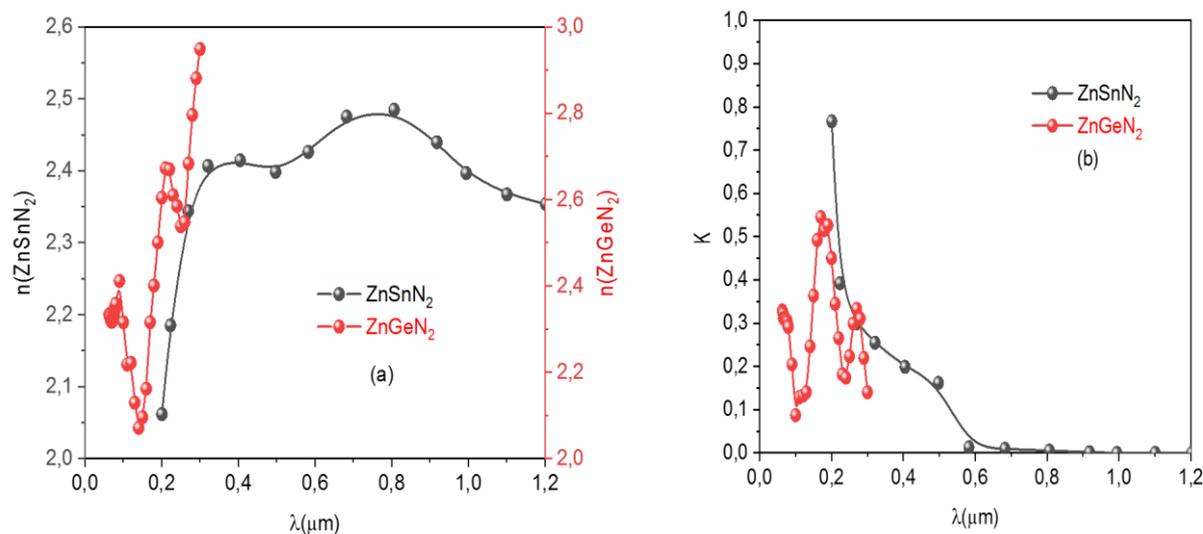


Figure 2.21 (a) Spectres d'indice de réfraction de ZnSnN_2 et ZnGeN_2 , (b) les coefficients d'extinction de ZnSnN_2 et ZnGeN_2 .

2.4.1.2 L'absorption

Le coefficient d'absorption d'un matériau est un paramètre important dans le domaine photovoltaïque car il nous a permet de comprendre le comportement du matériau avec la lumière, le coefficient d'absorption pour une façon précise, il permet de savoir à quelle profondeur la lumière peut se propager dans le matériau avant qu'elle ne soit totalement absorbée selon la loi de Beer-Lambert [44] :

$$I = I_0 e^{-\alpha d_M} \quad (2.34)$$

ou I_0 l'intensité incidente, I est l'intensité transmise et d_M l'épaisseur du matériau absorbant

2.4.1.2.1 Pour le ZnSnN_2 et le ZnGeN_2

Dans la figure (2.22) on constate que les coefficients d'absorption α (λ) pour les matériaux ZnSnN_2 et ZnGeN_2 présentent une absorption maximale pour des faibles longueurs d'onde (λ) $\sim 0.2 \mu\text{m}$.

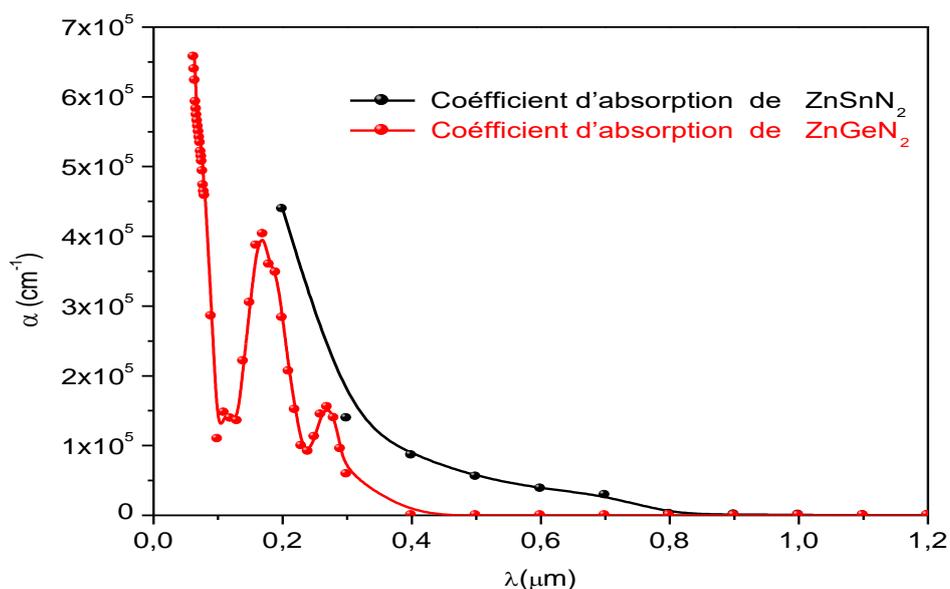


Figure 2.22 Coefficients d'absorption α en fonction de la longueur d'onde λ pour les matériaux ZnSnN_2 et ZnGeN_2 .

2.4.1.2.2 Pour le $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$

La figure 2.23 montre les spectres d'absorption $\alpha(\lambda)$ de $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$. Les données $\alpha(\lambda)$ ont été obtenus à partir de l'ellipsométrie spectroscopique (ES) (résultats expérimentaux) des publications [42-43]. À partir des valeurs expérimentales de coefficient d'extinction (k) et la longueur d'onde λ , le α a été calculé selon la relation. (2.33).

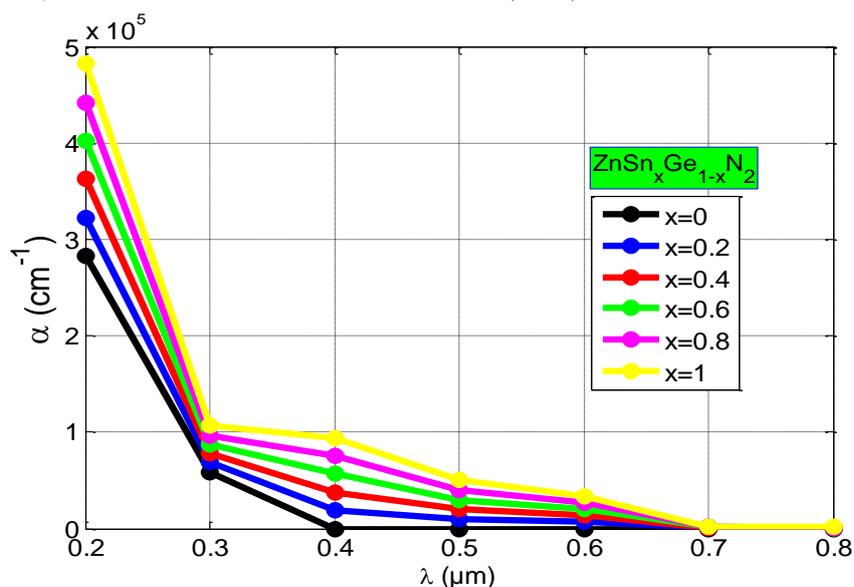


Figure 2.23 Coefficients d'absorption α en fonction de la longueur d'onde de la structure $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$.

2.4.1.3 La réflexion optique

Si une onde plane se propage entre deux milieux avec des constants diélectriques différents, elle sera divisée en deux, une onde réfléchie et une onde réfractée. En général, le coefficient de réflexion (R) et coefficient de transmission (T) est défini comme le rapport de l'intensité réfléchie (I_r), l'intensité transmise (I_t) sur l'intensité incidente (I_i) [45]:

$$R = \frac{I_r}{I_i}; T = \frac{I_t}{I_i} \quad (2.35)$$

Pour une incidence normale (\perp à l'interface air/SC), le coefficient de réflexion est donné par la relation suivante [46] :

$$R = \left(\frac{n_2 - n_1}{n_2 + n_1} \right)^2 \quad (2.36)$$

avec

n_1 : Indice de réfraction de l'air .

n_2 : Indice de réfraction du semiconducteur [42-43].

2.4.1.4 La transmission optique

A partir de l'équation (2.36), le coefficient de transmission (T) est donné par la relation suivante [45] :

$$T = 1 - R = \frac{4n}{(n+1)^2} \quad (2.37)$$

La constante diélectrique d'un matériau décrit la réponse d'un matériau à un champ électrique appliqué et est définie par : [46]

$$\epsilon_r = \chi \cdot \epsilon_0 \quad (2.38)$$

avec

χ : La susceptibilité du matériau [s.d.]

ϵ_0 : La permittivité du vide [$8.85 \cdot 10^{-12}$ F.m⁻¹].

2.4.1.4.1 Pour le ZnSnN_2 et le ZnGeN_2

En considérant l'interface (air/semiconducteur), la figure 2.24 (a et b) montre la variation du coefficient de réflexion et du coefficient de transmission en fonction des longueurs d'ondes pour les deux semiconducteurs ZnSnN_2 et ZnGeN_2 . Pour le ZnSnN_2 , on obtient un coefficient maximum de réflexion de 18% et un coefficient maximum de transmission de 88% [47] et pour le ZnGeN_2 , on obtient un coefficient maximum de réflexion de ~ 24 % et un coefficient maximum de transmission de ~88%.

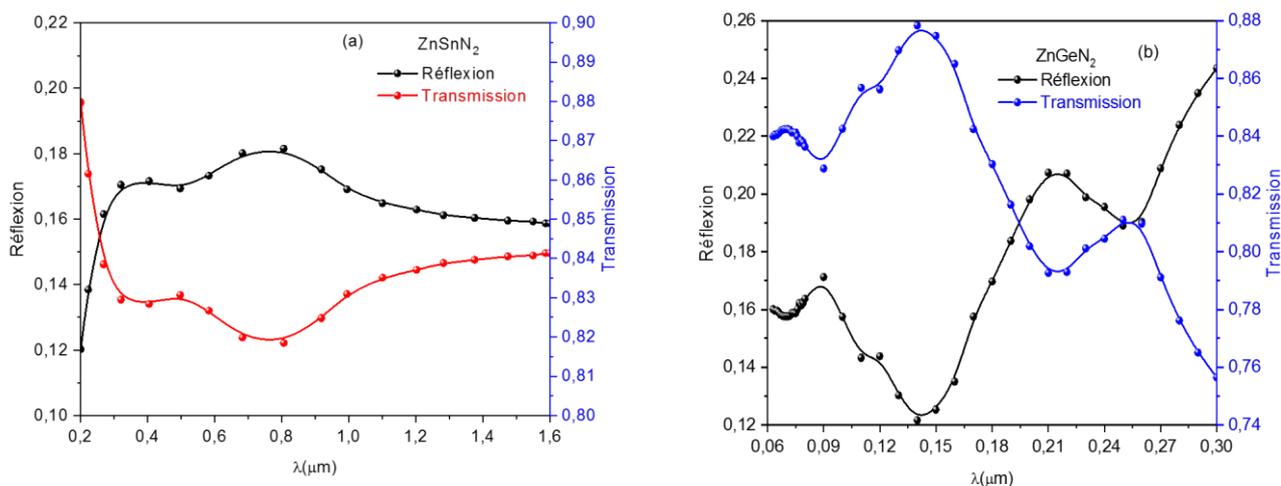


Figure 2.24 La variation du coefficient de réflexion et du coefficient de transmission en fonction des longueurs d'ondes pour : (a) ZnSnN_2 et (b) ZnGeN_2 .

2.4.1.4.2 Pour le $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$

Certainement, la variation de la quantité d'étain via la loi de Vegard affecte les propriétés optiques telles que le coefficient de la réflexion et le coefficient de la transmission [48]. La figure montre la variation du coefficient de réflexion (R) et du coefficient de transmission (T) en fonction des longueurs d'onde pour différentes valeurs de $x(\text{Sn})$. Dans la figure (2.25), nous avons indiqué qu'on observe clairement l'effet de la concentration d'étain dans des faibles longueurs d'onde. Principalement, dans la région UV, le coefficient de réflexion est plus grand pour la faible concentration d'étain. Ceci implique que dans la région visible un contenu inférieur d'étain dans but de réduire le nombre de photons reflétés, la même chose pour le coefficient de la transmission.

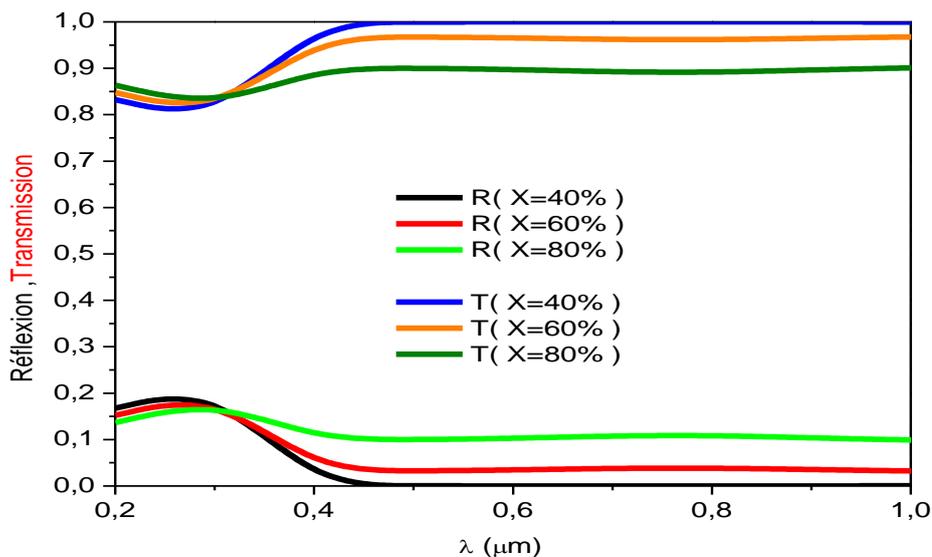


Figure 2.25 La variation du coefficient de réflexion et du coefficient de transmission en fonction des longueurs d'ondes pour l'alliage $ZnSn_xGe_{1-x}N_2$.

2.5 L'effet de la température sur l'absorption

L'augmentation de la température est un facteur qui peut affecter les propriétés optoélectroniques des semiconducteurs. Nous avons l'habitude de l'équation de Varshni (loi empirique) pour analyser la dépendance de la température des bandes interdites pour les semiconducteurs [47] :

$$E_g = E_g(0) - \alpha \frac{T^2}{T + \beta} \quad (2.39)$$

où $E_g(0)$ est la largeur de bande interdite à température ($T=0$ K), α et β des constantes, β dépend de la température de Debye. Ces valeurs sont données à titre indicatif pour le $ZnSnN_2$ et le $ZnGeN_2$ dans le tableau suivant :

Tableau 2.1 : Données relatives à la dépendance du gap de $ZnSnN_2$ et le $ZnGeN_2$ en fonction de la température.

	$ZnSnN_2$ [49]	$ZnGeN_2$ [50]
$E_g(0K)$ eV	1.497	3.36
α (meV/K)	0.71	4.54
β (K)	488	4850

La figure (a et b) montre l'évolution du gap d'énergie en fonction de la température pour les deux matériaux ZnSnN_2 et ZnGeN_2 . Il est clair que la bande interdite diminue avec l'augmentation de la température, à haute température les liaisons interatomiques sont affaiblies, il ne faut forcément qu'une énergie faible pour rompre ces liaisons et obtenir un électron dans la bande de conduction.

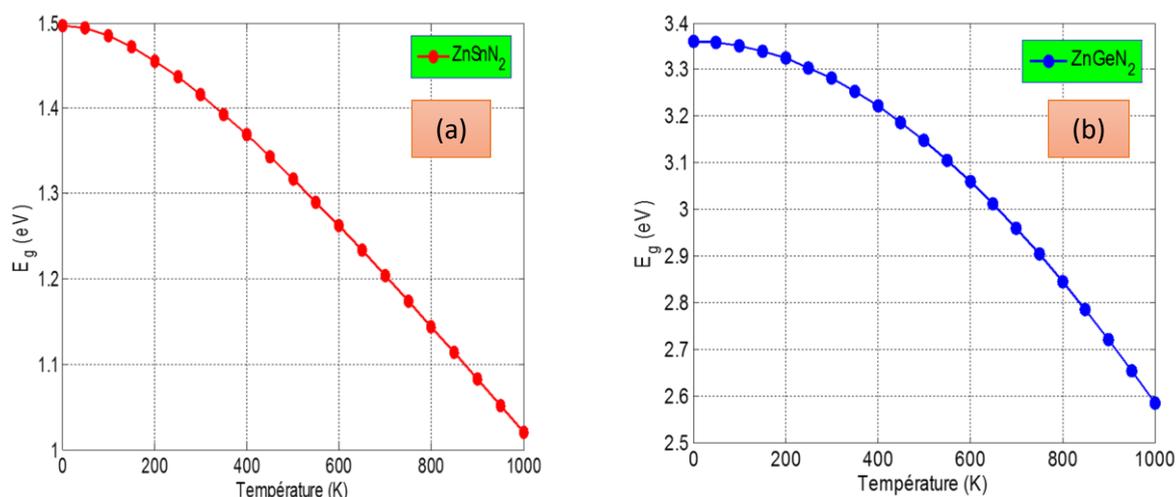


Figure 2.26 Evolution du gap d'énergie en fonction de la température pour : (a) ZnSnN_2 et (b) ZnGeN_2 .

La figure (2.27) montre la comparaison entre la courbe du gap d'énergie en fonction de la température et celle mesuré par [49]. On peut voir clairement qu'on a un très bon accord.

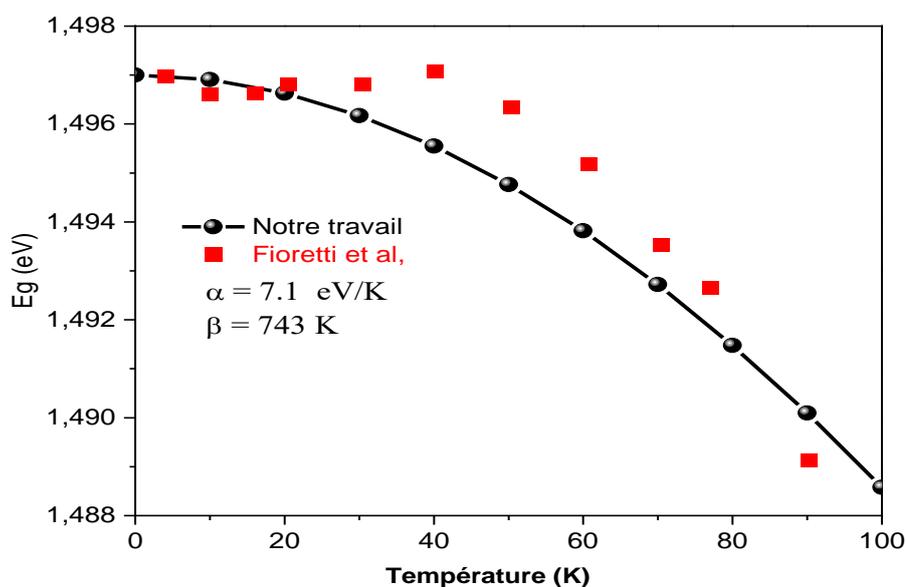


Figure 2.27 Evolution du gap d'énergie en fonction de la température calculée et mesuré par [49].

Pour l'alliage quaternaire $ZnSn_xGe_{1-x}N_2$, la relation devient :[51]

$$Eg(x, T) = Eg(x, 0) - \frac{\alpha(x)T^2}{\beta(x)+T} \quad (2.40)$$

Pour calculer α et β nous utilisons la loi de Vegard [51] :

$$\alpha(ZnSn_xGe_{1-x}N_2) = x \cdot \alpha(ZnSnN_2) + (1 - x) \cdot \alpha(ZnGeN_2) \quad (2.41)$$

$$\beta(ZnSn_xGe_{1-x}N_2) = x \cdot \beta(ZnSnN_2) + (1 - x) \cdot \beta(ZnGeN_2) \quad (2.42)$$

Les figures (2.28 et 2.29) montrent l'évolution du gap d'énergie en fonction de la température et de la concentration pour les deux cas d'énergie et de la longueur d'onde du gap.

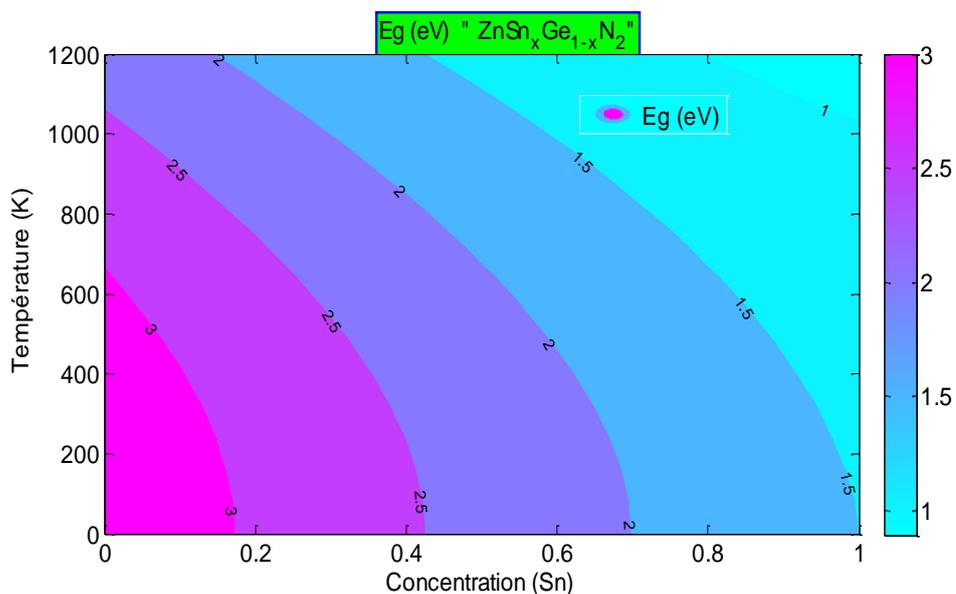


Figure 2.28 Evolution du gap d'énergie en fonction de la température et de la concentration.

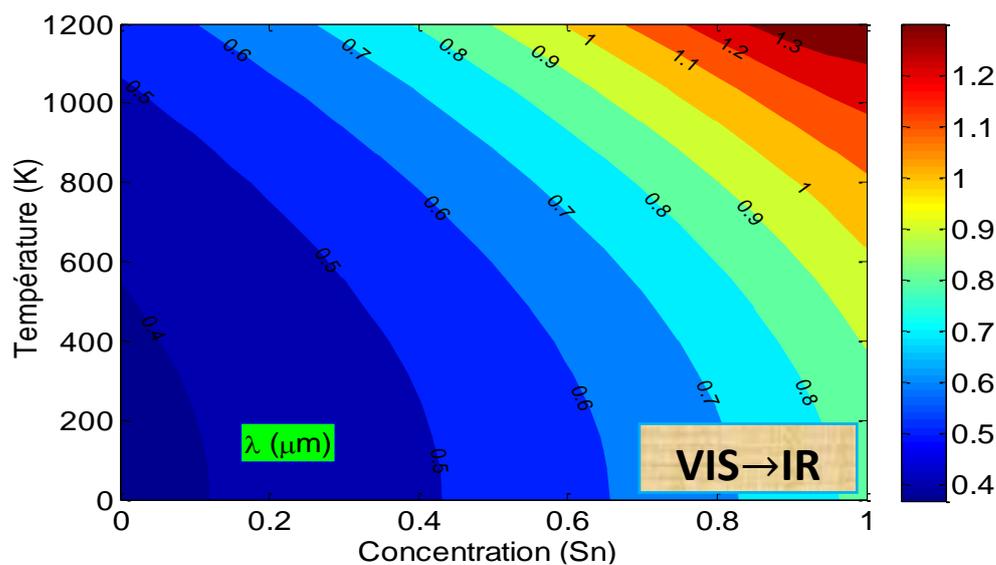


Figure 2.29 Evolution de la longueur d'onde du gap en fonction de la température et de la concentration.

Il existe un autre modèle qui calcule le coefficient d'absorption en tenant compte de l'effet de la contrainte (présence du substrat) tout en respectant le principe que l'absorption ne se fait que lorsque l'énergie photonique reçue est supérieure ou égale à celle de E_g . La relation qui lie le coefficient d'absorption et E_g est donnée par l'expression suivante [52]:

$$\alpha(E) = \alpha_0 \frac{\sqrt{E - E_g}}{E} ; \quad h\nu \geq E_g \quad (2.43)$$

avec : E_g est l'énergie de la bande interdite [eV].

α_0 est le paramètre d'ajustement [eV/cm^{-1}].

Tels que : α_0 pour le $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$ est égale à $10^6 \text{ eV}/\text{cm}^{-1}$ [53].

On note que ce modèle est valable pour les deux cas bande interdite contraint et bande interdite non contraint.

D'après la figure 2.30 (a, b), il est clair que la concentration d'étain a un impact direct sur la valeur de coefficient d'absorption, un lien peut être établi entre la diminution de l'énergie de la bande interdite et le coefficient d'absorption. Par exemple, (a) pour $x=1$ et $\lambda=0.3\mu\text{m}$, le coefficient d'absorption total égal $3.6 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-1}$. Dans (b) et pour $E_{\text{ph}}=4\text{eV}$, nous constatons que x et T sont pour effet d'augmenter le coefficient d'absorption allant jusqu'à $4.5 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-1}$ à haute température.

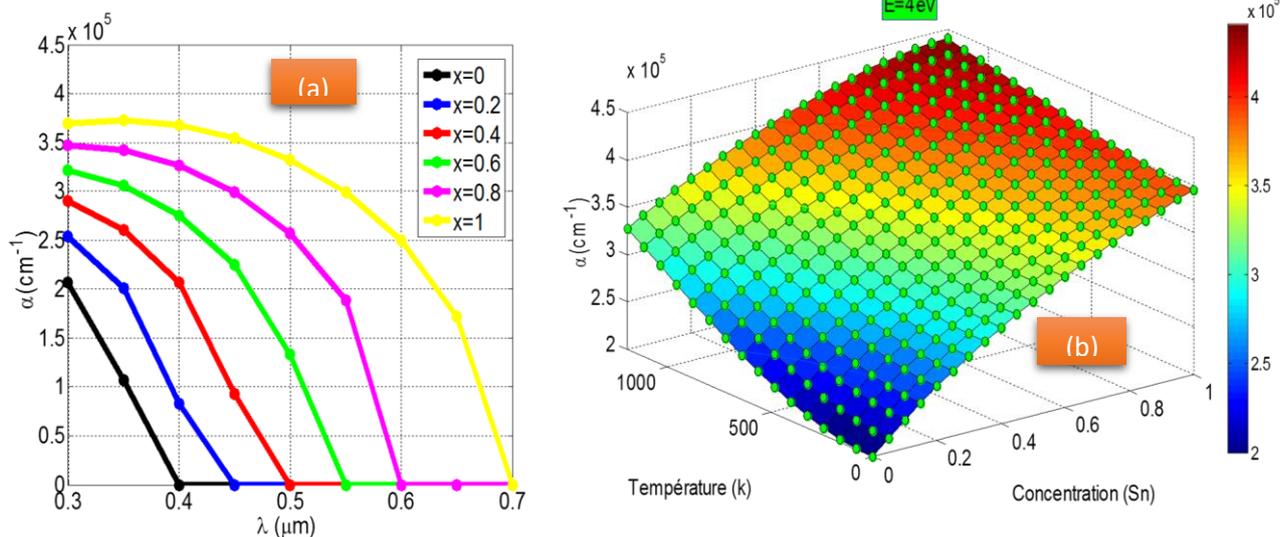


Figure 2.30 Coefficients d'absorption α : (a) en fonction de la longueur d'onde λ pour différentes concentrations d'étains dans l'alliage $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$ et (b) en fonction de la température.

2.6 Propriétés mécaniques

2.6.1 Paramètre de maille

Les paramètres de maille respectifs de ZnSnN_2 et de ZnGeN_2 sont a_{ZnSnN_2} et a_{ZnGeN_2} , le paramètre de maille de l'alliage $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$ non contraint est déterminé par la loi linéaire de Vegard en fonction de la concentration d'étain et des paramètres de maille des composés ternaires non contraint ZnSnN_2 et de ZnGeN_2 . La figure (2.31) illustre les paramètres de mailles des alliages $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$ et $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ en fonction de la concentration d'étain et l'indium.

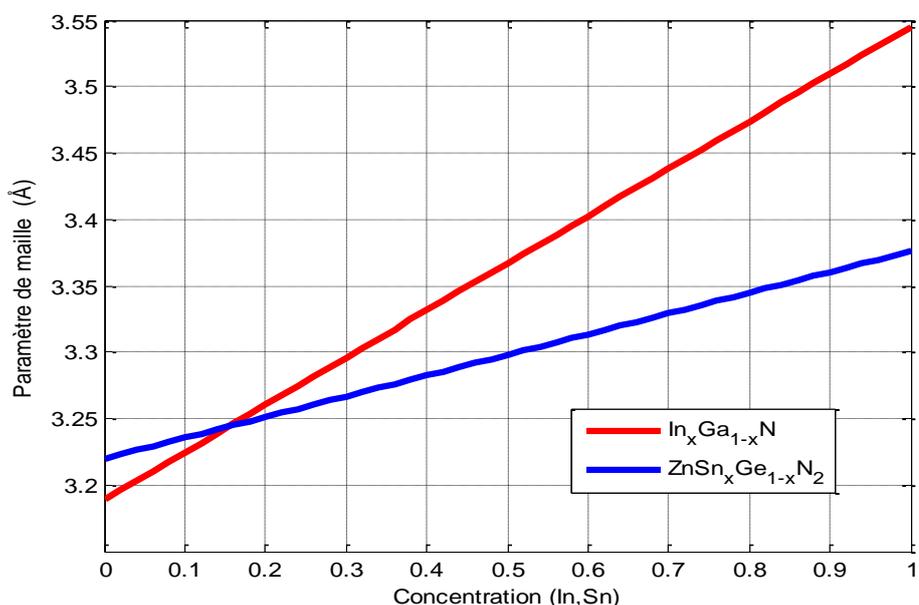


Figure 2.31 Paramètre de maille des alliages $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$ et $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ en fonction de la concentration d'étain (Sn) et l'indium (In).

Nous avons tracé le paramètre de maille (a) des alliages $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$ et $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ en fonction de la concentration d'étain et l'indium sur la figure (2.31), nous pouvons voir que pour les deux éléments l'étain et l'indium sont pour effet d'augmenter le paramètre de maille.

Pour la structure wurtzite (hexagonale $\equiv a_w = a/2$), nous avons calculé les deux paramètres de maille a et c ($a = b$) qui caractérisent la structure wurtzite : [54]

$$a(\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2) = x \cdot a(\text{ZnSnN}_2) + (1-x) \cdot a(\text{ZnGeN}_2) \quad (2.44)$$

$$c(\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2) = x \cdot c(\text{ZnSnN}_2) + (1-x) \cdot c(\text{ZnGeN}_2) \quad (2.45)$$

2.6.2 Désaccord paramétrique

Grâce à l'avancement de la technologie de croissance, l'épitaxie des matériaux désaccordés a été bien maîtrisée. Cependant, l'influence de la contrainte est utilisée dans plusieurs composants électroniques et optoélectroniques. [55]

Lorsque le paramètre de maille du substrat a_s différent de celui de la couche épitaxiée a_e , il impose sa maille à cette dernière, cette différence de maille provoque une déformation de la couche épitaxiée, soit en tension ($a_s > a_e$) ou en compression ($a_e > a_s$) par des déformations biaxiales (ϵ_{xx} et ϵ_{yy}) et uniaxiale (ϵ_{zz}) selon la figure (2.32) [56].

Donc les déformations sont données par [56] :

❖ Biaxiale dans le plan de croissance :

$$\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \frac{a_s - a_e}{a_e} = \epsilon_{//} \quad (2.46)$$

❖ Uniaxiale dans la direction de croissance :

$$\epsilon_{zz} = \frac{c_s - c_e}{c_e} = -2 \frac{c_{12}}{c_{11}} \epsilon_{xx} = \epsilon_{\perp} \quad (2.47)$$

où : ϵ : La déformation ou le désaccord de maille.

a_s et c_s : Les paramètres de maille du substrat pour un système wurtzite.

a_e et c_e : Les paramètres de maille de la couche épitaxiée pour un système wurtzite.

C_{ij} : Les coefficients d'élasticité.

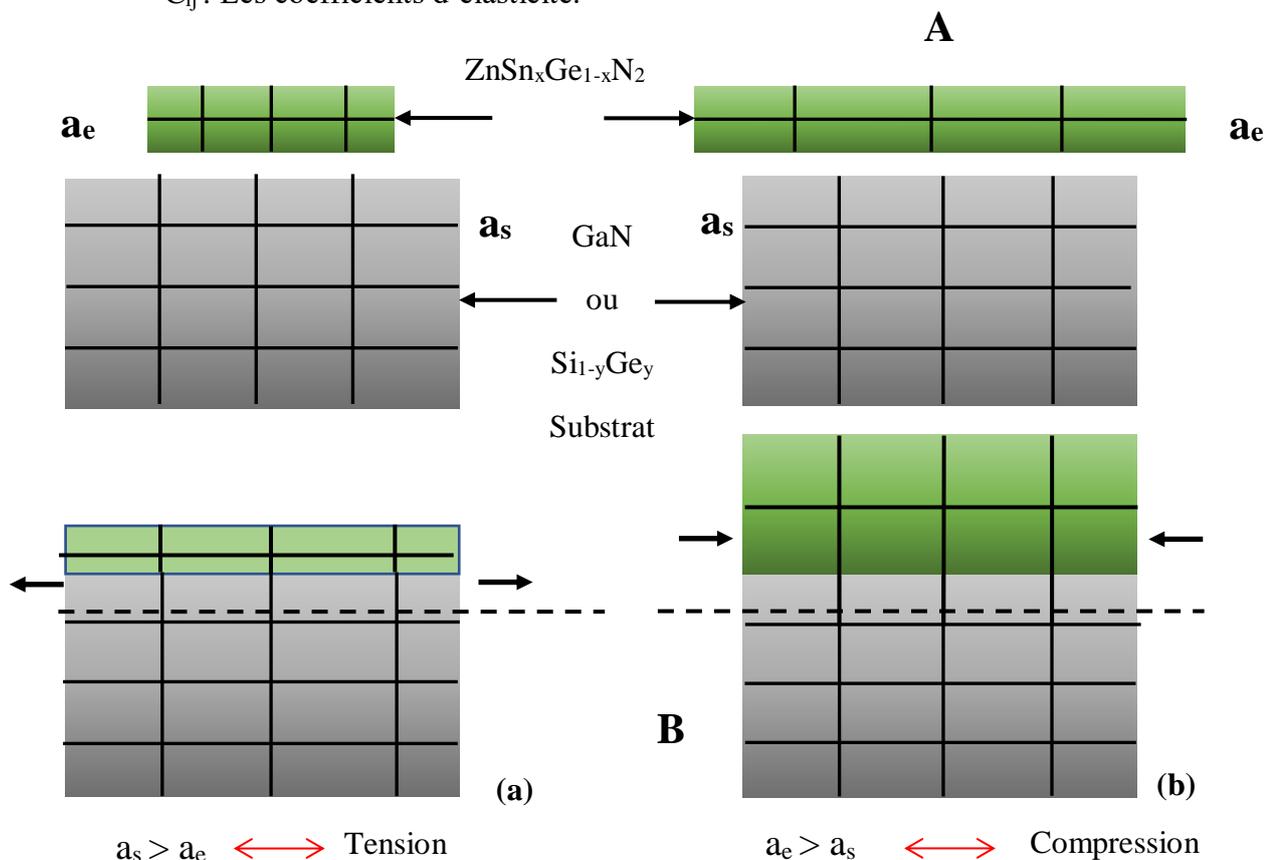


Figure 2.32 Semiconducteurs A et B avant et après épitaxie. [56]

2.6.2.1 Pour un substrat du GaN

Le nitrure de gallium (GaN) à grand gap, présente beaucoup d'avantages, car il permet d'associer des semiconducteurs à base de nitrures et donc nos matériaux étudiés, ce qui autorise la conception de dispositifs à hétérostructures. Pour des valeurs de x (concentration d'étain) et lors de l'épitaxie de $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$ sur le substrat GaN, la connexion des mailles à l'interface entraîne l'existence d'une déformation de la maille cristalline. La figure (2.33) montre la variation du désaccord de maille en fonction de la concentration d'étain pour l'alliage $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$ contraint sur GaN. A partir de l'équation de la loi de Vegard, on a calculé le désaccord de maille, On a remarqué une augmentation de la déformation ε ($\varepsilon_{//}$ et ε_{\perp}) avec l'augmentation de la concentration d'étain, explique une containte en compression (car $a_e > a_s$).

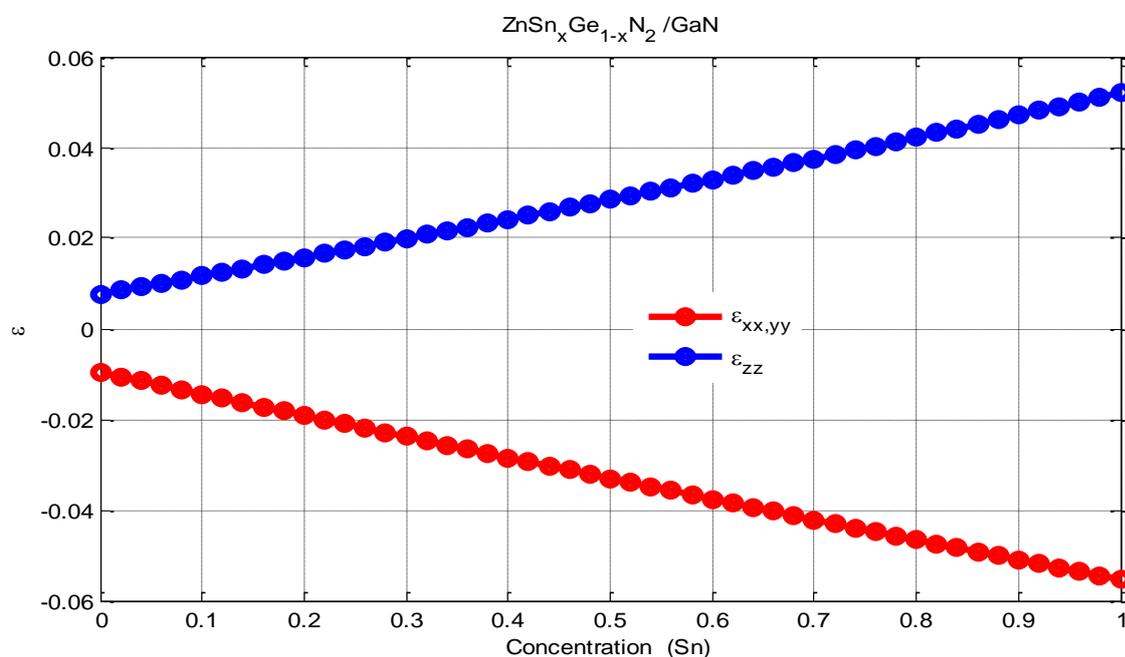


Figure 2.33 la variation du désaccord de maille en fonction de la concentration d'étain pour l'alliage $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$ contraint sur GaN.

2.6.2.2 Pour un substrat du $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$

L'avantage de l'alliage $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$, par rapport aux semiconducteurs III-V réside dans le fait que l'industrie de la microélectronique est essentiellement basée sur le Silicium, sa technologie est déjà très au point et son coût d'élaboration est moindre. Ainsi, la connaissance de la technologie silicium associé aux propriétés physiques apportées par les alliages $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ permet d'améliorer les performances des composants optoélectroniques. En utilisons maintenant la maille orthorhombique de ZnSnN_2 et de ZnGeN_2 pour calculer le désaccord paramétrique pour un substrat de $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$, on a choisi la direction (100) qui correspond à ε_{xx} . La figure 2.34 (a et b)

montre la variation du désaccord de maille en fonction de la concentration d'étain et de germanium pour l'alliage $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$ contraint sur un substrat du $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$.

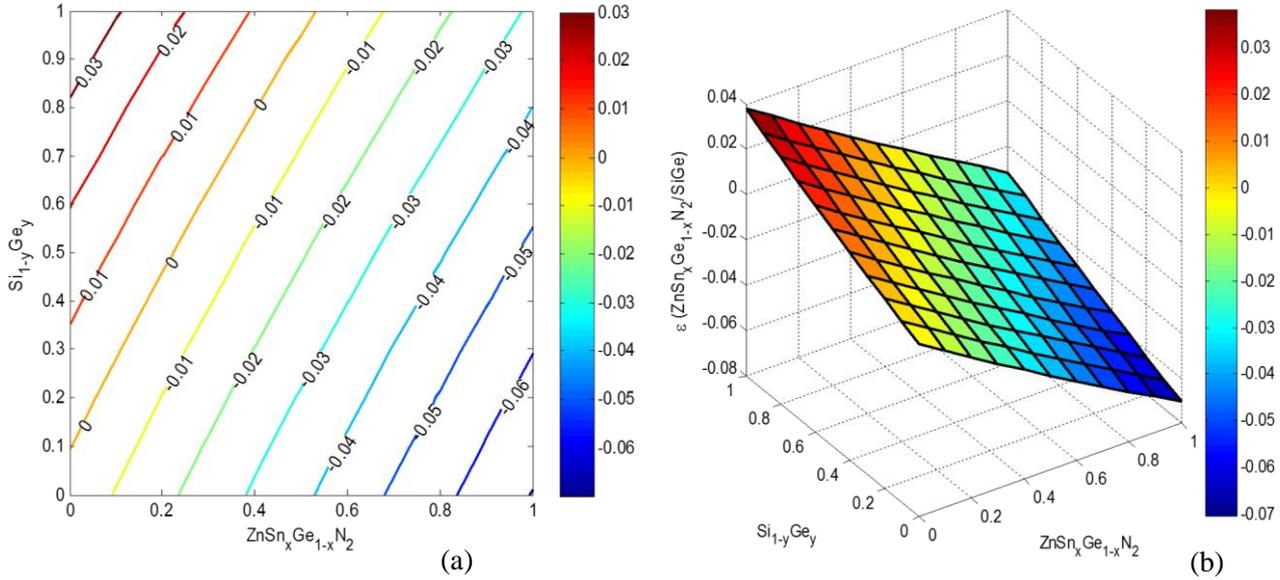


Figure 2.34 La variation du désaccord de maille en fonction de la concentration d'étain et de germanium pour l'alliage $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$ contraint sur un substrat du $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$. (a) 2D et (b) 3D

D'après cette simulation on a deux zones de contrainte, en tension pour $\epsilon > 0$ ($a_s > a_e$), une contrainte en compression lorsque $\epsilon < 0$ ($a_s < a_e$) et un accord de maille correspond à la ligne $y = 0.1 + 1.7x$, le matériau ne subit aucune contrainte $\epsilon = 0$ ($a_s = a_e$), dans ce cas s'il y aura un accord total entre le substrat et le matériau épitaxie.

2.6.3 L'épaisseur critique

Il est clair que lors d'une croissance épitaxiale, la couche épitaxie dépasse une valeur limite appelée épaisseur critique (h_c), la contrainte se relaxer quand le désaccord de maille est faible entre la couche épitaxie et le substrat. Si l'épaisseur de la couche épitaxie est supérieur à h_c , le désaccord va générer des densités de dislocation à l'interface de la croissance, malheureusement ces dislocation se propagent du substrat vers l'interface d la croissance et la couche commence à relaxer , pour notre étude , nous avons utilisé le modèle le plus connu, celui qui décrit la variation de l'épaisseur critique en fonction de désaccord paramétrique, celui de Mathew et Blackselee [57] :

$$h_c = \frac{a_e}{\beta \cdot \sqrt{2} \cdot \pi \cdot \epsilon} \cdot \frac{1 - 0.25 \cdot \gamma}{1 + \gamma} \cdot \ln \left(\frac{h_c \cdot \sqrt{2}}{a_e} + 1 \right) \quad (2.48)$$

avec

ε est le désaccord paramétrique qui est donné par $\varepsilon = \left| \frac{a_s - a_e}{a_e} \right|$.

γ est le coefficient de poisson qui est donné par $\gamma = \frac{C_{12}}{C_{11} + C_{12}}$.

C_{11} et C_{12} sont les constantes d'élasticité obtenues par l'interpolation linéaire des ternaires.

a_e est le paramètre de maille de la couche relaxée.

β est un coefficient qui prend les valeurs suivantes selon le type de la structure (égale à 4 dans le cas d'une couche unique ; à 2 pour un puits quantique ; 1 dans le cas d'un super-réseau) [58] .

On note que ce modèle décrit la variation de l'énergie mécanique en fonction de désaccord paramétrique qui signifie que lorsque le désaccord est très grand l'épaisseur critique est très petite [59].

2.6.3.1 Pour un substrat du GaN

Pour la structure $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2/\text{GaN}$, nous avons tracé sur la figure (2.35), la variation de l'épaisseur critique en fonction des fractions d'étain (Sn), nous constatons que l'étain a pour effet de diminuer l'épaisseur critique pour une contrainte compressive.

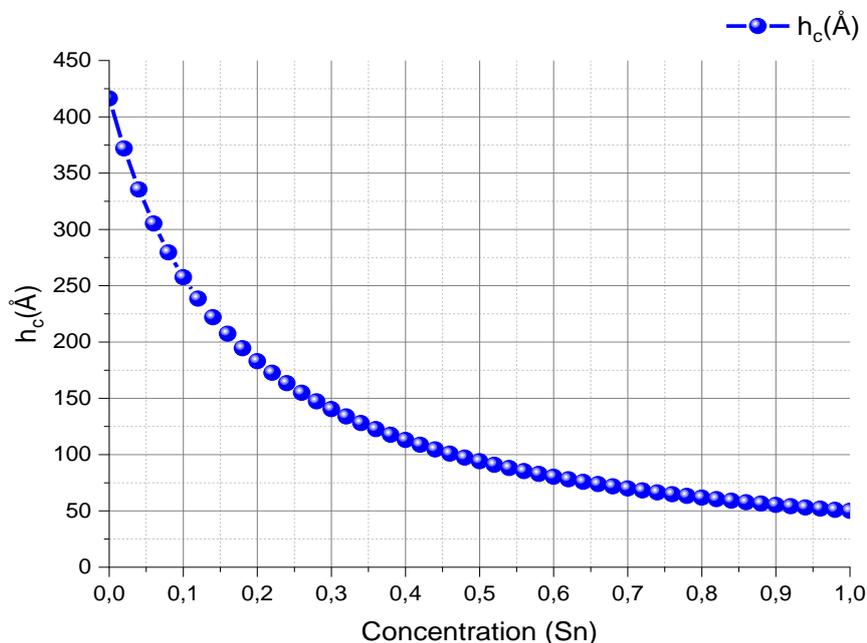


Figure 2.35 Variation de l'épaisseur critique de $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$ en fonction de la concentration d'étain contraint sur GaN.

2.6.3.1 Pour un substrat du $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$

Pour la structure $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2 / \text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$, nous avons tracé sur la figure (2.36), la variation de l'épaisseur critique en fonction des fractions d'étain et de germanium pour les alliages $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$ et $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$, nous constatons que l'étain et germanium a pour effet diminuer l'épaisseur critique pour une contrainte compressive. Pour le cas de l'accord de maille correspond à la ligne $y=0.1+1.7x$, l'épaisseur de la couche $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$ ne doit pas dépasser $\sim 10^4$ Å afin d'avoir une accorde paramétrique donc une bonne structure cristalline de l'alliage $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$.

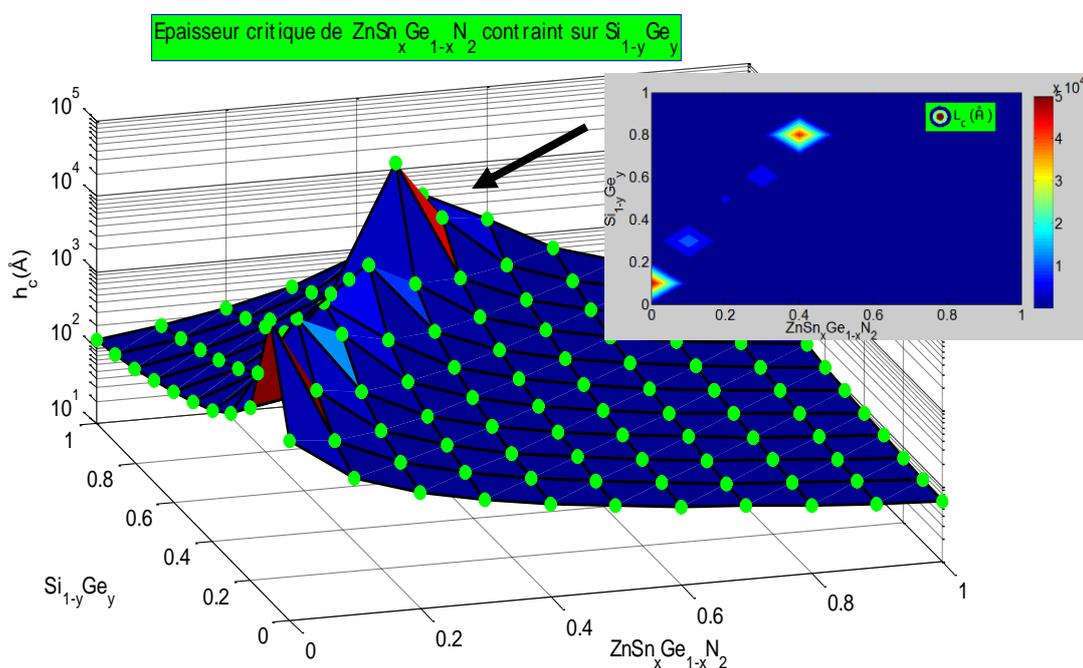


Figure 2.36 Variation de l'épaisseur critique de $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$ contraint sur $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ en fonction de la concentration d'étain (Sn) et de germanium (Ge) .

2.7 Propriétés électroniques

2.7.1 La bande interdite

Les paramètres électroniques de la bande d'énergie des alliages de semiconducteur et de leur dépendance à la composition sont très importants. La recherche sur les paramètres de dispositif a été entravée par un manque de la connaissance définie de divers paramètres du matériau. Ceci rend nécessaire l'utilisation d'une certaine sorte des lois d'interpolation (quadratique ou linéaire). Dans ce contexte, nous utilisons généralement la loi de Vegard. La loi de Vegard est

une loi empirique (extrait à partir des données expérimental) indiquant que les valeurs des propriétés d'un alliage (gap d'énergie « E_g », paramètre de maille « a », constants élastiques « C_{ij} », etc.) peuvent être déterminées par une interpolation linéaire des valeurs des propriétés de ses composants [60]. L'expression du gap non contraint du $ZnSn_xGe_{1-x}N_2$ en fonction de la concentration d'étain [53] est donnée par :

$$E_g(ZnSn_xGe_{1-x}N_2) = x \cdot E_g(ZnSnN_2) + (1-x) \cdot E_g(ZnGeN_2) - b \cdot x \cdot (1-x) \quad (2.49)$$

x est la concentration d'étain dans $ZnSn_xGe_{1-x}N_2$ [s.d.].

b est le paramètre de la courbure (Bowling) [eV].

$E_g(ZnSn_xGe_{1-x}N_2)$ est l'énergie de la bande interdite de $ZnSn_xGe_{1-x}N_2$ [eV].

$E_g(ZnSnN_2)$ est l'énergie de la bande interdite de $ZnSnN_2$ [eV].

$E_g(ZnGeN_2)$ est l'énergie de la bande interdite de $ZnGeN_2$ [eV].

On note que pour le $ZnSn_xGe_{1-x}N_2$, le paramètre de Bowling est compris entre 0.29 et 0.87 [53,61-62]. On note également que d'après la figure 2.37 (b) ci-dessous que le paramètre de Bowling de l'alliage $ZnSn_xGe_{1-x}N_2$ est inférieur à celui de l'alliage $In_xGa_{1-x}N$ [63]. Cette valeur basse de b signifie que la variation du gap du $ZnSn_xGe_{1-x}N_2$ est plus linéaire et sa modulation plus simple que l'alliage $In_xGa_{1-x}N$. La figure 2.37 (a) montre que l'énergie de la bande interdite évolue suivant la concentration de l'étain et de l'indium pour les deux alliages $ZnSn_xGe_{1-x}N_2$ et $In_xGa_{1-x}N$. On remarque pour l'alliage $ZnSn_xGe_{1-x}N_2$ que E_g diminue de 3.4 eV jusqu'à 1.8 eV au moment où la concentration d'étain croît de 0 (0%) jusqu'à 1 (100%).

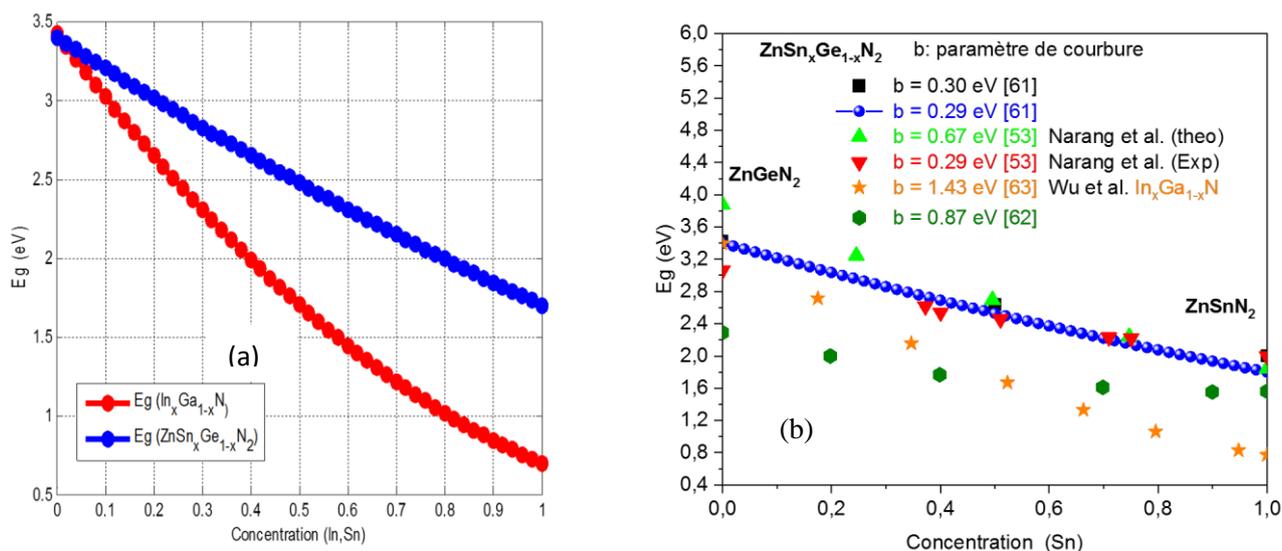


Figure 2.37 Évolution du gap d'énergie interdite non contraint de $ZnSn_xGe_{1-x}N_2$ et $In_xGa_{1-x}N$, (a) en fonction de la concentration d'étain et l'indium et (b) pour différents paramètres de bowing [53,61-63].

2.7.2 Mobilité des porteurs dans le ZnSnN₂

Pour le calcul de la mobilité, nous avons utilisé une formule qui ne dépend pas de la température, mais elle nous donne la variation de la mobilité des porteurs à 300K, selon les densités des donneurs et des accepteurs. Selon des travaux de Caughey et de Thomas sur la mobilité, ils ont constaté qu'il y a une ressemblance forte à la fonction de Fermi-Dirac (ou à la tangente hyperbolique) ce qui peut être exprimé sous la forme [64]:

$$\mu = \mu_{min} + \frac{\mu_0}{1 + \left(\frac{N}{N_{ref}}\right)^\alpha} \quad (2.50)$$

avec : μ est la mobilité et N la densité de dopage (N_d : densités de donneurs ; N_a : densités d'accepteurs). [65]

La figure (2.38) présente la variation de la mobilité des électrons et des trous en fonction de la concentration de dopage à $T=300$ K pour le ZnSnN₂, la mobilité diminue légèrement avec la concentration de dopage jusqu'à une concentration de dopage de l'ordre de 10^{17} cm⁻³ pour les électrons et 10^{19} cm⁻³ pour les trous, après la mobilité diminue pour les deux porteurs d'une façon remarquable puis se stabilise.

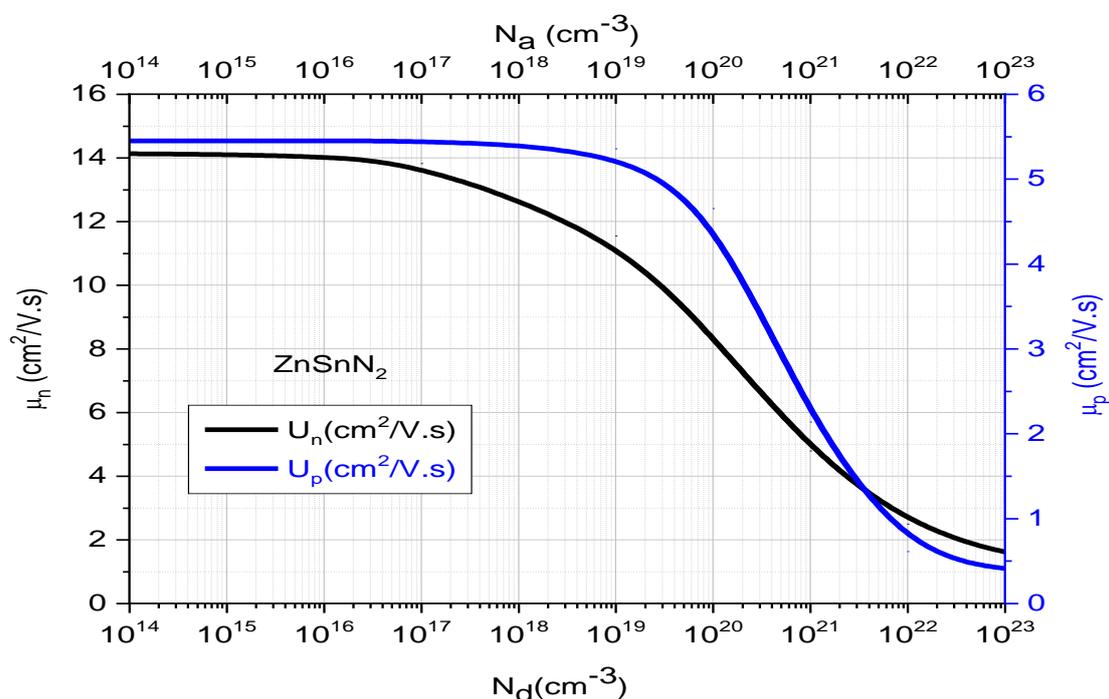


Figure 2.38 Mobilité des électrons et des trous en fonction de la concentration de dopage pour le ZnSnN₂ à $T=300$ K.

Pour un semiconducteur de type n, la conductivité électrique (σ) est donné par [66] :

$$\sigma (n) = q \cdot \mu_n \cdot N_d \quad (2.51)$$

Pour calculer la résistivité d'un semiconducteur de type n, on utilise l'équation (2.51) car la résistivité est définie comme inverse de la conductivité, donc elle s'exprime par [66] :

$$\rho (n) = \frac{1}{\sigma (n)} \quad (2.52)$$

La conductivité et la résistivité électriques ont été calculées avec les expressions ci-dessus est montrée dans les figures ci-dessous. En pratique, on obtient facilement le ZnSnN₂ de type n, mais la concentration des dopants obtenus peuvent être élevés (de l'ordre de 10¹⁹ atomes/cm³), qui permettent d'atteindre des résistivités très faible (de l'ordre de 10⁻³ Ω.cm) [67]. En 2020, Chinnakutti et al. [68] leurs études ont été basées sur le changement de dopants du type n au type p par injection de Ba. Les couche minces obtenues de Ba:ZnSnN₂ ont montré une concentration en trou élevée dans la gamme de 10¹⁸-10¹⁹ atomes/cm³ avec basse résistivité de 10⁻¹ Ω.cm et une mobilité raisonnable de 0,5-5 cm²v⁻¹ s⁻¹. La figure (2.39) représente la variation de la conductivité électrique et de la mobilité pour un type n de ZnSnN₂ en fonction de la densité de dopage (en donneurs). Pour les N_d très élevées au-delà de 10¹⁹ cm⁻³ et que la mobilité est égale à 11.39 cm²v⁻¹ s⁻¹, la conductivité électrique commence à augmenter jusqu'à 4 10³ Ω⁻¹.cm⁻¹. La figure (2.40) représente la variation de la résistivité électrique et de la mobilité pour un type n de ZnSnN₂ en fonction de la densité de dopage (en donneurs). Pour les N_d de l'ordre de ~ 10¹⁸ cm⁻³ et que la mobilité est élevée, la résistivité électrique est élevée de l'ordre de 0.47 Ω.cm., au-delà de ~10²⁰ cm³, la résistivité électrique commence à diminuer jusqu'à 2.504 10⁻⁴ Ω.cm. Nous constatons que les valeurs de n et p dépendent du type de semiconducteur utilisé (si intrinsèque ou extrinsèque). L'injection ou le dopage en quantité plus ou moins importante de porteurs, permettent de faire varier la résistivité électrique, la conductivité électrique et la mobilité d'un semiconducteur.

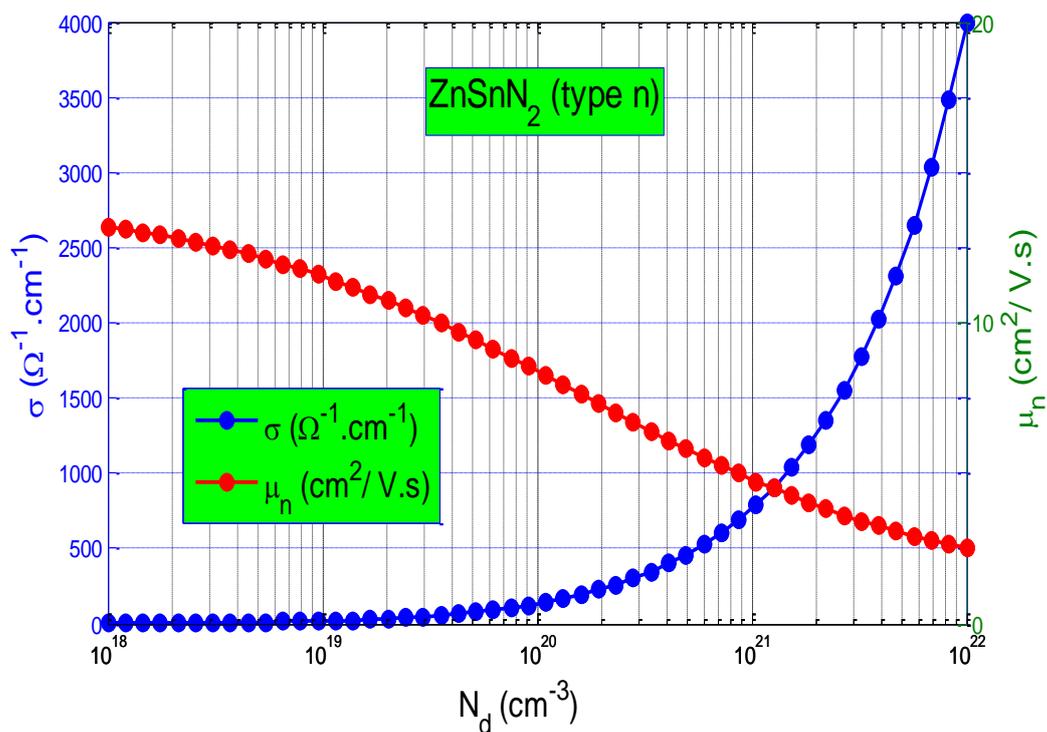


Figure 2.39 La variation de la conductivité électrique et de la mobilité pour un type n de ZnSnN₂ en fonction de la densité de dopage.

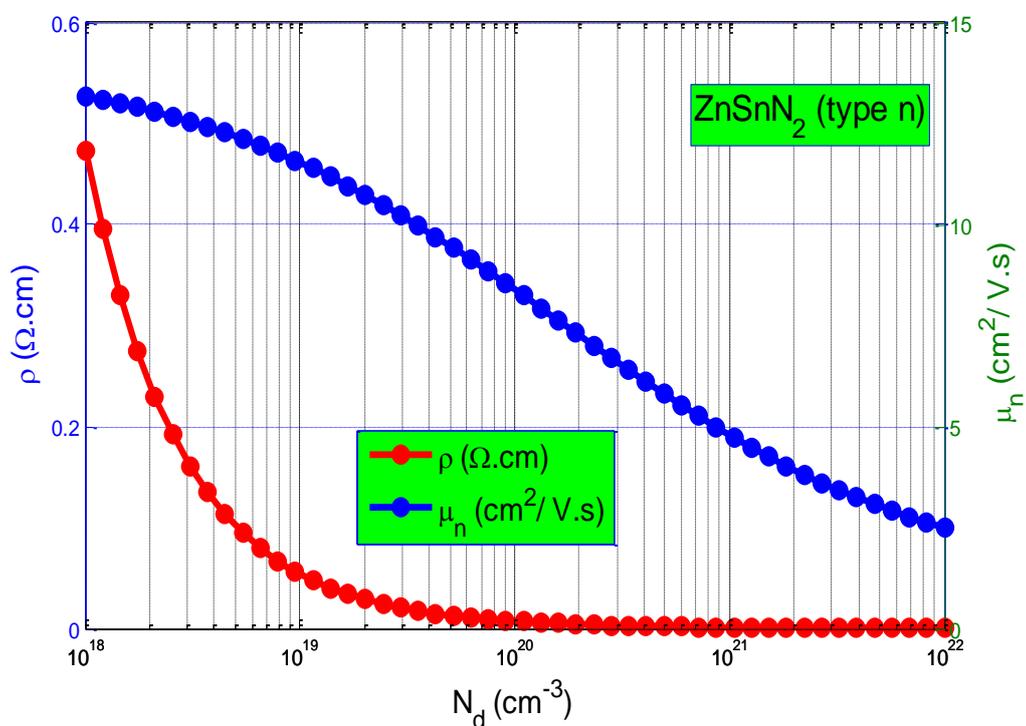


Figure 2.40 La variation de la résistivité électrique et de la mobilité pour un type n de ZnSnN₂ en fonction de la densité de dopage.

2.7.3 Décalage de bandes entre le GaN et l'alliage $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$

Punya et al. [69] ont déterminé théoriquement le décalage de bandes de valence et conduction entre le GaN et les deux matériaux ZnSnN_2 et ZnGeN_2 à l'équilibre.

D'après les travaux de Mélanie Rolles sur les LED à base de matériaux II-IV-V₂ [70] elle a supposé que le décalage de bandes entre le GaN et l'alliage $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$ varie linéairement avec la composition de l'alliage à partir de la loi de Vegard. Le tableau 2.2 et la figure (2.41) montrent le décalage de bandes entre le GaN et l'alliage $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$ en fonction de la composition x.

Tableau 2.2 : Décalage de bandes entre le GaN et l'alliage $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$ en fonction de la composition x.

Concentration d'étain (Sn)	$\Delta E_v (\text{GaN}/\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2)$	$\Delta E_c (\text{GaN}/\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2)$
x=0 [69] ≡ GaN/ZnGeN ₂	1,1	1
x=0.2	1,16	0,74
x=0.4	1,22	0,48
x=0.6	1,28	0,22
x=0.8	1,34	-0,04
x=1 [69] ≡ GaN/ZnSnN ₂	1,4	-0,3

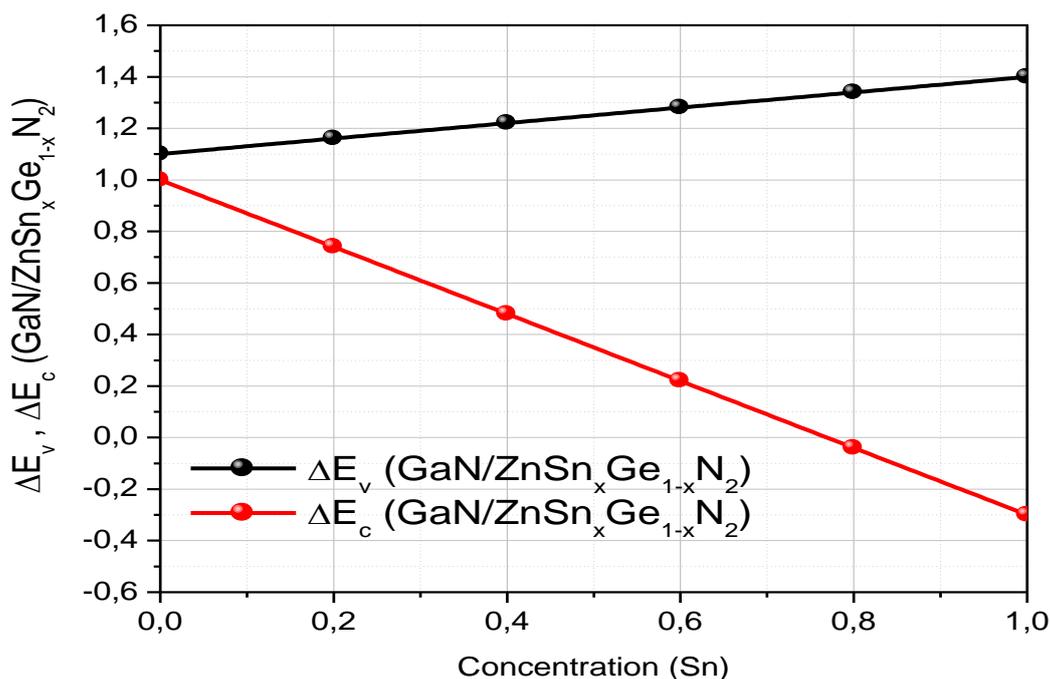


Figure 2.41 Évolution des différents offsets de bandes ($\Delta E_{c,v}$) entre le GaN et l'alliage $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$ en fonction de la composition x (Sn).

D'après le tableau 2.2 et la figure (2.41), nous remarquons que $\Delta E_v > 0$ quel que soit la composition x de l'alliage $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$. Par contre, $\Delta E_c > 0$ pour des compositions inférieures à $x \sim 0.8$ puis devient négatif. Nous avons calculé également l'affinité électronique et la constante diélectrique (ou permittivité relative) de l'alliage $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$ à partir de la loi de Vegard. On note que l'affinité électronique du matériau ZnGeN_2 a été calculée à partir de décalage de la bande de conduction entre le GaN et ZnGeN_2 ($\text{GaN}/\text{ZnGeN}_2$) [69].

On utilise à partir de la loi de Vegard les formules suivantes [71] :

$$\varepsilon_r(\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2) = x \cdot \varepsilon_r(\text{ZnSnN}_2) + (1-x) \cdot \varepsilon_r(\text{ZnGeN}_2) \quad (2.53)$$

avec

$\varepsilon_r(\text{ZnSnN}_2)$ est la permittivité relative du ZnSnN_2 [72].

$\varepsilon_r(\text{ZnGeN}_2)$ est la permittivité relative du ZnGeN_2 [72].

$$\chi(\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2) = x \cdot \chi(\text{ZnSnN}_2) + (1-x) \cdot \chi(\text{ZnGeN}_2) \quad (2.54)$$

avec

$\chi(\text{ZnSnN}_2)$ est l'affinité électronique du ZnSnN_2 [47].

$\chi(\text{ZnGeN}_2)$ est l'affinité électronique du ZnGeN_2 [69].

La figure (2.42) montre la variation de l'affinité électronique de $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$ en fonction de la concentration d'étain. Nous remarquons que l'affinité électronique de l'alliage $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$ diminuent régulièrement avec l'augmentation de la concentration d'étain.

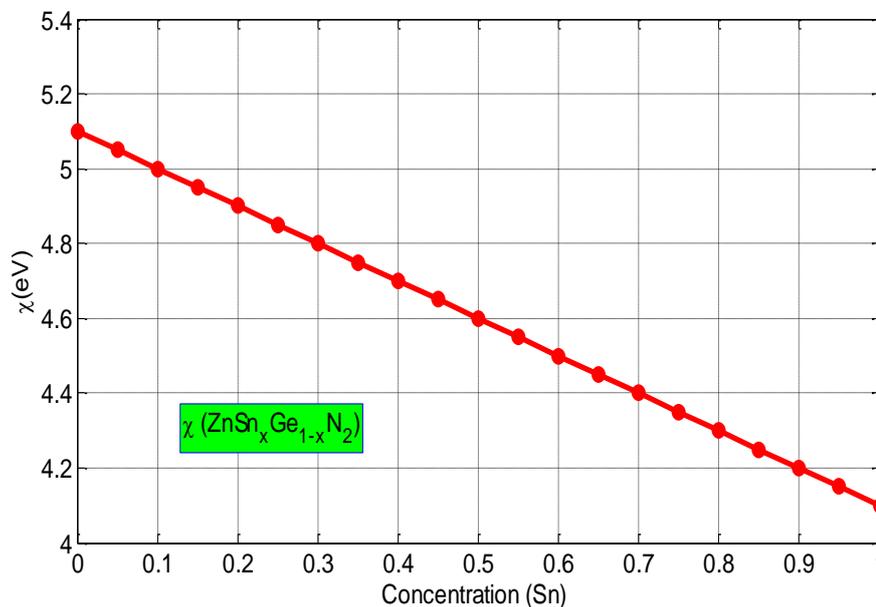


Figure 2.42 Variation de l'affinité électronique de $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$ en fonction de la concentration d'étain.

La figure (2.43) montre la variation de la permittivité relative de $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$ en fonction de la concentration d'étain. Nous remarquons que la permittivité relative de l'alliage $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$ augmentent régulièrement avec l'augmentation de la concentration d'étain.

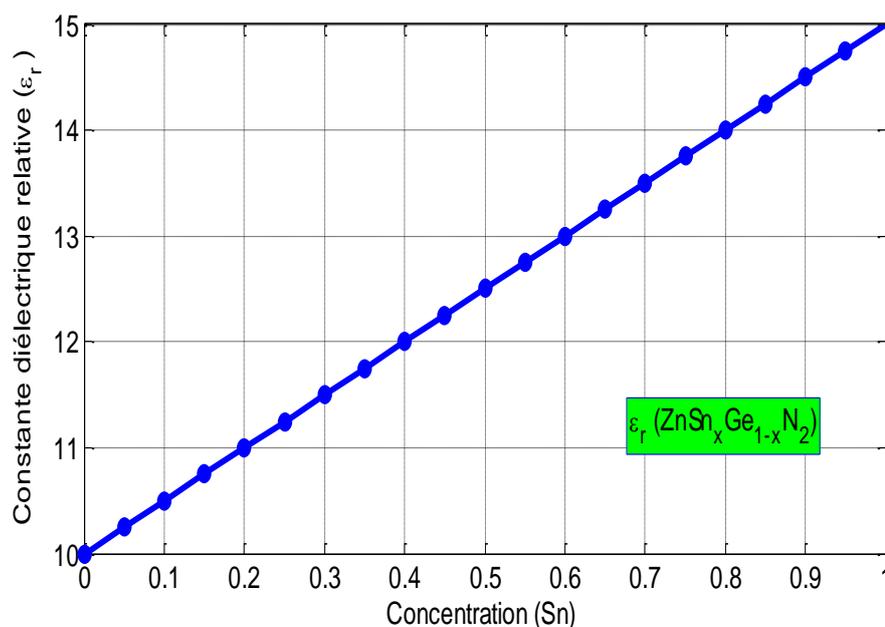


Figure 2.43 Variation de la permittivité relative de $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$ en fonction de la concentration d'étain.

2.7.4 Longueur de diffusion

La longueur de diffusion est définie comme la distance moyenne sur laquelle les porteurs peuvent se déplacer par diffusion (théorie du transport des charges). Elle est définie par [73] :

$$L = \sqrt{D\tau} \quad (2.55)$$

avec

τ est le temps de vie des porteurs [s]

D est le coefficient de diffusion des porteurs, défini par [73] :

$$D = V_t * \mu = \frac{k_B T}{q} * \mu \quad [\text{cm}^2 \cdot \text{S}^{-1}] \quad (2.56)$$

avec

μ est la mobilité de porteurs [$\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{S}^{-1}$]

2.7.5 Pertes par recombinaison

Le taux de recombinaisons radiatives qui correspond comme déjà mentionné dans (1.8) à la recombinaison d'un e^- de la bande de conduction et d'un trou de la bande de valence, avec une émission radiative d'un photon d'énergie ($h\nu$) proche de celle du gap du matériau est donné par l'expression [74]:

$$U_{rad} = B (np - n_i^2) \quad (2.57)$$

avec

n_i est la densité intrinsèque de porteurs .

B est le coefficient qui dépend du matériau.

Le taux de recombinaison Shockley-Read-Hall ou un électron dans un niveau d'énergie intermédiaire E_i , se recombiner avec un trou qui lié à un défaut, son expression est donné par [74] :

$$U_{SRH} = \frac{np - n_i^2}{\tau_p (n + n_1) + \tau_n (p + p_1)} \quad (2.58)$$

avec :
$$p_I = p \cdot e^{\left(\frac{E_t - E_i}{k_B T}\right)} \quad \text{et} \quad n_I = n \cdot e^{\left(\frac{E_t - E_i}{k_B T}\right)}$$

E_i est le niveau de fermi dans les semiconducteurs intrinsèque.

E_t est le niveau d'énergie piège.

τ_n , τ_p sont les durées de vie des porteurs, des électrons et des trous respectivement.

n , p est la densité des électrons et des trous respectivement.

Pour le cas de recombinaison Auger, le taux de recombinaison est donné par [74] :

$$U_{Auger} = (C_{p0} \cdot p - C_{n0} \cdot n) (n \cdot p - n_i^2) \quad (2.59)$$

C_{n0} et C_{p0} sont les coefficients de Auger des électrons et des trous respectivement.

2.8 L'outils de simulation

2.8.1 Présentation du logiciel de simulation SCAPS-1D

Récemment, la modélisation et la simulation des cellules solaires est devenue très utilisée, ainsi, plusieurs logiciels de calcul et de simulation ont été développés par les chercheurs. On peut citer les logiciels SCAPS-1D, SILVACO-TCAD, AFORS-HET, AMPS-1D, WxAMPS, PC-1D, ...etc.

SCAPS (solar cell capacitance simulator) est un logiciel de simulation numérique des cellules solaires unidimensionnelles en couches minces [75]. Il a été développé à l'université de Gent en Belgique par Marc Burgelman et al. [76] Logiciel SCAPS-1D est disponible gratuitement pour les chercheurs, ainsi qu'il fonctionne sur PC d'une manière simple et performante. SCAPS est originellement développé pour les structures de cellules de famille CuInSe_2 (II-III-VI₂) et CdTe (II-VI). Cependant, le logiciel est devenu applicable pour les cellules solaires cristallines (comme le Si « IV » et le GaAs « III-V »), ainsi que les cellules solaires amorphes (a-Si) [77]. Les méthodes de calcul qui peuvent être spécifiées peuvent résoudre les équations de base des semiconducteurs incluent des méthodes numériques telles que celles de Gummel et de Newton [78]. Dans la première partie, nous avons utilisé SCAPS-1D pour simuler et modéliser des cellules solaires à couches minces basées sur de nouveaux matériaux.

2.8.1.1 Principe de la simulation numérique

Dans les dispositifs à semiconducteurs, SCPAS est basée sur la résolution simultanée de l'équation de Poisson et de l'équation de continuité [47]. Il calcule à chaque instant et en tout point de l'espace en une suite d'éléments finis, la concentration des électrons et des trous et la valeur du potentiel électrostatique. L'équation de Poisson définit la relation entre le potentiel et la densité des porteurs comme suit : [79]

$$\Delta V = \frac{-q}{\varepsilon} (N_d - N_a + p - n) \quad (2.60)$$

avec

ε est la constante diélectrique.

V est le potentiel électrostatique.

N_d et N_a sont les concentrations des dopants donneurs et accepteurs ionisées.

n et p sont les densités des porteurs pour respectivement les électrons et les trous.

L'évolution temporelle des densités de porteurs (au cours du temps) obéit aux équations de continuité (2.61) et (2.62) pour respectivement les électrons et les trous comme suit : [80]

$$\frac{dn}{dt} = G - U_n + \frac{1}{e} \operatorname{div} \vec{J}_n \quad (2.61)$$

$$\frac{dp}{dt} = G - U_p + \frac{1}{e} \operatorname{div} \vec{J}_p \quad (2.62)$$

où : G et $U_{n,p}$ sont respectivement les taux de génération et de recombinaison des porteurs, \vec{J}_n et \vec{J}_p sont respectivement les densités de courant des électrons et des trous. Les dérivations basées sur la théorie de transport de Boltzmann ont prouvé que la densité des courants dans les équations de continuité peut être définie par le modèle dérive-diffusion. Les densités de courants sont exprimées en deux termes. Le premier (1) correspond à la dérive des charges par le champ électrique et le second (2) correspond à la diffusion des porteurs qui est sensible à la température comme suit : [80]

$$\vec{J}_n = \underbrace{qnU_n \vec{E}}_{(1)} + \underbrace{qD_n \overrightarrow{\operatorname{grad}} n}_{(2)} \quad (2.63)$$

$$\vec{J}_p = q_p U_p \vec{E} + q D_p \overrightarrow{\text{grad}} p \quad (2.64)$$

où : D_n et D_p sont respectivement les coefficients de diffusion des électrons et des trous.

2.8.2 Présentation du logiciel de simulation SILVACO-TCAD

En deuxième partie, nous avons utilisé SILVACO-TCAD comme un outil de simulation et modélisation d'une cellule solaire pour l'optimisation de ses caractéristiques physiques. SILVACO-TCAD (**T**echnology **C**omputer **A**ided **D**esign) est un logiciel développé par SILVACO, Inc [13,81]. Il est puissant par rapport à d'autres logiciels pour les cas de conception et de simulation de dispositifs optoélectroniques. Il contient un simulateur de processus ATHENA, ce qui concerne la croissance et gravure de matériaux "Growth & Etching" [82] et un simulateur de dispositifs ATLAS, éditeur de la structure et maillage [83]. Tous ces composants sont organisés ensemble à travers l'interface graphique de SILVACO-TCAD (figure 2.44). A partir de la figure (2.44), on voit clairement que le simulateur ATLAS est le cœur de composants de SILVACO-TCAD. ATLAS est un simulateur physique 2D ou 3D des dispositifs basés sur la physique de semiconducteurs. Il peut simuler plusieurs caractéristiques des dispositifs semiconducteurs comme les caractéristiques optoélectroniques et thermiques [84]. SILVACO-TCAD offre un grand nombre de modèles physiques à utiliser dans la simulation. Les simulations faites par ATLAS utilisent deux types de fichiers d'entrées qui sont le fichier de commande et le fichier de structure comme le montre la figure (2.44). Le premier fichier est un fichier script effectué par le Deckbuild et il contient des commandes pour qu'ATLAS s'exécute. Le deuxième fichier définit la structure de dispositif à simuler. Concernant les fichiers de sorties de ATLAS, on peut trouver trois fichiers de sorties principales. Le premier est le fichier Runtime qui fournit la progression, et les erreurs d'avertissements durant la simulation. Le deuxième est le fichier LOG (File.log) qui enregistre toutes les caractéristiques calculées par ATLAS : courant, puissance, tension, fréquence, et le temps. Le dernier est le fichier solution qui stocke les données 2D ou 3D concernant les valeurs des variables solutions dans le dispositif en un point donné. Ces trois fichiers de sortie sont traités par l'outil de visualisation Tonyplot. Les principaux groupes de commandes d'ATLAS sont exprimés dans la figure (2.45). L'ordre de ces commandes doit être respecté sinon un message d'erreur apparaîtra lors la simulation.

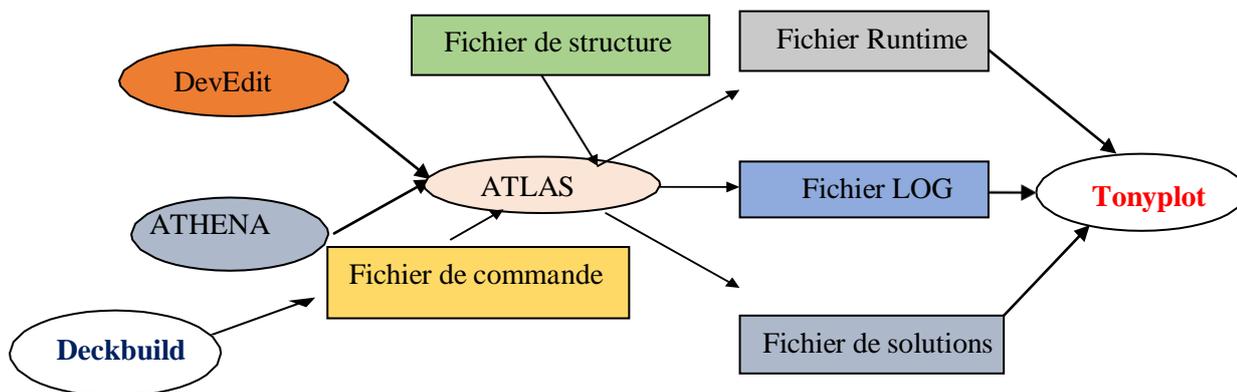


Figure 2.44 Diagramme de SILVACO-TCAD et les entrées-sorties d'ATLAS [13,81].

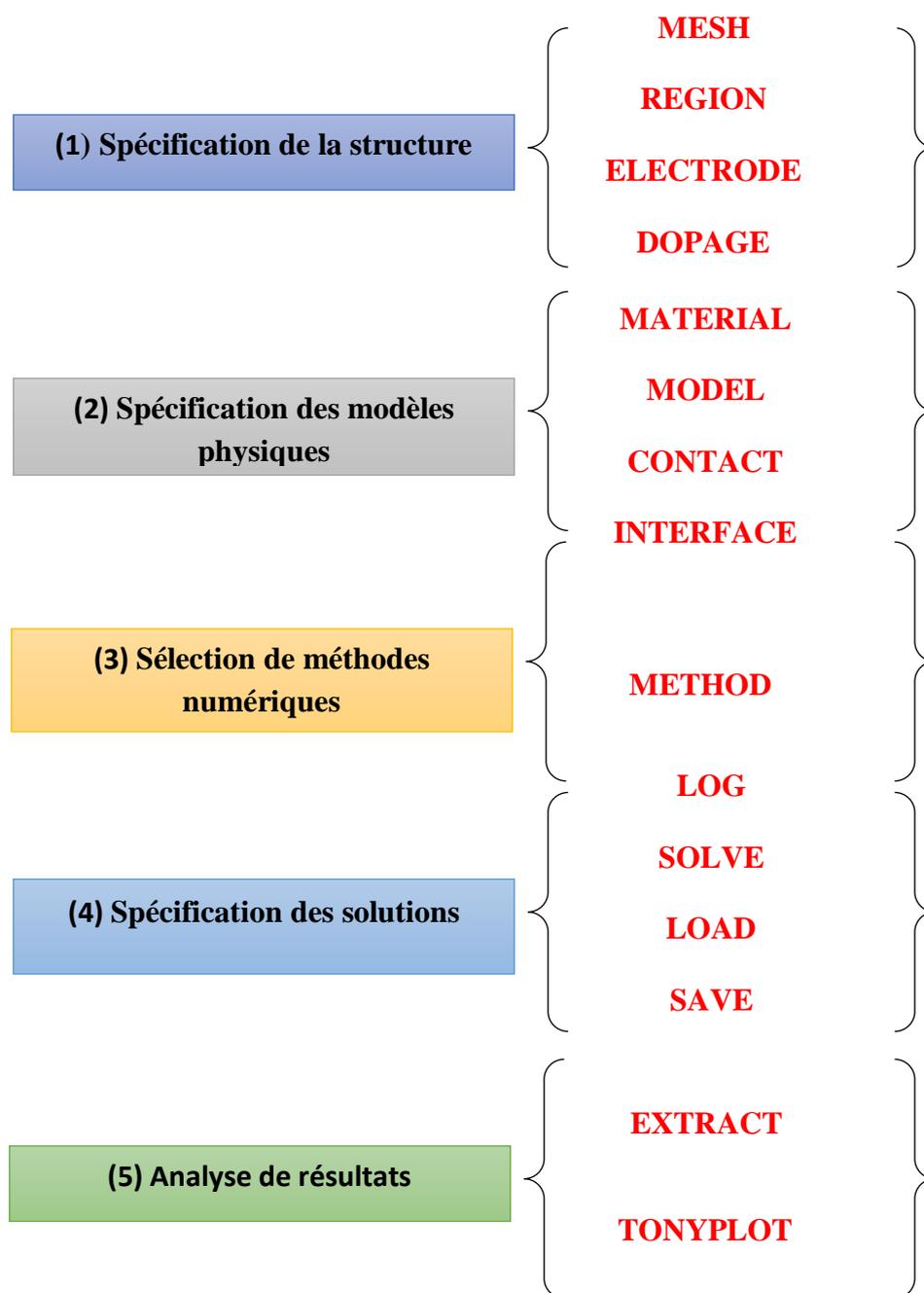


Figure 2.45 Commandes du simulateur ATLAS (SILVACO-TCAD) [13,81].

a. Spécification de la structure :

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

MESH (maillage) : consiste à diviser la structure à simuler en petites cellules 2D ou 3D pour pouvoir résoudre les équations fondamentales de dispositifs semiconducteurs numériquement (par exemple les méthodes suivantes : différences finies, éléments finis et volumes finis). Un grand maillage provoque une simulation rapide (moins du temps d'exécution) mais des résultats moins précis.

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

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

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

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

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

MATERIAL : il définit tous les paramètres de matériaux nécessaires (énergie du gap « E_g », coefficient d'absorption « α », l'affinité de l'électron « χ », la permittivité « ϵ » ...etc.).

MODELS : ils indiquent les inclusions de différents mécanismes physiques (recombinaisons, mobilités, etc...). Le choix du modèle physique dépend de type de matériau. Dans ce travail de recherche nous sommes intéressés en deuxième partie à l'étude des puits quantiques pour le photovoltaïque, pour cela ATLAS utilise des modèles physiques qui décrivent les effets quantiques dans les semiconducteurs nanostructures (effet de confinement quantique), les commandes de ces modèles sont : QWELL qui permet de résoudre l'équation de Schrödinger dans une direction de confinement 1D, ce qui veut dire qu'on a un puits quantique (PQ) et la commande 2DXY.SCHRO qui permet de résoudre l'équation de Schrödinger dans deux directions 2D. Si on utilise ces deux commandes à la fois dans MODELS, cela va permettre de résoudre l'équation de Schrödinger dans les trois directions de confinement 3D par ATLAS et par cette méthode on peut simuler une boîte quantique (BQ).

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

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

c. Sélection des méthodes numériques :

ATLAS utilise deux méthodes numériques qui sont la méthode de Newton et la méthode de Gummel comme logiciel SCAPS-1D. La méthode de Newton correspond à la résolution itérative d'un système regroupant les trois équations différentielles régissant le fonctionnement de la structure. La méthode de Gummel consiste à découpler en trois sous-systèmes le système global décrit précédemment : les trois équations sont résolues itérativement les unes après les autres jusqu'à atteindre la convergence globale des solutions. L'intérêt potentiel de cet algorithme par rapport à celui de Newton réside dans la réduction des dimensions des systèmes matriciels à résoudre, ce qui permet a priori de diminuer le temps de calcul.

d. Spécification des solutions :

LOG : permet à toutes les caractéristiques finales de simulation (par exemple : courbe I(V) et P(V)) stockés dans un fichier d'extension « .log ».

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

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

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

e. Analyse des résultats :

Après l'obtention des résultats de la simulation (output data) par les étapes précédentes, des valeurs numériques de paramètres spécifiés des fichiers de la structure ou de LOG peuvent être extraire par la commande « EXTRACT » ou bien tracer sous forme de graphes par la commande « TONYPLOT ou TONYPLOT 3D ». Il existe une autre commande importante utilisée dans le cas où on veut simuler des comme les cellules solaires (les photodétecteurs) qui s'appelle BEAM. BEAM représente un signal d'entré optique ou un faisceau lumineux (spectre

solaire « AM » dans le cas de cellules solaires par exemple mono ou multispectral). Cette commande est **commencée** en utilisant la commande SOLVE.

2.9 Conclusion

Nous avons rappelé dans ce chapitre quelques propriétés optiques, mécaniques et électroniques de l'alliage $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$. Dans ce travail a été basé sur les lois d'interpolation linéaire et quadratique comme la loi de Vegard afin d'obtenir les paramètres physiques de l'alliage $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$.

D'après les résultats de l'épaisseur critique, on peut conclure que la meilleure zone de travail pour l'alliage $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$ épitaxie sur un substrat de GaN est pour x compris entre 0% et 30% (correspond à $\varepsilon \sim 2\%$), et pour l'alliage $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$ épitaxie sur un substrat de $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ est pour $y=0.1+1.7x$ (correspond à $\varepsilon = 0$).

2.10 Références

- [1] Paul-Alain ROLLAND. (2004). 08- ÉLECTRONIQUE, SEMICONDUCTEURS–PHOTONIQUE, GÉNIE ÉLECTRIQUE. cnrs.fr. <https://www.cnrs.fr/comitenational/doc/rapport/2004/rapport/sections/0239-0266-Chap08.pdf>.
- [2] Byun, S. H. (2017). Chapter 7 Semiconductor Detectors. Radioisotopes and Radiation Methodology. https://www.science.mcmaster.ca/radgrad/images/6R06CourseResources/4RA34RB3_Lecture_Note_7_Semiconductor_Detectors.pdf.
- [3] SOUICI, A. (2013). Physique des Semi-conducteurs. 72.
- [4] Tremblay, R. (2018). Propriétés structurales, optiques et électriques de nanostructures et alliages à base de GaP pour la photonique intégrée sur silicium [Phdthesis, INSA de Rennes]. <https://hal.archives-ouvertes.fr/tel-02100960>.
- [5] Salame, B. (2015). Mesure de charges dans les matériaux semi-conducteurs et les métaux avec une méthode élasto-électrique (Numéro 2015PA066160) [Theses, Université Pierre et Marie Curie - Paris VI]. <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-01206491>.
- [6] Fath Allah, A. (2015). Regroupement de techniques de caractérisation de matériaux destinés à l'énergie solaire pour optimisation et mesures industrielles [These de doctorat, Paris 11]. <http://www.theses.fr/2015PA112139>.
- [7] Gorge, V. (2012). Caractérisations de matériaux et tests de composants des cellules solaires à base des nitrures des éléments III-V [Phdthesis, Université Paris Sud - Paris XI]. <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00707717>.
- [8] Sato, H., Muraba, Y., Iimura, S., Hiramatsu, H., Tanaka, I., ... Oba, F. (2016). Discovery of earth-abundant nitride semiconductors by computational screening and high-pressure synthesis. *Nature Communications*, 7(1), 11962. <https://doi.org/10.1038/ncomms11962>.
- [9] DEHIMI, S. (2018). Etude et Simulation des propriétés optoélectroniques des lasers à puits quantiques [Doctoral, UNIVERSITE Mohamed Khider Biskra]. <http://thesis.univ-biskra.dz/3824/>.
- [10] Adachi, S. (2017). III-V Ternary and Quaternary Compounds. In S. Kasap & P. Capper (Éds.), *Springer Handbook of Electronic and Photonic Materials* (p. 1-1). Springer International Publishing. https://doi.org/10.1007/978-3-319-48933-9_30.
- [11] Neudeck, P. G., Okojie, R. S., & Chen, L.-Y. (2002). High-temperature electronics—A role for wide bandgap semiconductors? *Proceedings of the IEEE*, 90(6), 1065-1076. <https://doi.org/10.1109/JPROC.2002.1021571>.
- [12] Cheewajaroen, K., Saengkaew, P., Sanorpim, S., Yordsri, V., Thanachayanont, C., Nuntawong, N., & Rathanasakulthong, W. (2018). Characterization of N-type and P-type Aluminum Antimonides on Si substrates for room-temperature optoelectronic devices. *Materials Science in Semiconductor Processing*, 88, 224-233. <https://doi.org/10.1016/j.mssp.2018.08.007>.

- [13] Benyettou, F. (2018). Modélisation et simulation des structures à PQs, et NFs pour la conversion photovoltaïque [Thesis, univ-blida1]. <http://di.univ-blida.dz:8080/jspui/handle/123456789/8854>.
- [14] Sébenne, C. (1963). Propriétés optiques des semiconducteurs dégénérés. *Journal de Physique*, 24(3), 216-220. <https://doi.org/10.1051/jphys:01963002403021600>.
- [15] Veirman, J. (2011). Effets de la compensation du dopage sur les propriétés électriques du silicium et sur les performances photovoltaïques des cellules à base de silicium solaire purifié par voie métallurgique [Phdthesis, INSA de Lyon]. <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00701561>.
- [16] Marty, A., Bailbe, J. P., & Rey, G. (1982). Modèle analytique compact d'une hétérojonction isotype GaAlAs/GaAs. *Revue de Physique Appliquée*, 17(8), 453-464. <https://doi.org/10.1051/rphysap:01982001708045300>.
- [17] Bellil, W. (2020). Simulation et optimisation des structures à base de nouveaux matériaux pour améliorer le rendement des cellules solaires [Thesis, univ-blida1]. <http://di.univ-blida.dz:8080/jspui/handle/123456789/8740>.
- [18] Poole, C., & Darwazeh, I. (2016). Chapter 11—Microwave semiconductor materials and diodes. In C. Poole & I. Darwazeh (Éds.), *Microwave Active Circuit Analysis and Design* (p. 355-393). Academic Press. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-407823-9.00011-1>.
- [19] Khorasani, S. (2016b). Abrupt PN junctions : Analytical solutions under equilibrium and non-equilibrium. *Solid-State Electronics*, 122, 37-44. <https://doi.org/10.1016/j.sse.2016.05.003>.
- [20] Mathieu, H., & Fanet, H. (2009). *Physique des semiconducteurs et des composants électroniques - 6ème édition : Cours et exercices* (DUNOD edition). DUNOD.
- [21] Lijadi, M. (2005). Transistors bipolaires à hétérojonction : Développement d'une filière InP/GaAsSb pour application ultra-rapides [Phdthesis, Université Pierre et Marie Curie - Paris VI]. <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00010627>.
- [22] Arca, E., Fioretti, A., Lany, S., Tamboli, A. C., Teeter, G., Melamed, C., Pan, J., Wood, K. N., Toberer, E., & Zakutayev, A. (2018). Band Edge Positions and Their Impact on the Simulated Device Performance of ZnSnN₂-Based Solar Cells. *IEEE Journal of Photovoltaics*, 8(1), 110-117. <https://doi.org/10.1109/JPHOTOV.2017.2766522>.
- [23] Franzò, G., Coffa, S., Priolo, F., & Spinella, C. (1997). Mechanism and performance of forward and reverse bias electroluminescence at 1.54 μm from Er-doped Si diodes. *Journal of Applied Physics*, 81(6), 2784-2793. <https://doi.org/10.1063/1.363935>.
- [24] Hui, R. (2020). Chapter 4—Photodetectors. In R. Hui (Éd.), *Introduction to Fiber-Optic Communications* (p. 125-154). Academic Press. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-805345-4.00004-4>.
- [25] Agulló-López, F., Cabrera, J. M., & Agulló-Rueda, F. (1994). Chapter Nine—Semiconductor Quantum Wells and Superlattices. In F. Agulló-López, J. M. Cabrera, & F. Agulló-Rueda (Éds.), *Electrooptics* (p. 251-278). Academic Press. <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-091632-3.50013-9>.

- [26] Anderson, R. L. (1962). Experiments on Ge-GaAs heterojunctions. *Solid-State Electronics*, 5(5), 341-351. [https://doi.org/10.1016/0038-1101\(62\)90115-6](https://doi.org/10.1016/0038-1101(62)90115-6).
- [27] Barakel, D., Escoubas, L., Flory, F., Le Rouzo, J., Ottaviani, L., Duche, D., Palais, O., Pasquinelli, M., Périchaud, I., Simon, J., & Torchio, P. (2018). CARACTERISATIONS DES MATERIAUX ET DES DISPOSITIFS POUR LE PHOTOVOLTAIQUE [Doctoral]. <https://hal-amu.archives-ouvertes.fr/cel-01798813>.
- [28] Bestam, R., Aissat, A., & Vilcot, J. P. (2016). High efficiency quadruple junction solar cells. *Superlattices and Microstructures*, 91, 22-30. <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2015.12.038>.
- [29] Benmir, A., & Aida, M. S. (2015). Simulation d'une cellule solaire en couche mince à base de Cuivre-Zinc-Étain Sulfure/Sélénure $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S},\text{Se})_4$. *Annals of Science and Technology*, 7(1), 12-12. <https://doi.org/10.12816/0040256>.
- [30] Bonn, F. J., Rochon, G., & UREF. (1992). Précis de télédétection. Volume 1, Volume 1., Presses de l'Université du Québec.
- [31] Julien, V. (2011). Propriétés optiques effectives de films composites de polymère et de nanoparticules d'or [Phdthesis, Université Sciences et Technologies - Bordeaux I]. <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00676817>.
- [32] Wonglakorn, P., & Bualert, S. (2013). Solar Spectrum Forcing Due to Soil Particle Concentration. *International Journal of Environmental Science and Development*, 116-118. <https://doi.org/10.7763/IJESD.2013.V4.317>.
- [33] De Caro, C., & Claudia, H. (2015a). UV/VIS Spectrophotometry—Fundamentals and Applications. http://lcwu.edu.pk/ocd/cfiles/Chemistry/MSc/Chem-C-410/Fundamentals_UV_VIS.pdf.
- [34] Rouard, P., Malé, D., & Trompette, J. (1953). Détermination des facteurs de réflexion, de transmission et d'absorption de lames minces d'or obtenues par évaporation. *J. Phys. Radium*, 14(11), 587-590. <https://doi.org/10.1051/jphysrad:019530014011058701>.
- [35] Evans, A., & Dennison, J. R. (2012). The Effects of Surface Modification on Spacecraft Charging Parameters. *IEEE Transactions on Plasma Science*, 40(2), 305-310. <https://doi.org/10.1109/TPS.2011.2179676>.
- [36] Abid, I. (2017). Plasmonique hybride : Propriétés optiques de nanostructures Au-TMD, couplage plasmon-exciton [Phdthesis, Université Paul Sabatier - Toulouse III]. <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-01996786>.
- [37] Maertens, A. (2016). Etude de la réalisation d'une structure transistor (FET) pour l'observation de l'exciton du ZnO sous champ électrique. [Phdthesis, CentraleSupélec]. <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-01668544>.
- [38] Starke, R., & Schober, G. A. H. (2017). Microscopic Theory of the Refractive Index. *Optik*, 140, 62-85. <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2017.03.088>.

- [39] École Professionnelle de Lausanne. (s. d.). Les matériaux magnétiques. <https://www.epsic.ch/branches/electrotechnique/theorie/matmag/210.html>.
- [40] Et-taya, L., Ouslimane, T., & Benami, A. (2020). Numerical analysis of earth-abundant $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S}_x\text{Se}_{1-x})_4$ solar cells based on Spectroscopic Ellipsometry results by using SCAPS-1D. *Solar Energy*, 201, 827-835. <https://doi.org/10.1016/j.solener.2020.03.070>.
- [41] A, M., & A.r, N. (2000). CALCUL DE LA CONSTANTE DIELECTRIQUE DU MANGANESE Mn ET DE L'ALLIAGE $\text{Al}_{88}\text{Mn}_{12}$ A PARTIR DES MESURES PHOTOMETRIQUES DE LA REFLECTANCE ET DE LA TRANSMITTANCE. *Sciences & Technologie*, 13, 47-52.
- [42] Deng, F., Cao, H., Liang, L., Li, J., Gao, J., Zhang, H., Qin, R., & Liu, C. (2015). Determination of the basic optical parameters of ZnSnN_2 . *Optics Letters*, 40(7), 1282 - 1285. <https://doi.org/10.1364/OL.40.001282>.
- [43] Misaki, Takao, Wakahara, A., Okada, H., & Yoshida, A. (2003). Optical properties of ZnGeN_2 epitaxial layer. *Physica Status Solidi (c)*, n/a(7), 2890-2893. <https://doi.org/10.1002/pssc.200303348>.
- [44] Wypych, G. (Éd.). (2015). 2—PHOTOPHYSICS. In *Handbook of UV Degradation and Stabilization (Second Edition)* (p. 9-35). ChemTec Publishing. <https://doi.org/10.1016/B978-1-895198-86-7.50004-8>.
- [45] Atkinson, G. A., & Hancock, E. R. (2006). Recovery of surface orientation from diffuse polarization. *IEEE Transactions on Image Processing*, 15(6), 1653-1664. <https://doi.org/10.1109/TIP.2006.871114>.
- [46] Ghione, G. (2009). *Semiconductor Devices for High-Speed Optoelectronics*. Cambridge University Press. <https://doi.org/10.1017/CBO9780511635595>.
- [47] Laidouci, A., Aissat, A., & Vilcot, J. P. (2020). Numerical study of solar cells based on ZnSnN_2 structure. *Solar Energy*, 211, 237-243. <https://doi.org/10.1016/j.solener.2020.09.025>.
- [48] Gonzalez-Cuevas, J. A., Refaat, T. F., Abedin, M. N., & Elsayed-Ali, H. E. (2007). Calculations of the temperature and alloy composition effects on the optical properties of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$ and $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$ in the spectral range 0.5–6 eV. *Journal of Applied Physics*, 102(1), 014504. <https://doi.org/10.1063/1.2751406>.
- [49] Fioretti, A. N., Pan, J., Ortiz, B. R., Melamed, C. L., Dippo, P. C., Schelhas, L. T., Perkins, J. D., Kuciauskas, D., Lany, S., Zakutayev, A., Toberer, E. S., & Tamboli, A. C. (2018). Exciton photoluminescence and benign defect complex formation in zinc tin nitride. *Materials Horizons*, 5(5), 823-830. <https://doi.org/10.1039/C8MH00415C>.
- [50] Misaki, T., Tsuchiya, K., Sakai, D., Wakahara, A., Okada, H., & Yoshida, A. (2003). Growth and Characterization of ZnGeN_2 by Using Remote-Plasma Enhanced Metalorganic Vapor Phase Epitaxy. *Physica Status Solidi (c)*, n/a(1), 188-191. <https://doi.org/10.1002/pssc.200390019>.

- [51] AL Hamade, H. T. B., Sabbar, A. N., & Tuhaiwer, A. Sh. (2020). Temperature effect on electronics properties for alloys $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$ and InP and mole fraction of gallium for alloy $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$. *AIP Conference Proceedings*, 2213(1), 020010. <https://doi.org/10.1063/5.0000114>.
- [52] Aissat, A., El bey, M., Bestam, R., & Vilcot, J. P. (2014). Modeling and simulation of $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}/\text{InP}$ quaternary structure for photovoltaic. *International Journal of Hydrogen Energy*, 39(27), 15287-15291. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2014.04.162>.
- [53] Narang, P., Chen, S., Coronel, N. C., Gul, S., Yano, J., Wang, L.-W., Lewis, N. S., & Atwater, H. A. (2014). Bandgap Tunability in $\text{Zn}(\text{Sn},\text{Ge})\text{N}_2$ Semiconductor Alloys. *Advanced Materials*, 26(8), 1235-1241. <https://doi.org/10.1002/adma.201304473>.
- [54] Beddelem, N., Bruyère, S., Cleymand, F., Diliberto, S., Longeaud, C., Gall, S. le, Templier, R., Miska, P., & Hyot, B. (2020). Structural and functional properties of $\text{Zn}(\text{Ge},\text{Sn})\text{N}_2$ thin films deposited by reactive sputtering. *Thin Solid Films*, 709, 138192. <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2020.138192>.
- [55] Mohamad, R., Béré, A., Chen, J., & Ruterana, P. (2017). Investigation of strain effects on phase diagrams in the ternary nitride alloys (InAlN , AlGaN , InGaN). *Physica Status Solidi (a)*, 214(9), 1600752. <https://doi.org/10.1002/pssa.201600752>.
- [56] Aissat, A., & Vilcot, J. P. (2020). Development of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ axial multiple quantum well nanowire for solar cell applications. *Optik*, 207, 163844. <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2019.163844>.
- [57] Köksal, K., Gönül, B., & Oduncuoğlu, M. (2009). Critical layer thickness of $\text{GaIn}(\text{N})\text{As}(\text{Sb})$ QWs on GaAs and InP substrates for (001) and (111) orientations. *The European Physical Journal B*, 69(2), 211-218. <https://doi.org/10.1140/epjb/e2009-00151-2>.
- [58] Bestam, Rachid. (2011). Modelisation et simulation d'une structure a base de semiconducteur III_V pour le photovoltaïque [Thesis, البليدة]. <http://di.univ-blida.dz:8080/jspui/handle/123456789/6790>.
- [59] Hossain, Md. A., Islam, Md. R., Hossain, M. K., Hashimoto, A., & Yamamoto, A. (2013). Dislocation reduction in heteroepitaxial $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ using step-graded interlayer for future solar cells. *Materials for Renewable and Sustainable Energy*, 3(1), 20. <https://doi.org/10.1007/s40243-013-0020-3>.
- [60] Morales, F. M., González, D., Lozano, J. G., García, R., Hauguth-Frank, S., Lebedev, V., Cimalla, V., & Ambacher, O. (2009). Determination of the composition of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ from strain measurements. *Acta Materialia*, 57(19), 5681-5692. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2009.07.063>.
- [61] Bernard Gil. (2013). III-Nitride Semiconductors and their Modern Devices. In *III-Nitride Semiconductors and their Modern Devices*. Oxford University Press. <https://oxford.universitypressscholarship.com/view/10.1093/acprof:oso/9780199681723.001.0001/acprof9780199681723>.
- [62] Beddelem, N. (2019). Croissance et caractérisation de nitrures ZnGeN_2 pour applications optoélectroniques [Phdthesis, Université de Lorraine]. <https://hal.univ-lorraine.fr/tel-02141628>.

- [63] Wu, J., Walukiewicz, W., Yu, K. M., Ager, J. W., Haller, E. E., Lu, H., & Schaff, W. J. (2002). Small band gap bowing in $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}$ alloys. *Applied Physics Letters*, 80(25), 4741-4743. <https://doi.org/10.1063/1.1489481>.
- [64] Caughey, D. M., & Thomas, R. E. (1967). Carrier mobilities in silicon empirically related to doping and field. *Proceedings of the IEEE*, 55(12), 2192-2193. <https://doi.org/10.1109/PROC.1967.6123>.
- [65] Sotoodeh, M., Khalid, A. H., & Rezazadeh, A. A. (2000). Empirical low-field mobility model for III-V compounds applicable in device simulation codes. *Journal of Applied Physics*, 87(6), 2890-2900. <https://doi.org/10.1063/1.372274>.
- [66] ADACHI, S. (2015). *Earth-Abundant Materials for Solar Cells: Cu₂-II-IV-VI₄ Semiconductors* | Wiley. Wiley.Com.[https://www.wiley.com/enus/Earth+Abundant+Materials+for+Solar+Cells%3A+Cu₂+II+IV+VI₄+Semiconductors+-p-9781119052777](https://www.wiley.com/enus/Earth+Abundant+Materials+for+Solar+Cells%3A+Cu2+II+IV+VI4+Semiconductors+-p-9781119052777).
- [67] Alnjiman, F., Diliberto, S., Ghanbaja, J., Haye, E., Kassavetis, S., Patsalas, P., Gendarme, C., Bruyère, S., Cleymand, F., Miska, P., Boulet, P., & Pierson, J. F. (2018). Chemical environment and functional properties of highly crystalline ZnSnN_2 thin films deposited by reactive sputtering at room temperature. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 182, 30-36. <https://doi.org/10.1016/j.solmat.2018.02.037>.
- [68] Chinnakutti, K. kumar, Panneerselvam, V., & Thankaraj Salammal, S. (2021). Ba-acceptor doping in ZnSnN_2 by reactive RF magnetron sputtering: (002) faceted Ba- ZnSnN_2 films. *Journal of Alloys and Compounds*, 855, 157380. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2020.157380>.
- [69] Jaroenjittichai, A. P., Lyu, S., & Lambrecht, W. R. L. (2017). Erratum: Band offsets between ZnGeN_2 , GaN, ZnO, and ZnSnN_2 and their potential impact for solar cells [*Phys. Rev. B* 88, 075302 (2013)]. *Physical Review B*, 96(7), 079907. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.96.079907>.
- [70] Rolles, M. (2018). *Étude théorique de la faisabilité des LED à base de ZnGeN_2* [Phdthesis, Université de Lorraine]. <https://hal.univ-lorraine.fr/tel-02079773>.
- [71] Mezrag, F., Aouina, N. Y., & Bouarissa, N. (2006). Optoelectronic and dielectric properties of $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ ternary alloys. *Journal of Materials Science*, 41(16), 5323-5328. <https://doi.org/10.1007/s10853-006-0314-2>.
- [72] Paudel, T. R., & Lambrecht, W. R. L. (2008). First-principles study of phonons and related ground-state properties and spectra in Zn-IV-N_2 compounds. *Physical Review B*, 78(11), 115204. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.78.115204>.
- [73] Veal, T. D., Scanlon, D. O., Kostecki, R., & Arca, E. (2021). Accelerating the development of new solar absorbers by photoemission characterization coupled with density functional theory. *Journal of Physics: Energy*, 3(3), 032001. <https://doi.org/10.1088/2515-7655/abebc9>.

[74] Arbouz, H. (2019). Simulation des structures photovoltaïques à base des matériaux absorbants CIGS et CZTS [Thèse, univ-blida1]. <http://di.univ-blida.dz:8080/jspui/handle/123456789/9083>.

[75] Burgelman, M., Verschraegen, J., Minnaert, B., & Marlein, J. (2007). Numerical simulation of thin film solar cells : Practical exercises with SCAPS. Proceedings of NUMOS (Int. Workshop on Numerical Modelling of Thin Film Solar Cells, Gent (B), Gent. 2007. <http://hdl.handle.net/1854/LU-417032>.

[76] Burgelman, M., Nollet, P., & Degraeve, S. (2000). Modelling polycrystalline semiconductor solar cells. *Thin Solid Films*, 361-362, 527-532. [https://doi.org/10.1016/S0040-6090\(99\)00825-1](https://doi.org/10.1016/S0040-6090(99)00825-1).

[77] Niemegeers, A., Burgelman, M., Decock, K., Degraeve, S., & Verschraegen, J. (s. d.). Simulation programme SCAPS-1D for thin film solar cells. <https://photovoltaic-software.com/solar-tools/scientific-solar/simulation-programme-scaps-1d-for-thin-film-solar-cells>.

[78] Li, D., Song, L., Chen, Y., & Huang, W. (2020). Modeling Thin Film Solar Cells : From Organic to Perovskite. *Advanced Science*, 7(1), 1901397. <https://doi.org/10.1002/advs.201901397>.

[79] Mostefaoui, M., Mazari, H., Khelifi, S., Bouraiou, A., & Dabou, R. (2015). Simulation of High Efficiency CIGS Solar Cells with SCAPS-1D Software. *Energy Procedia*, 74, 736-744. <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2015.07.809>.

[80] Mouchou, R. T., Jen, T. C., Laseinde, O. T., & Ukoba, K. O. (2021). Numerical simulation and optimization of p-NiO/n-TiO₂ solar cell system using SCAPS. *Materials Today: Proceedings*, 38, 835-841. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.04.880>.

[81] Lysenko, I., Zykov, D., Ishutkin, S., & Meshcheryakov, R. (2016). The use of TCAD in technology simulation for increasing the efficiency of semiconductor manufacturing. *AIP Conference Proceedings*, 1772(1), 060012. <https://doi.org/10.1063/1.4964592>.

[82] Barzdėnas V., & Navickas R. (2012). Microtechnologies. VGTU leidykla „Technika“. <http://dspace.vgtu.lt/handle/1/1379>.

[83] Abdolazadeh Ziabari, A. (2018). Step by step with ATLAS Silvaco. <https://doi.org/10.13140/RG.2.2.19564.46722>.

[84] Lophitis, N., Arvanitopoulos, A., & Antoniou, S. P. and M. (2018). TCAD Device Modelling and Simulation of Wide Bandgap Power Semiconductors. In *Disruptive Wide Bandgap Semiconductors, Related Technologies, and Their Applications*. IntechOpen. <https://doi.org/10.5772/intechopen.76062>.

Chapitre 3 SIMULATIONS DES CELLULES SOLAIRES A BASE DE ZnSnN_2 A L'AIDE DE LOGICIEL SCAPS-1D

3.1.1 Introduction

Dans cette partie de travail, nous nous intéressons à la modélisation et à la simulation des cellules solaires à base de ZnSnN_2 en utilisant SCAPS-1D dans le but de montrer les effets de l'épaisseur de la couche tampon, la couche absorbante, les résistances, la densité de défauts et de la température sur les paramètres caractéristiques de la cellule solaire étudiée. Le but de ce chapitre est d'atteindre les meilleures performances de la cellule solaire à base de nouveau matériau ZnSnN_2 pour l'obtention d'un meilleur rendement et aussi la stabilité de dispositif optoélectronique.

3.1.2 Structure des cellules solaires $\text{CdS}/\text{ZnSnN}_2$

La structure de la cellule solaire ZnSnN_2 est constituée d'une couche absorbante de type p- ZnSnN_2 , l'Aluminium est considéré comme un contact arrière déposé sur un substrat de verre [1], une couche tampon de type n en n-CdS et une couche de fenêtre en n- $\text{ZnO} : \text{Al}$. La cellule est illustrée schématiquement à la figure 3.1.

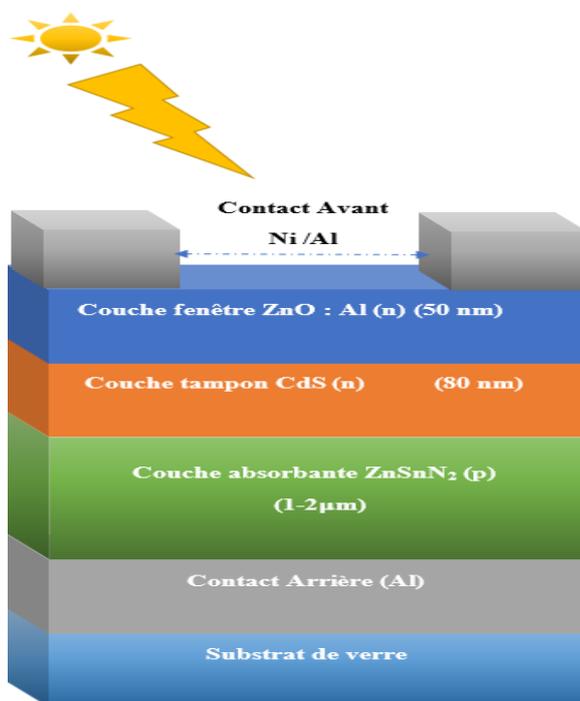


Figure 3.1 Structure de la cellule solaire ZnSnN_2 .

3.1.3 Résultats et discussions

Les paramètres d'entrée utilisés dans la simulation sont indiqués dans le tableau 3.1. Ainsi que dans cette partie de travail, nous avons utilisé les conditions standards, c'est à dire un spectre solaire AM1.5G et une température ambiante ($T=300K$).

Tableau 3.1 : Paramètres physiques utilisés dans la simulation [2-6].

Paramètre d'entrée	Matériaux		
Paramètres	ZnSnN ₂ (p)	CdS (n)	ZnO: Al (n)
ϵ	15	10	9
E_g (eV)	1.5	2.4	3.3
E_a (eV)	4.1	4.2	4.45
N_c (cm ⁻³)	$1.2 \cdot 10^{18}$	$2.2 \cdot 10^{18}$	$2.2 \cdot 10^{18}$
N_v (cm ⁻³)	$7.8 \cdot 10^{19}$	$1.8 \cdot 10^{19}$	$1.8 \cdot 10^{19}$
μ_e (cm ² V ⁻¹ S ⁻¹)	12.68	100	100
μ_h (cm ² V ⁻¹ S ⁻¹)	5.26	25	25
N_d (cm ⁻³)	$2.01 \cdot 10^{20}$	10^{17}	10^{18}
N_a (cm ⁻³)	$1.79 \cdot 10^{21}$	0	0
Epaisseur (nm)	1000-2000	10-80	50

3.1.3.1 Effets de l'épaisseur de l'absorbeur ZnSnN₂ sur la cellule solaire à couches minces

Généralement, dans le cadre des couches minces, l'épaisseur de la couche absorbante souhaitée, allant de 0.1 nm (limite atomique~ 1 Å) à qqes µm. La figure 3.2 montre la réponse spectrale du dispositif en fonction de l'épaisseur de l'absorbeur en ZnSnN₂. Les résultats simulés révèlent l'augmentation significative de l'efficacité quantique externe (EQE) avec l'augmentation de l'épaisseur de l'absorbeur (ZnSnN₂) dans la gamme de 400 nm à 800 nm, ce qui peut s'expliquer par l'augmentation de la collecte des photons aux plus grandes longueurs d'onde. L'absorption de photons à plus grandes longueurs d'onde a entraîné la génération d'un plus grand nombre de porteurs pairs (électron-trou) dans le dispositif.

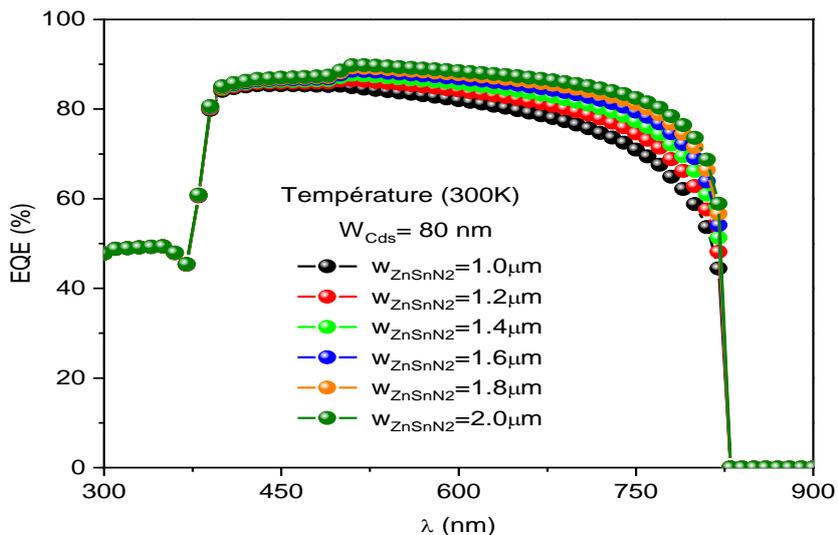


Figure 3.2 Effet de l'épaisseur de ZnSnN_2 sur le rendement quantique [6].

Sur la figure 3.3 (a et b), à la température ambiante, nous montrons la variation de la caractéristique $J(V)$ de la cellule solaire ZnSnN_2 étudiée et la puissance émise pour différentes épaisseurs w_{ZnSnN_2} (w_p) de notre structure, il a été montré selon nos résultats que l'amplitude accroît avec l'épaisseur de l'absorbeur pour la densité de courant délivrée par la cellule et la puissance émise. Les résultats révèlent des variations de w_{ZnSnN_2} de $1\ \mu\text{m}$ à $2\ \mu\text{m}$ conduit à une augmentation de J_{cc} et l'efficacité due aux photons absorbés qui ont fait les différentes longueurs d'onde de l'éclairage à être absorbé et contribuer dans la génération de porteurs et l'efficacité sera augmenté, selon les résultats montrés dans le tableau 3.2 et la figure 3.4 (a et b), il est montré une amélioration de l'efficacité de 23,66 % pour $1\ \mu\text{m}$ à 26,49 % pour $2\ \mu\text{m}$ (les mêmes valeurs avec la puissance maximale en raison du spectre AM1.5G). Une amélioration de (J_{cc}) de $22,00\ \text{mA}/\text{cm}^2$ pour $1\ \mu\text{m}$ à $24,05\ \text{mA}/\text{cm}^2$, il est clair que l'effet de (w_p) est remarquable sur (J_{cc}) et une légère augmentation de (V_{co}).

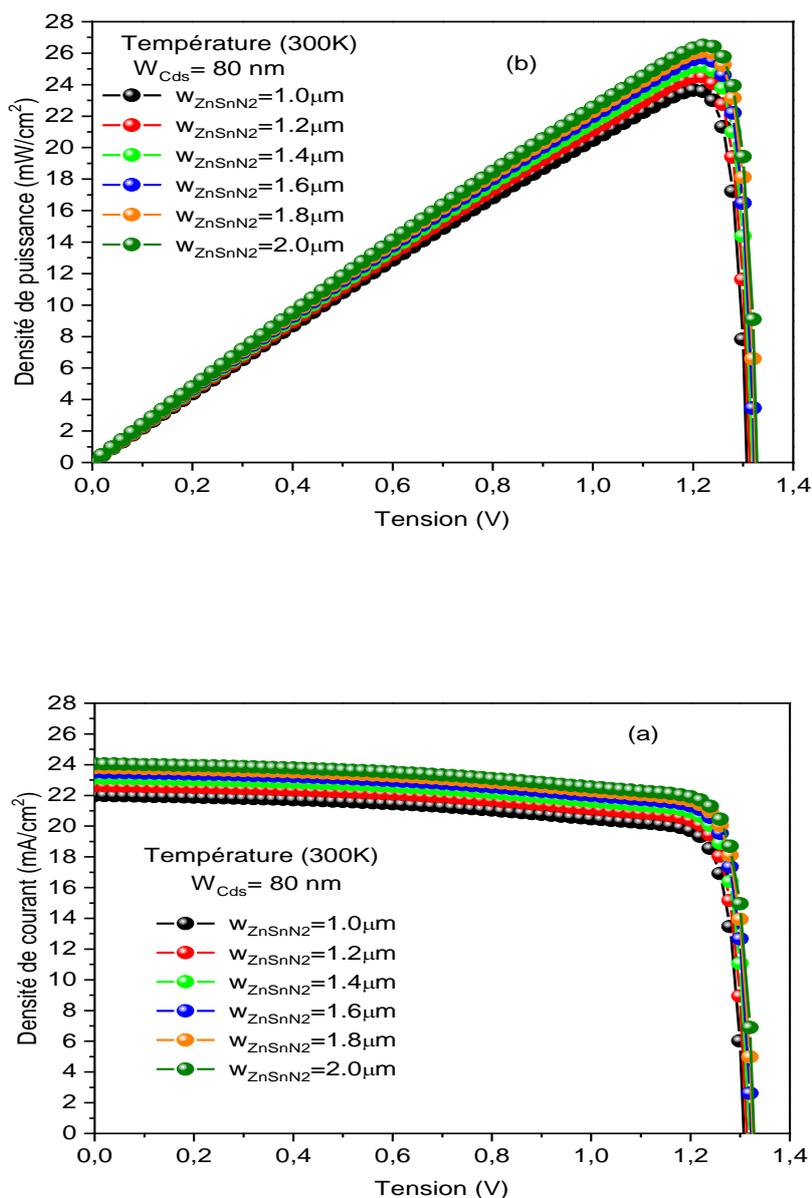


Figure 3.3 (a) La caractéristique $J(V)$ pour différents w_p (w_{ZnSnN_2}), (b) la caractéristique $P(V)$ pour différents w_p (w_{ZnSnN_2}) avec w_n (w_{CdS})=80nm à 300K [6].

Le tableau 3.2 représente la variation des paramètres électriques avec la variation de l'épaisseur de l'absorbeur $ZnSnN_2$ (w_p), l'épaisseur de la couche tampon CdS (w_n) est fixée à 80 nm.

Tableau 3.2 : Les effets de l'épaisseur de la couche absorbante en ZnSnN_2 sur les paramètres photovoltaïques à 300K [6].

W_p (μm)	V_{oc} (V)	J_{cc} (mA/cm^2)	FF (%)	η (%)
1	1.31	22.00	82.18	23.66
1.2	1.31	22.63	82.41	24.52
1.4	1.32	23.12	82.54	25.18
1.6	1.32	23.50	82.67	25.70
1.8	1.33	23.80	82.78	26.13
2	1.33	24.05	82.85	26.49

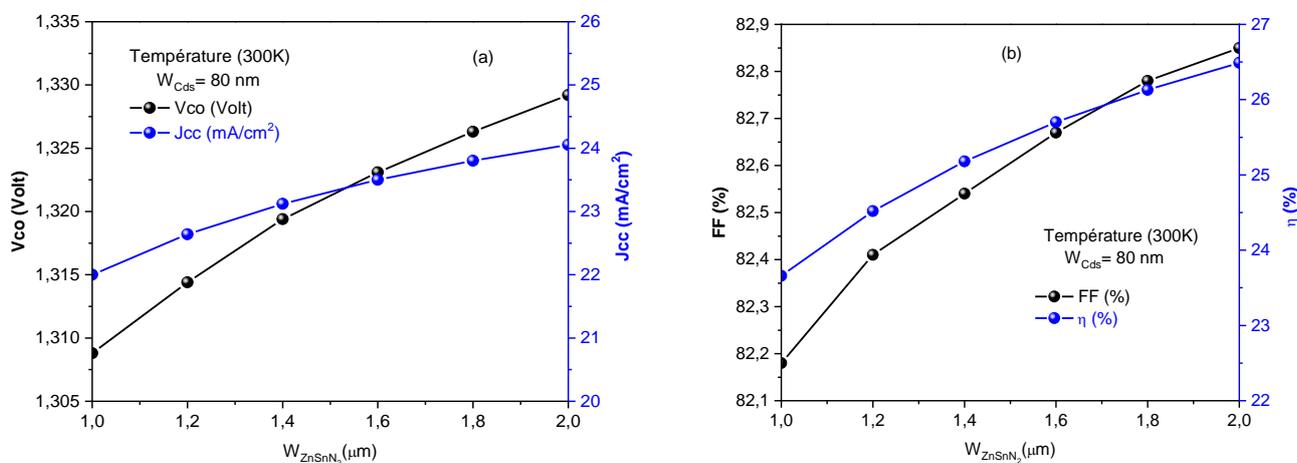


Figure 3.4 (a) Variation de J_{cc} et V_{oc} en fonction de l'épaisseur de ZnSnN_2 , (b) Variation de l'efficacité (%) et FF (%) en fonction de l'épaisseur de ZnSnN_2 [6].

3.1.3.2 Effets de l'épaisseur de la couche tampon de CdS sur la cellule solaire ZnSnN_2 à couche mince

La figure 3.5 illustre l'EQE (efficacité quantique externe) pour de nombreuses épaisseurs de couche tampon (CdS), il est clair que l'augmentation de w_n (w_{CdS}), l'EQE ne baisse que sur une plage de $0,3 \mu\text{m}$ - $0,51 \mu\text{m}$ qui provoque une plus forte absorption des photons dans cet intervalle de longueurs d'onde avant d'atteindre la couche absorbante ZnSnN_2 dans une deuxième étape.

Le tableau 3.3 montre l'impact d'une variation de l'épaisseur du tampon CdS (w_n) sur les mêmes performances électriques étudiées précédemment, alors que l'épaisseur de l'absorbeur est fixée à $1 \mu\text{m}$ et 300K.

Tableau 3.3 : Les effets de l'épaisseur de la couche tampon de CdS sur les paramètres photovoltaïques à 300 K [6].

W_n (nm)	V_{co} (V)	J_{cc} (mA/cm ²)	FF (%)	η (%)
10	1.31	22.44	89.40	26.31
20	1.31	22.41	88.57	26.03
30	1.31	22.39	87.29	25.61
40	1.31	22.35	85.91	25.15
50	1.31	22.29	84.63	24.71
60	1.31	22.22	83.56	24.31
70	1.31	22.12	82.76	23.97
80	1.31	22.00	82.18	23.66

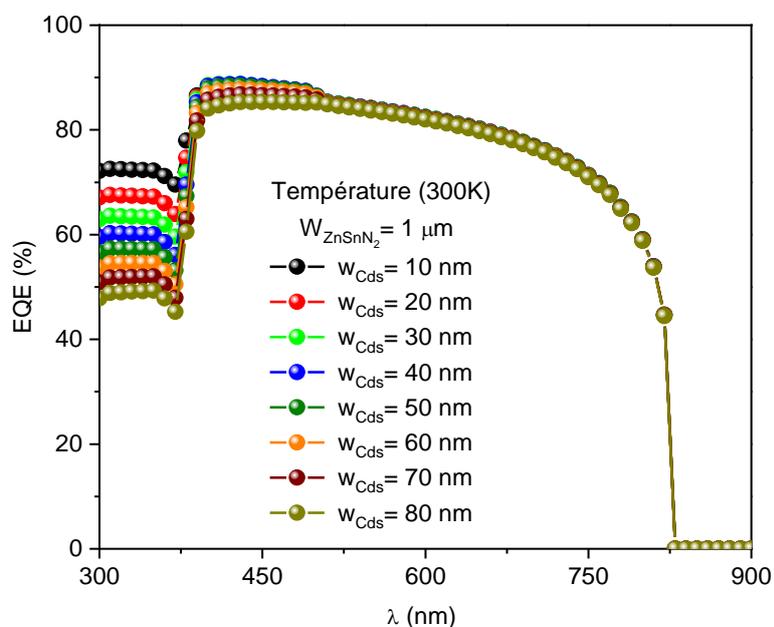


Figure 3.5. Effet de l'épaisseur de CdS sur le rendement quantique [6].

3.1.3.3 Effets de la température sur les cellules solaires à couches minces en $ZnSnN_2$

La figure 3.6 illustre l'EQE (efficacité quantique externe) calculée à différentes températures. D'après les résultats, nous avons conclu qu'il n'y a pas d'effet, donc les valeurs de l'EQE ne sont

pas trop influencées par l'augmentation de la température et notre structure peut résister à des températures élevées.

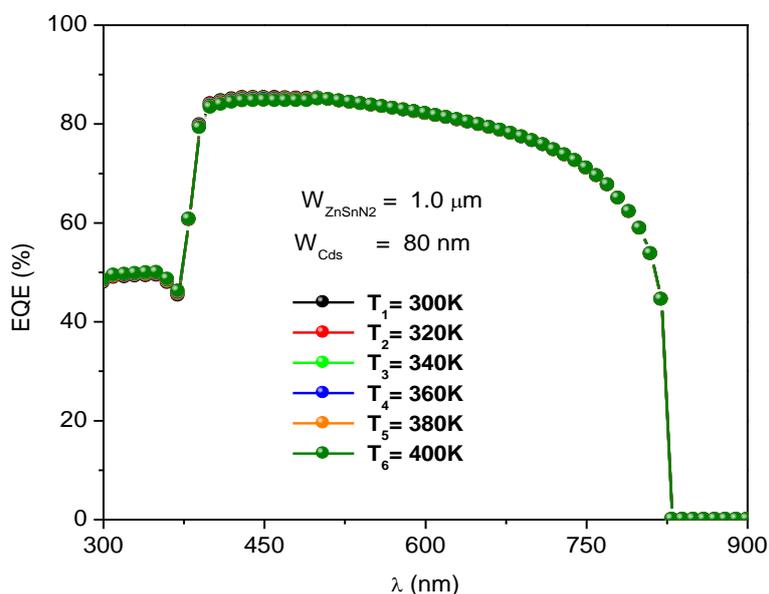


Figure 3.6. Effets de la température de fonctionnement sur le rendement quantique [6].

Tableau 3.4 : Les effets de la température de fonctionnement sur les paramètres photovoltaïques [6].

Température (K)	V_{co} (V)	J_{cc} (mA/cm ²)	FF (%)	η (%)
300	1.31	22.00	82.18	23.66
320	1.29	21.99	81.88	23.20
340	1.27	21.99	81.58	22.73
360	1.25	21.99	81.27	22.26
380	1.22	21.98	80.98	21.79
400	1.20	21.98	80.68	21.30

La figure 3.7 montre la caractéristique $J(V)$ pour différentes températures de fonctionnement. À des températures plus élevées, l'énergie de la bande interdite a été réduite et a conduit à la recombinaison des électrons et des trous qui affectent les paramètres photovoltaïques comme J_{cc} . Dans les applications photovoltaïques, V_{co} est le plus affecté en raison de la dépendance du courant inverse de saturation (Annexe B) qui est une fonction de la température et, par conséquent, le changement des autres paramètres photovoltaïques en raison de dérivés de la tension en circuit ouvert (V_{co}). Les résultats sont présentés à la figure 3.8(a et b), en effet, les figures ci-dessous confirment ces constatations.

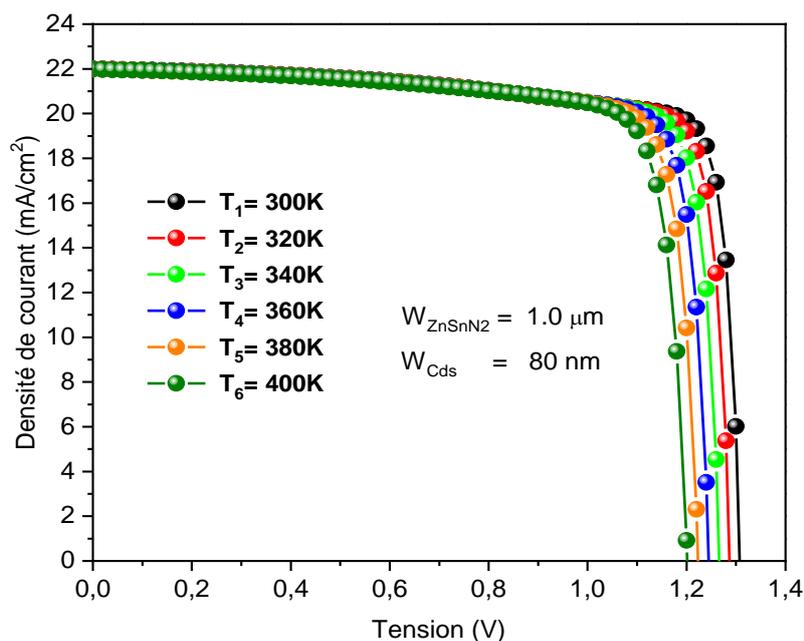


Figure 3.7. La caractéristique $J(V)$ pour différentes températures de fonctionnement [6].

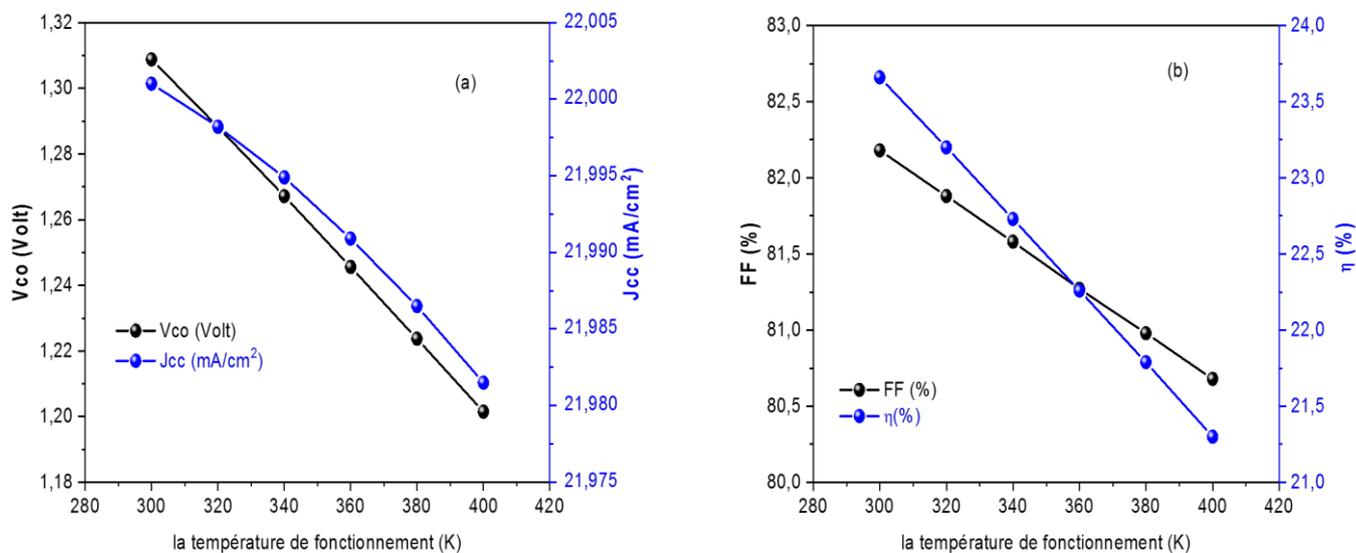


Figure 3.8. (a) Variation de J_{cc} et V_{co} en fonction de la température de fonctionnement. (b) Variation de l'efficacité (%) et FF (%) en fonction de la température de fonctionnement [6].

Le tableau 3.5 montre nos paramètres photovoltaïques basés sur la cellule solaire en ZnSnN_2 par rapport aux autres cellules solaires. Il est clair que la cellule solaire ZnSnN_2 offre un certain nombre d'avantages intéressants par rapport aux (CIGS) et (CZTS) en raison d'un rendement

élevé de ~26%, d'un coefficient d'absorption élevé $\sim 10^5 \text{ cm}^{-1}$ comparable aux semiconducteurs III-V [7] ainsi le Sn est un élément abondant en terre, non toxique et peu coûteux.

Tableau 3. 5 : Nos paramètres photovoltaïques basés sur la cellule solaire ZnSnN_2 comparés à d'autres cellules solaires.

Cellule solaire à couche mince	V_{co} (V)	J_{cc} (mA/cm ²)	FF (%)	η (%)
CZTS/CdS/ZnO[8]	0.82	24.13	61.68	12.21
CIGS/CdS/ZnO [9]	0.67	25.06	78.52	19.13
ZnSnN_2 /CdS/ZnO [6]	1.32	24.05	82.85	26.49

3.1.4 Conclusion

En résumé, nous avons étudié l'effet de l'épaisseur et de la température sur les caractéristiques de la cellule solaire en utilisant le nouveau matériau ZnSnN_2 (Zn-IV-N₂), qui est un matériau composé d'un élément abondant sur terre, non toxique et peu coûteux. Les paramètres photovoltaïques ont été calculés sous différents paramètres tels que l'épaisseur et les températures en utilisant SCAPS-1D. L'efficacité obtenue dans la présente étude est meilleure lorsque l'on prend en compte l'effet de l'épaisseur de la couche absorbante en ZnSnN_2 et de la température de fonctionnement qui donne un rendement électrique amélioré ; la valeur optimisée du rendement de 26,49% a été atteinte. De ce travail, nous avons constaté que la cellule solaire en ZnSnN_2 offre un certain nombre d'avantages intéressants par rapport à (CIGS) et (CZTS).

3.2.1 Simulation des cellules solaires CuCrO₂/ ZnSnN₂

Sur la base de plusieurs recherches sur les semi-conducteurs, nous avons étudié l'un des nouveaux semi-conducteurs, en raison de ses propriétés physiques passionnantes qui, à leur tour, résolvent certains problèmes dans l'industrie photovoltaïque. Le but de cette étude est d'étudier certains paramètres qui affectent l'efficacité de la cellule solaire p-CuCrO₂ (CCO)/n-ZnSnN₂ (ZTN) en utilisant le logiciel SCAPS-1D, et nos résultats sont comparés aux résultats d'un autre logiciel (wxAMPS), où les résultats ont montré une grande compatibilité avec la présence d'une faible incertitude. Nous avons étudié l'influence de nombreux paramètres tels que l'épaisseur de la couche absorbante (n-ZnSnN₂), l'épaisseur de la couche tampon (p-CuCrO₂), la température, la résistance en série (R_s), la résistance en parallèle (R_p) et la densité de défauts sur les performances des cellules solaires en ZnSnN₂ qui était inclus dans le dispositif réel. Les paramètres photovoltaïques ont été calculés à l'aide de SCAPS-1D sous le spectre AM1.5G à l'intensité d'un soleil, à une température de 300K, et tenu compte de la condition de bande plate au interface. Nous avons obtenu un rendement élevé de $\eta \sim 22\%$ sans défaut. Tenu compte les caractéristiques de ce nouveau matériau semiconducteur ZnSnN₂, qui est composé d'un élément abondant en terre, non toxique et peu coûteux, ainsi que d'un coefficient d'absorption élevé, il peut être considéré comme une alternative pour les applications photovoltaïques et d'éclairage.

3.2.2 Structure des cellules solaires CuCrO₂/ ZnSnN₂

Nous nous intéressons à la modélisation et à la simulation des cellules solaires en ZnSnN₂ en utilisant SCAPS-1D, nous avons étudié l'influence de nombreux paramètres tels que l'épaisseur de la couche absorbante (n-ZnSnN₂), l'épaisseur de la couche tampon (p-CuCrO₂), la température, la résistance série (R_s), la résistance parallèle (R_p) et la densité de défauts sur la performance des cellules solaires en ZnSnN₂. Le schéma de la cellule solaire CuCrO₂/ ZnSnN₂ est présenté à la figure 3.9 (a) la cellule est composée de couches de n-ZnSnN₂ et de p-CuCrO₂ ; les épaisseurs de ZnSnN₂ (ZTN) et de CuCrO₂ (CCO) sont respectivement de 1 μm et 50 nm, cette structure a été proposée par E. Arca et al. [5]. Nous avons également sélectionné et accepté le Mg : CuCrO₂ en fonction des paramètres de maille car le paramètre de maille de CuCrO₂ est proche de la structure de la wurtzite ZnSnN₂ [5], donc la contrainte est faible. Le diagramme de bande des cellules solaires en ZnSnN₂ a été calculé à l'aide du code SCAPS-1D, nos résultats sont présentés sur la figure 3.9 (b). Ainsi que $\Delta E_c = 2.1 \text{ eV} > 0$ (\equiv barrière spike-like) [11].

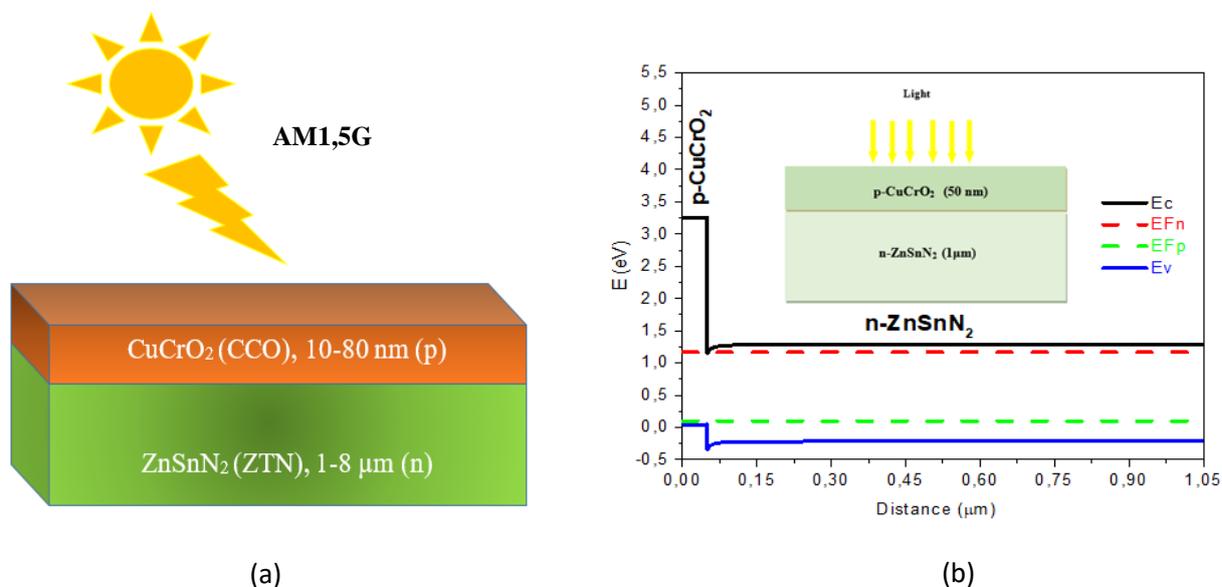


Figure 3.9 (a) Structure des cellules solaires en ZnSnN_2 [5], (b) le diagramme de bande des cellules solaires en ZnSnN_2 .

Tableaux 3.6 et 3.7 : Paramètres physiques utilisés dans la simulation. [10]

Paramètre d'entrée	Matériaux	
Paramètres	ZnSnN_2	Mg: CuCrO_2
ϵ_r	15	7.5
E_g (eV)	1.5	3.2
E_a (eV)	4.1	2
N_c (cm^{-3})	$1.2 \cdot 10^{18}$	$2.8 \cdot 10^{20}$
N_v (cm^{-3})	$7.8 \cdot 10^{19}$	$8 \cdot 10^{20}$
μ_e ($\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{S}^{-1}$)	0.5	0.1
μ_h ($\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{S}^{-1}$)	0.05	0.1
N_d (cm^{-3})	$1.005 \cdot 10^{19}$	0
N_a (cm^{-3})	$1.001 \cdot 10^{19}$	$5 \cdot 10^{21}$
Epaisseur (nm)	1000-8000	10-80
Densité des défauts (cm^{-3})	10^{14} (A)	10^{17} (A)

Propriétés de contact	Avant	Arrière
Propriétés de recombinaison des surfaces (S_e) (cm/s)	10^7	10^7
Propriétés de recombinaison des surfaces (S_h) (cm/s)	10^7	10^7
Réflexivité (R)	10 %	20%

3.2.3 Résultats et discussions

Comme nous le savons, l'influence de la température affecte les propriétés physiques du semi-conducteur, car la modification de la sortie des propriétés physiques peut avoir un effet négatif sur le rendement de conversion. C'est pourquoi une étude physique doit être effectuée pour déterminer les paramètres et les conditions optimaux qui, à leur tour, contribuent positivement à l'obtention d'un rendement acceptable.

3.2.3.1 Les effets de l'épaisseur sur les paramètres photovoltaïques

Dans cette étude, toutes les simulations ont été réalisées à température ambiante en utilisant l'irradiation solaire AM1,5G à l'intensité d'un soleil et tenu compte de la condition de bande plate à l'interface. La figure 3.9 (a) montre la structure de la cellule solaire ZnSnN_2 a été proposée par E.Arca et al. [5]. L'EQE est l'un des paramètres importants dans le PV, car une étude approfondie de celui-ci nous permet de clarifier la plage d'absorption de la cellule solaire et de noter les effets physiques qui se produisent dans la cellule après avoir modifié certains paramètres. La figure 3.10 représente le rendement quantique externe (EQE) en fonction de la longueur d'onde, où $w_n=1\mu\text{m}$, $w_p=50\text{ nm}$, et avec les défauts comme mentionné dans [5]. Nos résultats nous permettent de conclure qu'il existe quatre régions, chacune étant caractérisée par:

Région 1, $\lambda \in [300-390]\text{ nm}$, l'efficacité quantique externe réduite en raison de la recombinaison de la surface frontale.

Région 2, $\lambda \in [390-750]\text{ nm}$, la réduction de l'efficacité quantique externe est due à une faible longueur de diffusion et la réflexion.

Région 3, $\lambda \in [750-825]\text{ nm}$, la réduction de l'EQE due à la recombinaison de la surface arrière, à la faible longueur de diffusion et une absorption réduite aux grandes longueurs d'onde.

Région 4, $\lambda > 825\text{ nm}$, aucune lumière n'est absorbée en dessous de E_g aux grandes longueurs d'onde.

La valeur maximale de l'EQE diminue considérablement avec les pertes optiques. La valeur maximale de l'EQE est située dans le domaine visible, où $\text{EQE}_{\text{max}} \sim 90\%$.

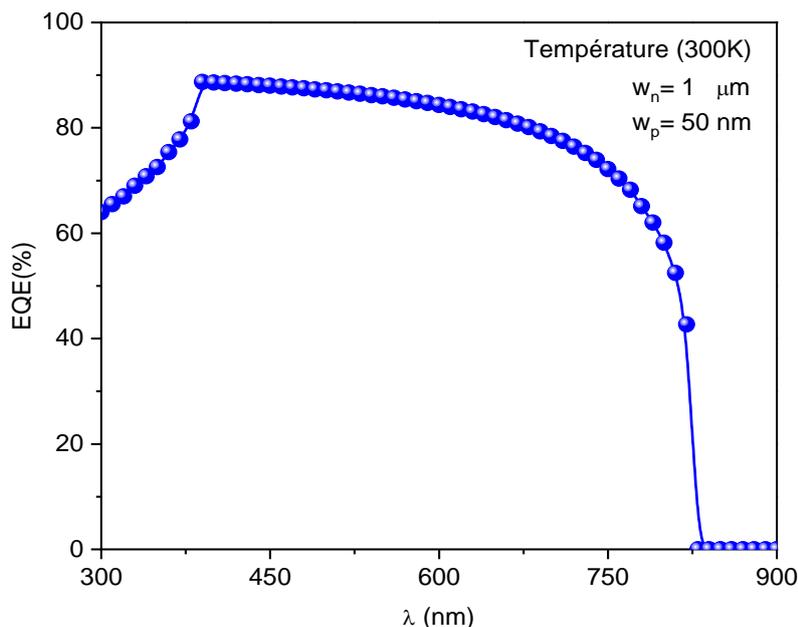


Figure 3.10 Le rendement quantique externe des cellules solaires ZnSnN_2 (ZTN) en fonction de la longueur d'onde λ , où $w_n=1 \mu\text{m}$, $w_p=50 \text{ nm}$, et avec des défauts [5,10].

Les résultats révèlent une variation de w_n de $1 \mu\text{m}$ à $8 \mu\text{m}$, alors que l'épaisseur du tampon est fixée à 50 nm comme mentionné dans [5], ce qui entraîne une légère augmentation de J_{cc} et de l'efficacité due à l'absorption de photons, qui ont fait que les différentes longueurs d'onde de l'éclairage sont absorbées et contribuent à la génération de paires de porteurs (électrons/trous) et l'efficacité sera accrue. Selon les résultats présentés dans le tableau 3.8, l'efficacité est passée de $18,87 \%$ pour $1 \mu\text{m}$ à $18,92 \%$ pour $2 \mu\text{m}$, au-delà de cette épaisseur, l'efficacité commence à diminuer. D'autre part, une amélioration de J_{cc} de $22,75 \text{ mA/cm}^2$ pour $1 \mu\text{m}$ à $8 \mu\text{m}$ $22,82 \text{ mA/cm}^2$. L'effet de w_n est remarquable sur J_{cc} et une légère augmentation de V_{co} , ce qui fait que la tension en circuit ouvert n'est pratiquement pas affectée. Il est également clair, selon le tableau 3.8, que l'impact de la variation de l'épaisseur de la couche tampon alors que l'épaisseur de l'absorbeur est fixée à $1 \mu\text{m}$ comme mentionné dans [5] affecte les performances électriques de la structure étudiée. Les résultats obtenus montrent une diminution du J_{cc} et de l'efficacité de $22,75 \text{ mA/cm}^2$ pour 50 nm à $22,66 \text{ mA/cm}^2$ pour 80 nm , FF (%), et V_{co} sont restés inchangés.

Tableau 3.8 : Toutes les épaisseurs étudiées (à T=300K)

(a) l'effet de l'épaisseur de CuCrO₂ (couche tampon) [10].

W_p ($W_n=1\mu m$)	10 nm	20 nm	30 nm	40 nm	50 nm	60 nm	70 nm	80 nm
V _{co} (V)	1.15	1.15	1.15	1.15	1.15	1.15	1.15	1.15
J _{cc} (mA/cm ²)	22.86	22.84	22.81	22.78	22.75	22.72	22.69	22.66
FF (%)	71.88	71.88	71.88	71.88	71.87	71.87	71.86	71.86
η (%)	18.96	18.94	18.92	18.89	18.87	18.84	18.81	18.78

(b) l'effet de l'épaisseur de ZnSnN₂ (couche absorbante) [10].

W_n ($W_p=50nm$)	1 μm	2 μm	3 μm	4 μm	5 μm	6 μm	7 μm	8 μm
V _{co} (V)	1.15	1.15	1.15	1.15	1.15	1.15	1.15	1.15
J _{cc} (mA/cm ²)	22.75	22.79	22.79	22.79	22.80	22.81	22.82	22.82
FF (%)	71.87	71.93	71.88	71.84	71.79	71.73	71.68	71.64
η (%)	18.87	18.92	18.91	18.90	18.89	18.88	18.88	18.87

3.2.3.2 L'optimisation de la température

Le tableau 3.9 montre l'impact de la variation de la température de fonctionnement sur les paramètres photovoltaïques, où $w_n=1\mu m$, $w_p=50 nm$ et avec les défauts comme mentionné dans [5], nous avons noté précédemment que la température réduit la largeur de la bande interdite qui conduisent à contribuer à la création d'un plus grand nombre de paires électron-trou porteuses, qui affectent J_{cc}. Le V_{co} est le plus affecté par la température en raison de la dépendance avec le courant inverse de saturation, et par conséquent la modification des autres paramètres photovoltaïques, le résultat est présenté à la figure 3.11 confirment ces résultats. En effet, il a été démontré que le V_{co} diminue avec l'augmentation (T) de 1,18 V pour 280K à 1,03 V pour 380K, en raison de l'augmentation du courant inverse de saturation, alors que J_{cc} augmente légèrement. Comme on peut le voir, une légère amélioration du J_{cc} de 22,72 mA/cm²

pour 280K à 22,83 mA/cm² pour 380K. L'augmentation du facteur de remplissage a compensé la diminution de la V_{co} . Ce comportement a également été obtenu pour certains types de cellules solaires à couche mince, tels que silicium amorphe et les cellules solaires organiques, s'explique par la mobilité des porteurs à des températures plus élevées comme mentionné dans [12]. L'efficacité maximale obtenue est de 19 % à 280K.

Tableau 3.9 : Les effets de la température sur les paramètres photovoltaïques, où $w_n = 1 \mu\text{m}$ et

$w_p = 50\text{nm}$ [5,10]

Température (K)	280 K	300K	320 K	340 K	360 K	380K
V_{co} (V)	1.18	1.15	1.12	1.09	1.06	1.03
J_{cc} (mA/cm ²)	22.72	22.75	22.77	22.79	22.81	22.83
FF(%)	70.52	71.87	72.94	73.63	73.92	74.03
η (%)	18.97	18.87	18.66	18.32	17.87	17.35

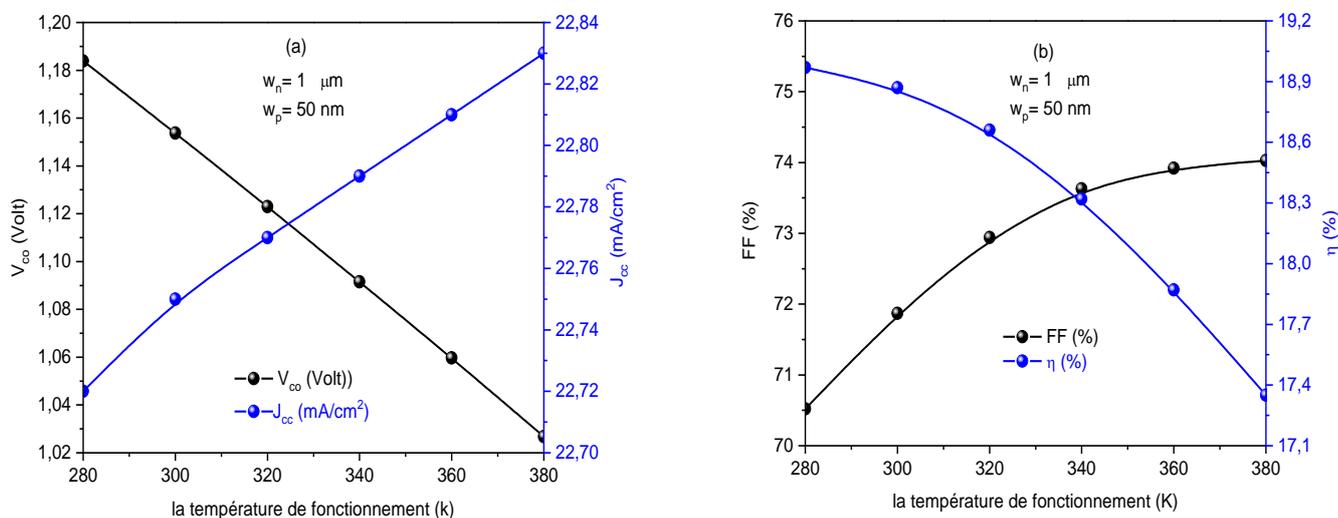


Figure 3.11 (a) Variation de J_{cc} et V_{co} en fonction de la température de fonctionnement, (b) Variation de l'efficacité (%), et FF (%) en fonction de la température de fonctionnement, où $w_n = 1 \mu\text{m}$, $w_p = 50 \text{ nm}$ et avec des défauts.

3.2.3.3 Effets des résistances

Le logiciel SCAPS a permis de prendre en considération les pertes liées aux défauts de fabrication, pour cette raison, à température ambiante, où $w_n=1\mu\text{m}$ et $w_p=50\text{ nm}$ comme mentionné dans [5], nous avons étudié l'effet des résistances série et parallèle. Les figures 3.12 et 3.13 montrent la variation de l'efficacité (%) et de la FF (%) du ZnSnN_2 en fonction des résistances série et parallèles, dans le but d'atteindre une efficacité élevée. Il est préférable d'obtenir des résistances série faible et parallèle élevées [13]. Comme nous pouvons le voir, les résultats indiquent que l'augmentation (R_s) provoque une diminution significative de FF (%) et de l'efficacité (%), pour les valeurs $0\ \Omega\ \text{cm}^2$ et $5\ \Omega\ \text{cm}^2$, nous avons trouvé 18,87 % et 17,11 %, respectivement. En revanche, l'augmentation de (R_p) provoque une augmentation significative de FF (%) et l'efficacité (%), pour les valeurs 10^1 et $10^5\ \Omega\ \text{cm}^2$, nous avons trouvé 1,27 % et 18,86 %, respectivement. Nos résultats sont illustrés dans le tableau 3.10.

Tableau 3.10 : Les effets de la résistance série (R_s) et de la résistance parallèle (R_p) sur les paramètres photovoltaïques, où $w_n=1\ \mu\text{m}$ et $w_p=50\text{ nm}$ [5,10].

$R_s\ (\Omega.\text{cm}^2)$	$V_{co}\ (\text{V})$	$J_{cc}\ (\text{mA}/\text{cm}^2)$	FF (%)	$\eta\ (\%)$
0	1.15	22.7	71.87	18.87
1	1.15	22.7	70.60	18.51
5	1.15	22.6	65.61	17.11
$R_p\ (\Omega.\text{cm}^2)$	$V_{co}\ (\text{V})$	$J_{cc}\ (\text{mA}/\text{cm}^2)$	FF (%)	$\eta\ (\%)$
10^1	0.22	22.75	25.02	1.27
10^2	1.12	22.75	40.15	10.20
10^5	1.15	22.75	71.84	18.86

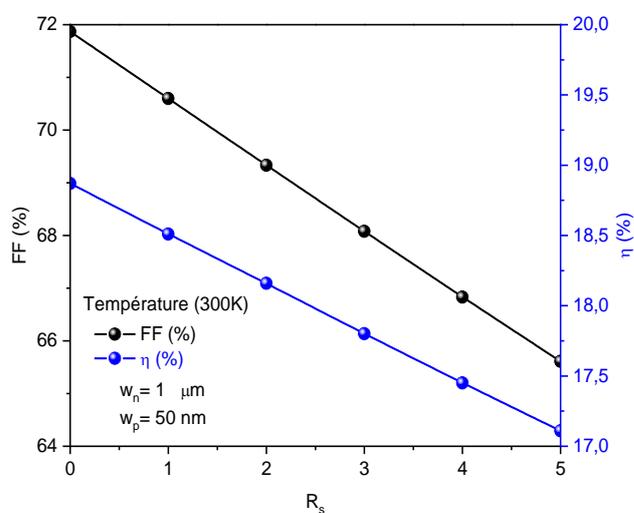
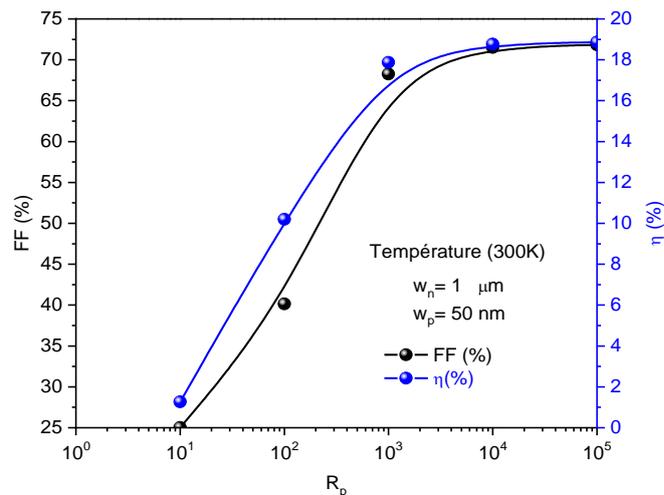


Figure 3.12 Variation de l'efficacité (%) et FF (%) des cellules solaires ZnSnN_2 en fonction de la résistance série (R_s), où $w_n=1\ \mu\text{m}$, $w_p=50\text{ nm}$ et avec des défauts [5,10].

Figure 3.13 Variation de l'efficacité (%) et FF (%) des cellules solaires ZnSnN₂ en fonction de la résistance parallèles (R_p), où $w_n=1 \mu\text{m}$, $w_p=50 \text{ nm}$ et avec des défauts [5,10].



3.2.3.4 Effets de la densité des défauts dans les cellules solaires à couche mince en ZnSnN₂

La figure 3.14 montre les paramètres photovoltaïques (J_{cc} , V_{co} , FF% et $\eta\%$) en fonction de la densité de défauts dans n-ZnSnN₂, car sa valeur passe de 10^{14} cm^{-3} à 10^{15} cm^{-3} selon les travaux de E. Arca et al. [5]. La figure 3.15 montre les caractéristiques simulées J(V) avec et sans état de défaut, car on peut voir une diminution de ces paramètres lorsque l'on ajoute les défauts, en raison de la recombinaison créée avec les niveaux d'énergie localisés qui réduisent l'efficacité. Pour les valeurs 10^{14} cm^{-3} et 10^{15} cm^{-3} , nous avons trouvé 19 % et 13,5 % respectivement. Le tableau 3.11 montre nos paramètres photovoltaïques basés sur des cellules solaires à structure ZnSnN₂ calculées avec le logiciel SCAPS, par rapport à [5] qui a été calculé avec le logiciel (wxAMPS), car nous pouvons constater un bon accord, en raison de la petite différence avec les résultats d'Arca [5], tout en respectant les paramètres d'entrée. La cellule solaire ZnSnN₂ offre plusieurs avantages intéressants par rapport à d'autres couches minces grâce au rendement élevé $\eta \approx 30\%$ (limite Shockley-Quiesser) [14] et au coefficient d'absorption plus élevé. Cette nouvelle proposition considérée comme un grand défi pour améliorer l'efficacité à l'avenir. Ce nouveau matériau peut être utilisé avec du silicium dans le même dispositif selon des études récentes, un tel film mince composé de jonctions p-n Si/ZnSnN₂ [15] ou de telles hétérostructures (par exemple des puits quantiques) qui permettent l'absorption de photons de faible énergie.

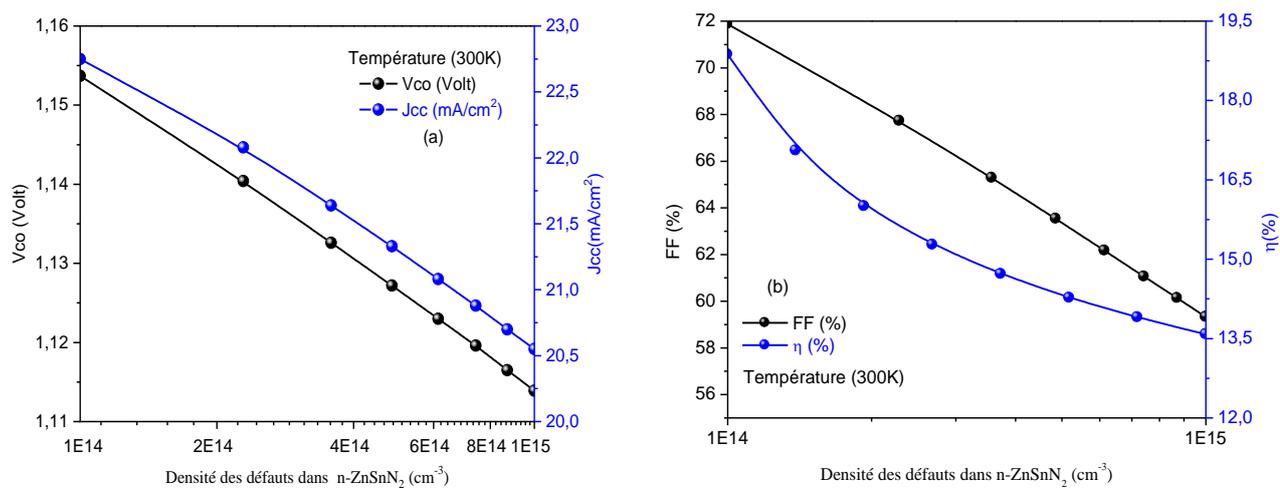


Figure 3.14 (a) Variation de J_{cc} et V_{co} en fonction de la densité de défauts de la couche absorbante de $n\text{-ZnSnN}_2$, (b) variation de l'efficacité (%) et FF (%) en fonction de la densité de défauts de la couche absorbante de $n\text{-ZnSnN}_2$, où $w_n=1 \mu\text{m}$, $w_p=50 \text{ nm}$ [5,10].

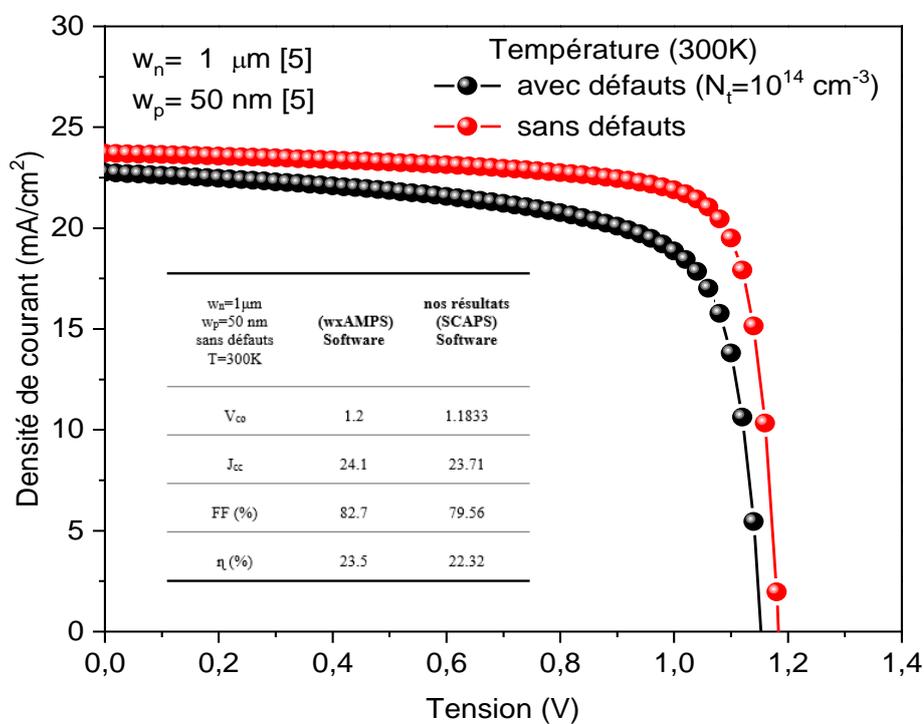


Figure 3.15 La caractéristique $J(V)$ de la cellule solaire ZnSnN_2 avec et sans défauts [5,10].

Tableau 3.11 : Nos paramètres photovoltaïques par rapport à [5], où [5] a été calculé à l'aide du logiciel wxAMPS.

W_n=1µm W_p=50 nm Sans défauts T=300K	(WxAMPS) Software [5]	Nos résultats (SCAPS) Software [10]
V _{co} (V)	1.2	1.18
J _{cc} (mA/cm ²)	24.1	23.71
FF (%)	82.7	79.56
η (%)	23.5	22.32

3.2.3.5 Effets de la couche n-Si sur les cellules solaires à couche mince en ZnSnN₂

Dans cette partie le silicium (Si) est ajouté comme une couche mince à l'ordre 1 µm. Il correspond à un gap indirect égal $E_g=1.12$ eV (pour le cristallin). Le but de l'ajout de silicium était d'essayer d'améliorer le facteur d'absorption de la cellule et son rendement par rapport à une cellule sans silicium. Ainsi que la faible épaisseur de silicium a permis de jouer le rôle d'une couche BSF (**B**ack-**S**urface-**F**ield) et donc la création d'un champ électrique en face arrière afin d'abaisser la vitesse de recombinaison et par conséquent d'améliorer les caractéristiques électriques de la cellule solaire. La figure 3.16 montre la cellule solaire étudiée utilisant une fine couche de silicium sans défauts. Le tableau 3.12 montre les paramètres physiques utilisés dans la simulation.

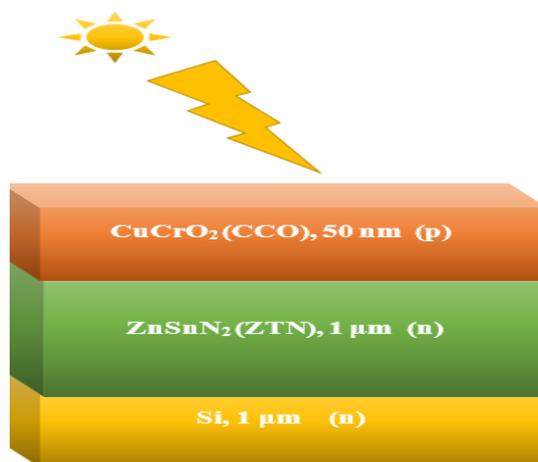


Figure 3.16 Structure des cellules solaires en ZnSnN₂ avec Si sans défauts.

Tableau 3.12 : Paramètres physiques utilisés dans la simulation.

Paramètre d'entrée	Matériaux		
	ZnSnN ₂	Mg: CuCrO ₂	Si
ϵ_r	15	7.5	11.9
E_g (eV)	1.5	3.2	1.12
E_a (eV)	4.1	2	4.05
N_c (cm ⁻³)	$1.2 \cdot 10^{18}$	$2.8 \cdot 10^{20}$	$2.8 \cdot 10^{19}$
N_v (cm ⁻³)	$7.8 \cdot 10^{19}$	$8 \cdot 10^{20}$	$1.04 \cdot 10^{19}$
μ_e (cm ² V ⁻¹ S ⁻¹)	0.5	0.1	1350
μ_h (cm ² V ⁻¹ S ⁻¹)	0.05	0.1	500
N_d (cm ⁻³)	$1.005 \cdot 10^{19}$	0	$1 \cdot 10^{20}$
N_a (cm ⁻³)	$1.001 \cdot 10^{19}$	$5 \cdot 10^{21}$	0
Epaisseur(nm)	1000	50	1000

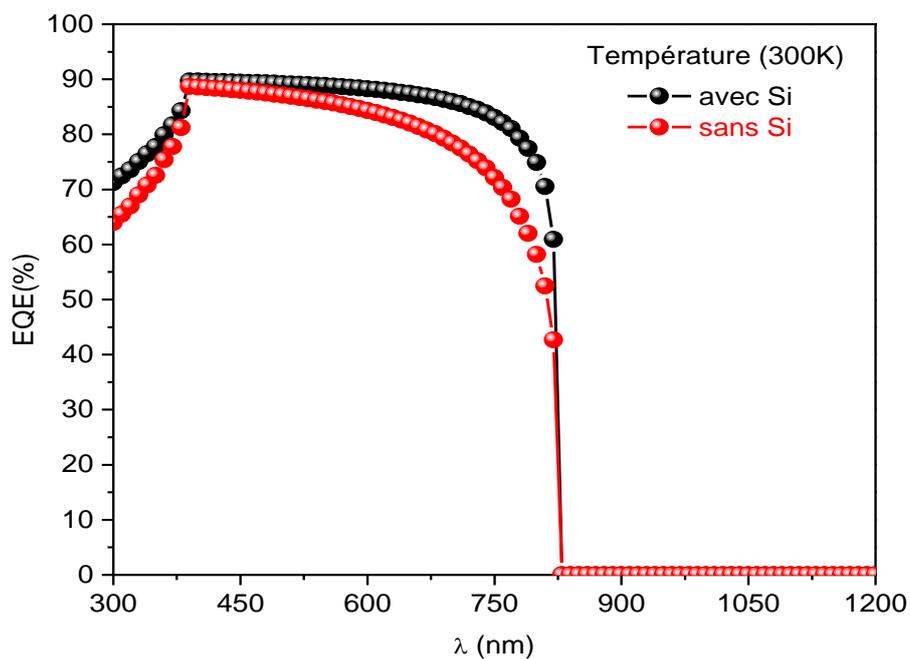


Figure 3.17 Variation de rendement quantique externe en fonction de la longueur d'onde pour deux cas avec et sans Si.

On note d'après la figure 3.17 que les valeurs de EQE avec le silicium proche des valeurs de rendement quantique externe sans le silicium avec une légère amélioration dans l'intervalle 300 à 820 nm.

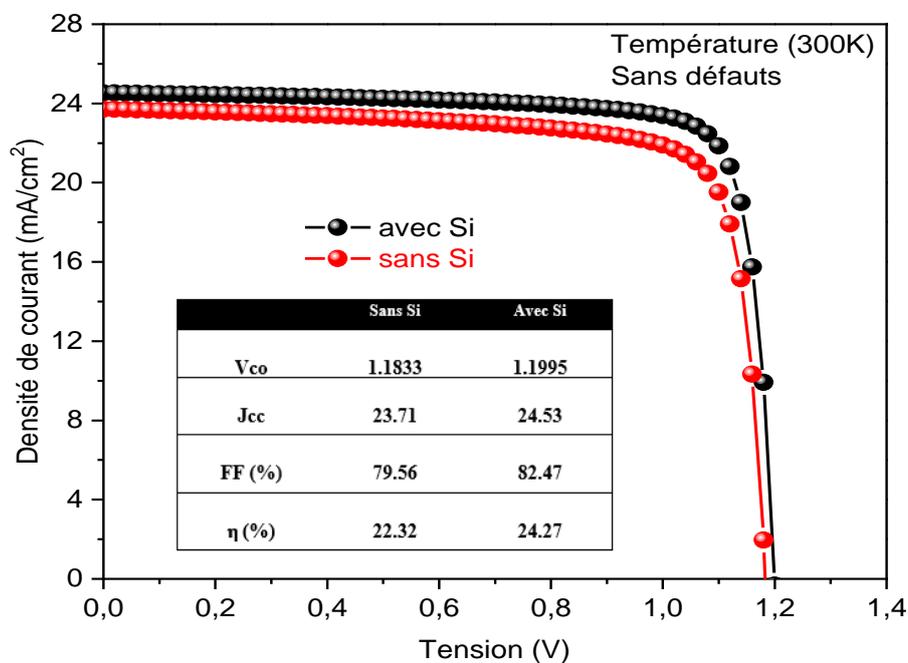


Figure 3.18 Variation de la caractéristique J-V pour une cellule solaire sans et avec le Si.

Tableau 3.13 : Nos résultats de simulation pour les cellules avec et sans Si.

	Sans Si	Avec Si
V_{co} (V)	1.18	1.20
J_{cc} (mA/cm ²)	23.71	24.53
FF (%)	79.56	82.47
η (%)	22.32	24.27

On remarque d'après la figure 3.18 et tableau 3.13, que lorsque l'on ajoute une couche de silicium va permettre l'amélioration des caractéristiques photovoltaïques, et le courant J_{cc} et le rendement atteint respectivement 24,53 mA/cm² et 24,27%.

3.2.4 Conclusion

Dans ce travail, nous avons étudié les propriétés optoélectronique du (ZnSnN_2) qui permettent de contrer les cellules existantes. Ce nouveau semi-conducteur est constitué d'éléments terrestres, non toxiques et peu coûteux, par rapport à d'autres cellules qui contiennent des éléments toxiques, non abondants et coûteux. Par exemple, l'indium malgré sa présence dans de nombreuses cellules solaires. Notre étude a été basée sur la comparaison de nos résultats calculés avec le logiciel SCAPS avec un autre logiciel tout en assurant une compatibilité maximale, en mettant en évidence la crédibilité des résultats tout en respectant les paramètres d'entrée et en déterminant les conditions et paramètres optimaux qui améliorent à leur tour l'efficacité, ce qui est un élément important dans la recherche sur les cellules solaires. Toutes les simulations ont été réalisées sous le spectre AM.1.5G. Les valeurs optimales obtenues étaient $w_n=2\mu\text{m}$, $R_s=1\ \Omega\ \text{cm}^2$, et $R_p=10^5\ \Omega\ \text{cm}^2$ en obtenant un rendement acceptable $\eta\approx 19\%$ en tenant compte de la présence de défauts. D'après nos résultats, un bon accord a été mentionné, nous avons atteint un rendement élevé de $\eta=22\%$ sans défauts allant jusqu'à 24% si on ajoute une couche BSF mince en silicium. En attendant que les résultats expérimentaux, qui à leur tour montreront la validité malgré la rareté des données expérimentales car il est jusqu'à présent, les recherches sur ces nouveaux matériaux sont en cours. Nous proposons de développer davantage de dispositifs basés sur les cellules tandem ou comme les hétérostructures, ce qui constitue un grand défi pour améliorer l'efficacité à l'avenir.

3.3.1 Simulation des cellules solaires ultramine ZnSnN₂/Si

L'étude vise à étudier l'influence de l'épaisseur de la couche absorbante (ZnSnN_2), de la température, de la résistance en série (R_s) et de la densité de défauts sur des paramètres électriques tels que la densité de courant de court-circuit (J_{cc}), tension de circuit ouvert (V_{co}), le facteur de remplissage (FF) et le rendement (η) sur les performances de la structure $\text{ZnO}/\text{CdS}/\text{ZnSnN}_2/\text{Si}/\text{Mo}$. Les résultats optimisés montrent une efficacité $\eta = 23,32\%$ sans défaut dans le semi-conducteur ZnSnN_2 , sous le spectre AM1.5G, un soleil, et considérant la condition de bande plate à l'interface. D'autre part, une déformation de $0,37\%$ entre le (CdS) et le (ZnSnN_2) $7,17\%$ entre (ZnSnN_2) et (Si) respectivement. Les résultats obtenus montrent que le ZnSnN_2 est un matériau très prometteur pour le photovoltaïque car comme nous l'avons déjà dit, il est composé d'un élément abondant en terre, non toxique et peu coûteux. En outre, il offre

plusieurs avantages intéressants par rapport aux autres cellules solaires à couches minces (CZTS, CIGS, CdTe, etc.) en raison de son rendement élevé et de son coefficient d'absorption élevé.

3.3.2 Structure des cellules solaires ultramine ZnSnN₂/Si

La nouvelle cellule solaire ultramine (généralement l'épaisseur varie de quelques dizaines de nm à quelques centaines de nanomètres) à structure ZnSnN₂ proposée est illustrée schématiquement dans la figure 3.19. Les paramètres du réseau orthorhombique de films ZnSnN₂ qui ont été utilisés ($a=0,585$ nm, $b=0,676$ nm et $c=0,558$ nm) [3], nous avons sélectionné CdS et Si en fonction de la faible déformation avec ZnSnN₂ 0,37% et 7,17% respectivement. Cette structure a été proposée par H. Heriche et al. En outre, ils ont inséré couche de silicium comme deuxième absorbeur pour améliorer l'efficacité. Le Molybdène (Mo) a été utilisé comme contact arrière ohmique déposé sur un substrat de verre [16].

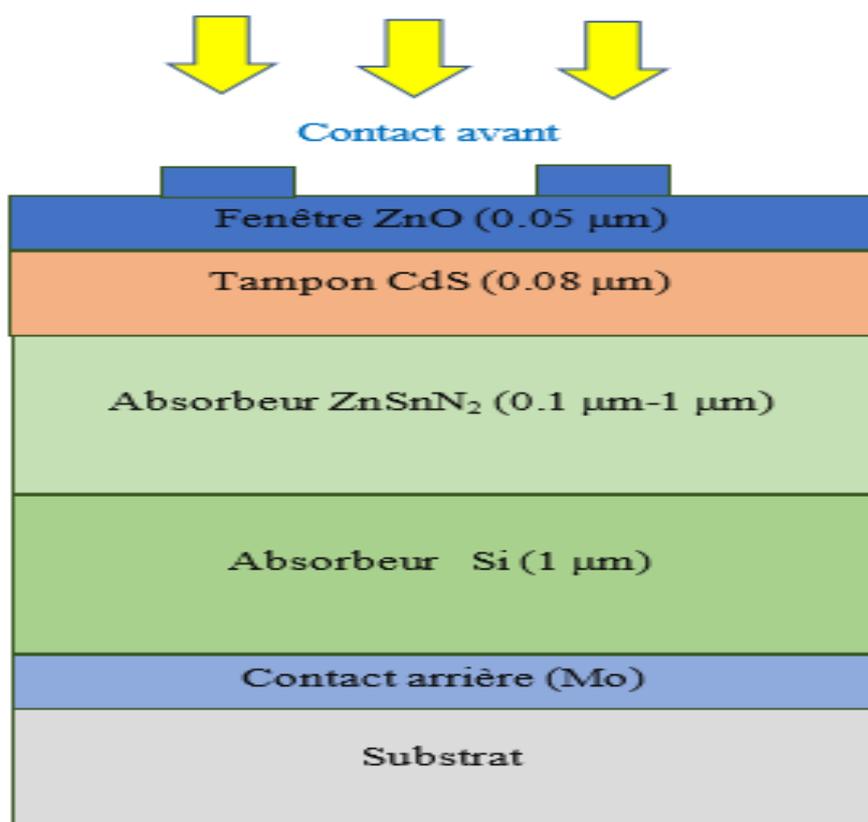


Figure 3.19 Structure de la cellule solaire ZnSnN₂ ultra-mince.

Tableaux 3.14 et 3.15 : Paramètres physiques utilisés dans la simulation [3,6,16-17]

Paramètre d'entrée	Matériaux			
	ZnSnN ₂ (p)	CdS (n)	ZnO: Al (n)	Si (p)
ϵ	15	10	9	11.9
E_g (eV)	1.5	2.4	3.3	1.12
E_a (eV)	4.1	4.2	4.45	4.05
N_c (cm ⁻³)	1.2 10 ¹⁸	2.2 10 ¹⁸	2.2 10 ¹⁸	2.80 10 ¹⁹
N_v (cm ⁻³)	7.8 10 ¹⁹	1.8 10 ¹⁹	1.8 10 ¹⁹	2.65 10 ¹⁹
μ_e (cm ² V ⁻¹ S ⁻¹)	12.68	100	100	1450
μ_h (cm ² V ⁻¹ S ⁻¹)	5.26	25	25	500
N_d (cm ⁻³)	2.01 10 ²⁰	10 ¹⁷	10 ¹⁸	0
N_a (cm ⁻³)	1.79 10 ²¹	0	0	1.00 10 ²⁰
d (nm)	100-1000	80	50	1000
Densité des défauts (cm ⁻³)	Variable	10 ¹⁶ (A)	10 ¹⁶ (A)	10 ¹⁴ (D)

Propriétés de contact	Avant	Arrière
Propriétés de recombinaison des surfaces (S_e) (cm/s)	10 ⁷	10 ⁷
Propriétés de recombinaison des surfaces (S_h) (cm/s)	10 ⁷	10 ⁷
Réfectivité (R)	10 %	20%

3.3.3 résultats et discussions

Dans cette étude, toutes les simulations ont été réalisées à température ambiante en utilisant l'irradiation solaire AM1.5G à l'intensité d'un soleil et en considérant la condition de bande plate à l'interface. La figure 3.19 montre la structure de cellule solaire ultra-mince en ZnSnN₂/Si proposées par H. Heriche et al [16], en remplaçant le CIGS par du ZnSnN₂ pour éviter la toxicité de l'indium, du sélénium et d'éléments coûteux comme le gallium.

3.3.3.1 Les effets de l'épaisseur sur les paramètres photovoltaïques

La figure 3.20 montre la réponse spectrale du dispositif en fonction de l'épaisseur de l'absorbeur en ZnSnN₂. Les résultats simulés révèlent l'augmentation significative de l'efficacité quantique externe EQE avec l'augmentation de l'épaisseur de l'absorbeur de ZnSnN₂ dans la gamme de 392 nm à 826 nm, ce qui peut s'expliquer par l'augmentation de la collecte des photons aux plus grandes longueurs d'onde. Cela s'explique par la forte probabilité de génération de porteurs due à une amélioration significative de l'absorption. En outre, l'insertion de la deuxième couche absorbante affecte l'absorption de la cellule, où nous avons remarqué que l'EQE se déplace vers des longueurs d'onde plus longues (pour les λ supérieurs à 826 nm qui correspond à E_g de ZnSnN₂), grâce à une meilleure absorption due à l'introduction de silicium. Figure 3.21 (a et b), à la température ambiante et sans défaut dans p-ZnSnN₂, nous montrons la variation de caractéristique J(V) de la cellule solaire ZnSnN₂ étudiée et la puissance émise pour différentes épaisseurs w_p (ZnSnN₂) de notre structure proposée, il a été montré selon nos résultats que la forme des courbes augmente avec l'épaisseur de l'absorbeur. Les résultats révèlent qu'une variation de w_p de 0,1 μm à 1 μm entraîne une augmentation de l'amélioration de J_{cc} et l'efficacité due aux photons absorbés qui ont fait que les différentes longueurs d'onde d'illumination à absorber et contribuent à la génération de porteurs et l'efficacité sera améliorée. D'après les résultats du tableau 3.16 et de la figure 3.22 (a et b), l'efficacité est passée de 8,90 % pour 0,1 μm à 23,32 % pour 1 μm (mêmes valeurs avec la puissance maximale due au spectre AM1.5G). Une amélioration de J_{cc} de 09,12 mA/cm² pour 0,1 μm à 21,16 mA/cm² pour 1 μm . L'effet de (w_p) est remarquable sur J_{cc} et une légère augmentation de V_{co} .

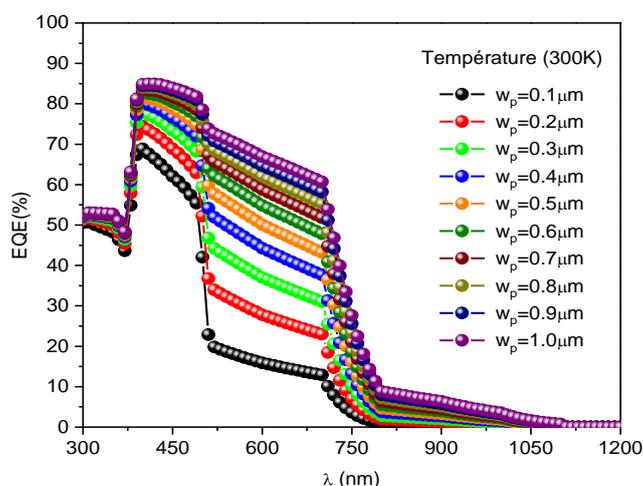


Figure 3.20 Effet de l'épaisseur du ZnSnN₂ sur l'efficacité quantique à 27°C (300K).

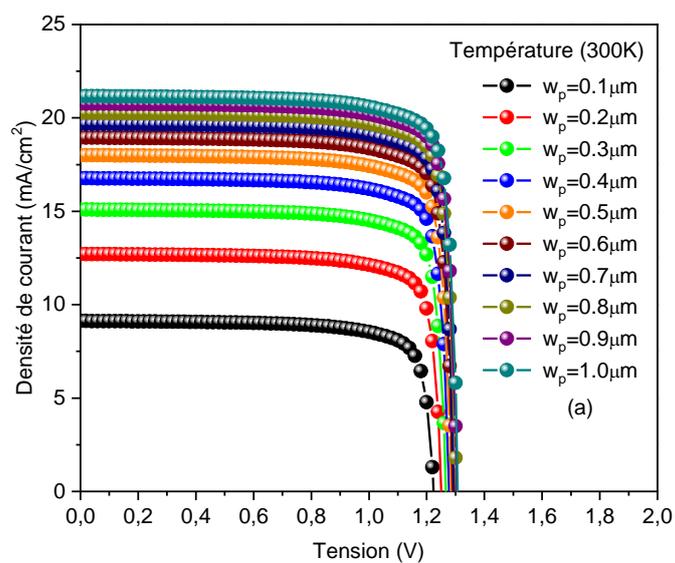
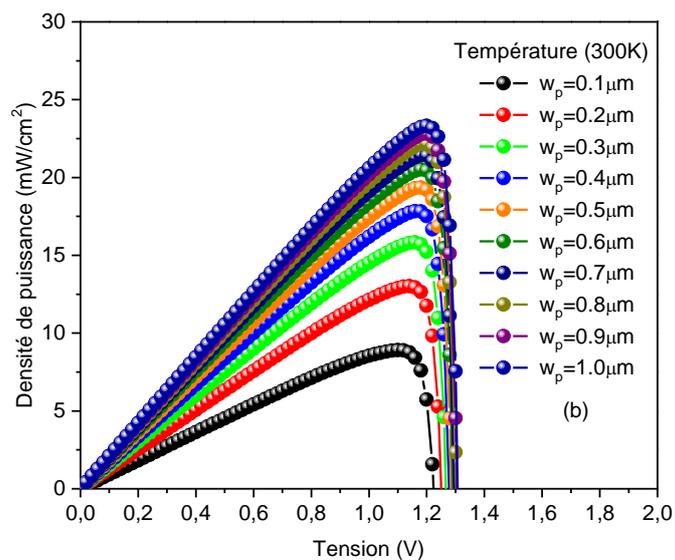


Figure 3.21 La (a) caractéristique $J(V)$ pour différents w_p (w_{ZnSnN_2}), (b) caractéristique $P(V)$ pour différents w_p (w_{ZnSnN_2}), où w_n (w_{CdS}) = 80 nm à 300 K.

Tableau 3.16 : Les effets de l'épaisseur de la couche d'absorbante $ZnSnN_2$ sur les paramètres photovoltaïques à 300K.

W_p (μm)	V_{co} (V)	J_{cc} (mA/cm^2)	FF (%)	η (%)
0.1	1.22	09.12	79.69	08.90
0.2	1.25	12.70	81.82	13.01
0.3	1.27	15.09	82.76	15.83
0.4	1.28	16.76	83.28	17.85
0.5	1.29	18.00	83.61	19.35
0.6	1.29	18.94	83.83	20.51
0.7	1.30	19.68	84.04	21.44
0.8	1.30	20.27	84.15	22.18
0.9	1.31	20.76	84.25	22.83
1	1.31	21.16	84.20	23.32

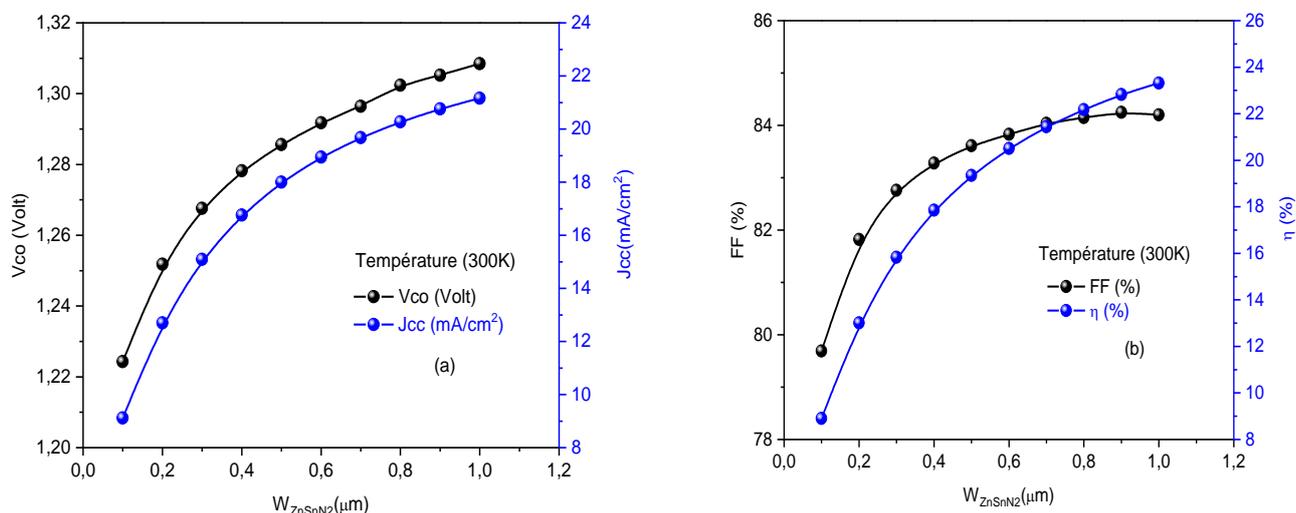


Figure 3.22 (a) Variation de J_{cc} et V_{co} en fonction de l'épaisseur de $ZnSnN_2$, (b) Variation de l'efficacité (%), et FF (%) en fonction de l'épaisseur de $ZnSnN_2$.

3.3.3.2 L'optimisation de la température

La figure 3.23 montre la caractéristique $J(V)$ pour différentes températures de fonctionnement. À des températures plus élevées, la bande interdite a été réduite et a contribué à la création d'un plus grand nombre de porteurs qui affectent le J_{cc} . Les résultats sont présentés à la figure 3.24 (a et b) et au tableau 3.17. Il a été démontré que V_{co} diminue avec l'augmentation des températures de 1,31 V pour 300K à 1,20 V pour 400 K, en raison de l'augmentation du courant inverse de saturation, alors que J_{cc} augmente légèrement. Une légère amélioration de J_{cc} de

21,16 mA/cm² pour 300K à 21,16 mA/cm² pour 400K. L'augmentation du facteur de remplissage a compensé la diminution de Voc. L'efficacité maximale obtenue est de 23,32 % à 300K, où $w_{\text{ZnSnN}_2}=1\mu\text{m}$.

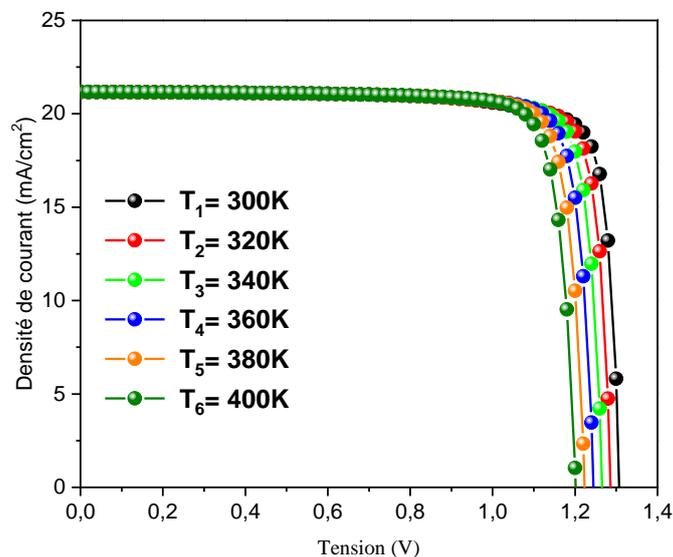


Figure 3.23 J(V) caractéristique pour différentes températures de fonctionnement, où $w_p(w_{\text{ZnSnN}_2})=1\mu\text{m}$.

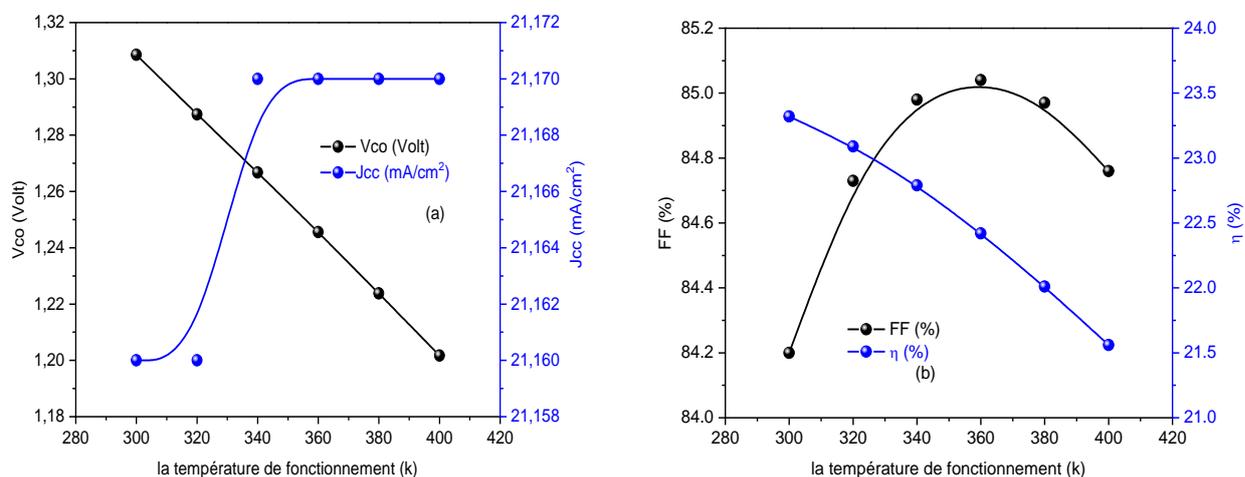


Figure 3.24 (a) Variation du J_{cc} et des V_{co} en fonction de la température de fonctionnement, (b) Variation de l'efficacité (%), et FF (%) en fonction de la température de fonctionnement. Où $w_p(w_{\text{ZnSnN}_2})=1\mu\text{m}$.

Tableau 3.17 : Les effets de la température de fonctionnement sur les paramètres photovoltaïques.

Température (K)	V _{co} (V)	J _{cc} (mA/cm ²)	FF (%)	η (%)
300	1.31	21.16	84.20	23.32
320	1.29	21.16	84.73	23.09
340	1.27	21.17	84.98	22.79
360	1.25	21.17	85.04	22.42
380	1.22	21.17	84.97	22.01
400	1.20	21.17	84.76	21.56

3.3.3.3 Effet de la résistance en série

Le logiciel SCAPS a permis de prendre en compte les pertes liées aux défauts de fabrication, c'est pourquoi nous avons étudié l'effet de la résistance en série malgré l'absence de données expérimentales. La figure 3.25 montre la variation de l'efficacité (%) et FF (%) du nouveau ZnSnN₂ ultra-mince en fonction de la résistance en série R_s à température ambiante. Comme on peut le voir, selon les résultats montrés dans le tableau 3.18 indiquent que l'augmentation de R_s affecte légèrement V_{co} et J_{cc}. En revanche, R_s entraîne une baisse significative de FF (%) et l'efficacité (%). Pour les valeurs 0 Ω cm² et 5 Ω cm², on obtient respectivement 23,32 % et 21,43 %.

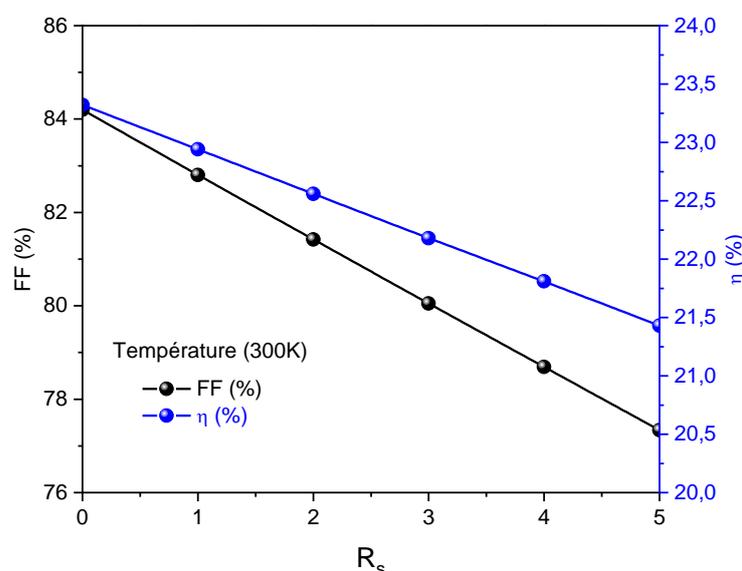


Figure 3.25 Variation de l'efficacité (%) et FF (%) du nouveau ZnSnN₂ ultra-mince en fonction de la résistance en série (R_s).

Tableau 3.18 : Les effets de la résistance en série (R_s) sur les paramètres photovoltaïques.

R_s ($\Omega \cdot \text{cm}^2$)	V_{co} (V)	J_{cc} (mA/cm ²)	FF (%)	η (%)
0	1.31	21.16	84.20	23.32
1	1.31	21.16	82.80	22.94
2	1.31	21.16	81.42	22.56
3	1.31	21.16	80.05	22.18
4	1.31	21.15	78.69	21.81
5	1.31	21.15	77.34	21.43

3.3.3.4 Effets de la densité des défauts dans la cellule solaire ZnSnN₂ à couche ultra-mince

La figure 3.26 montre les caractéristiques simulées $J(V)$ avec et sans état de défaut. La figure 3.27 (a et b) montre les paramètres photovoltaïques (J_{cc} , V_{co} , FF% et l'efficacité %) en fonction de la densité de défauts dans p-ZnSnN₂. Comme on peut le voir, ces paramètres ont diminué lorsque nous avons ajouté les défauts. Cette diminution s'explique par la recombinaison avec les niveaux d'énergie localisés, qui est créée par les défauts qui peuvent causer courant de fuite et qui réduit le rendement. Pour des valeurs de 10^{14} cm^{-3} et 10^{17} cm^{-3} , nous avons trouvé 23,2 % et 15,53 %, respectivement. Ces valeurs ont été testées pour étudier l'effet du défaut sur le rendement de la cellule solaire malgré l'absence de données expérimentales. Le tableau 3.19 montre nos paramètres photovoltaïques basés sur des cellules solaires ultra-minces à structure ZnSnN₂ par rapport aux cellules solaires ultra-minces à structure CIGS, où $w_p = 2 \mu\text{m}$. Comme nous pouvons le voir, la cellule solaire ZnSnN₂ offre plusieurs avantages intéressants en raison de son rendement élevé, comme le montrent le tableau 3.19 et la figure 3.28. Pour une valeur de w_p (ZnSnN₂) = $8 \mu\text{m}$, nous obtenons $\eta = 28,85 \% \sim 30 \%$ (limite Shockley-Quiesser) comme mentionné dans [14].

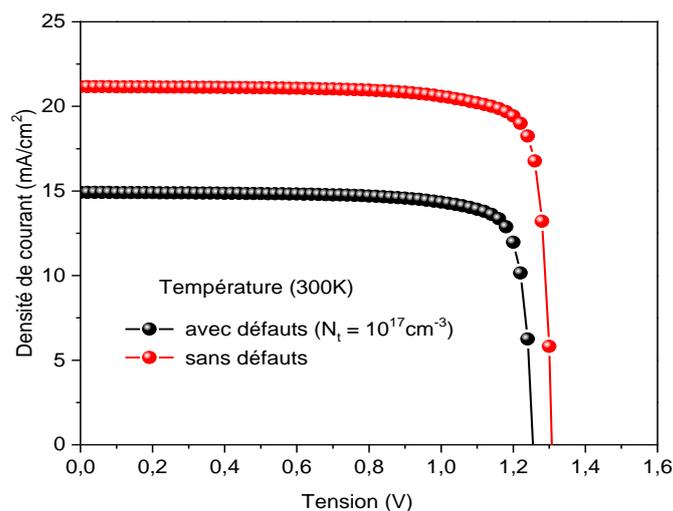


Figure 3.26 $J(V)$ caractéristique du nouveau ZnSnN₂ ultra-mince avec et sans défauts.

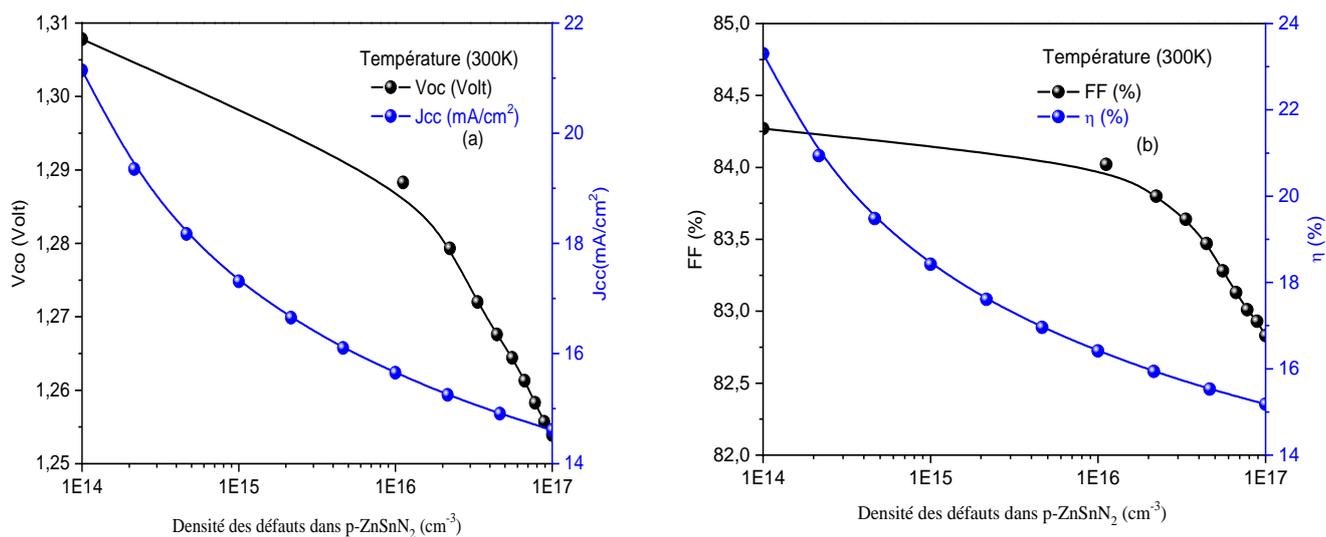


Figure 3.27 (a) Variation de J_{cc} et V_{co} en fonction de la densité des défauts naturels dans la couche p-ZnSnN₂, (b) Variation de l'efficacité (%), et FF (%) en fonction de la densité des défauts naturels dans la couche p-ZnSnN₂.

Tableau 3.19 : Nos paramètres photovoltaïques basés sur la cellule solaire ultra-minces à structure ZnSnN₂ comparées aux cellules solaires ultra-minces à structure CIGS ($w_p=2\mu\text{m}$).

Structure ultramince	V_{co} (V)	J_{cc} (mA/cm ²)	FF (%)	η (%)
ZnSnN ₂	1.32	23.19	84.43	26.03
CIGS [16]	0.74	34.47	83.09	21.3

La figure 3.28 présente les histogrammes correspondant des variations de J_{cc} , V_{co} , et l'efficacité en fonction de l'épaisseur de ZnSnN₂ (w_p) de 1 à 8 μm et $T=300\text{K}$.

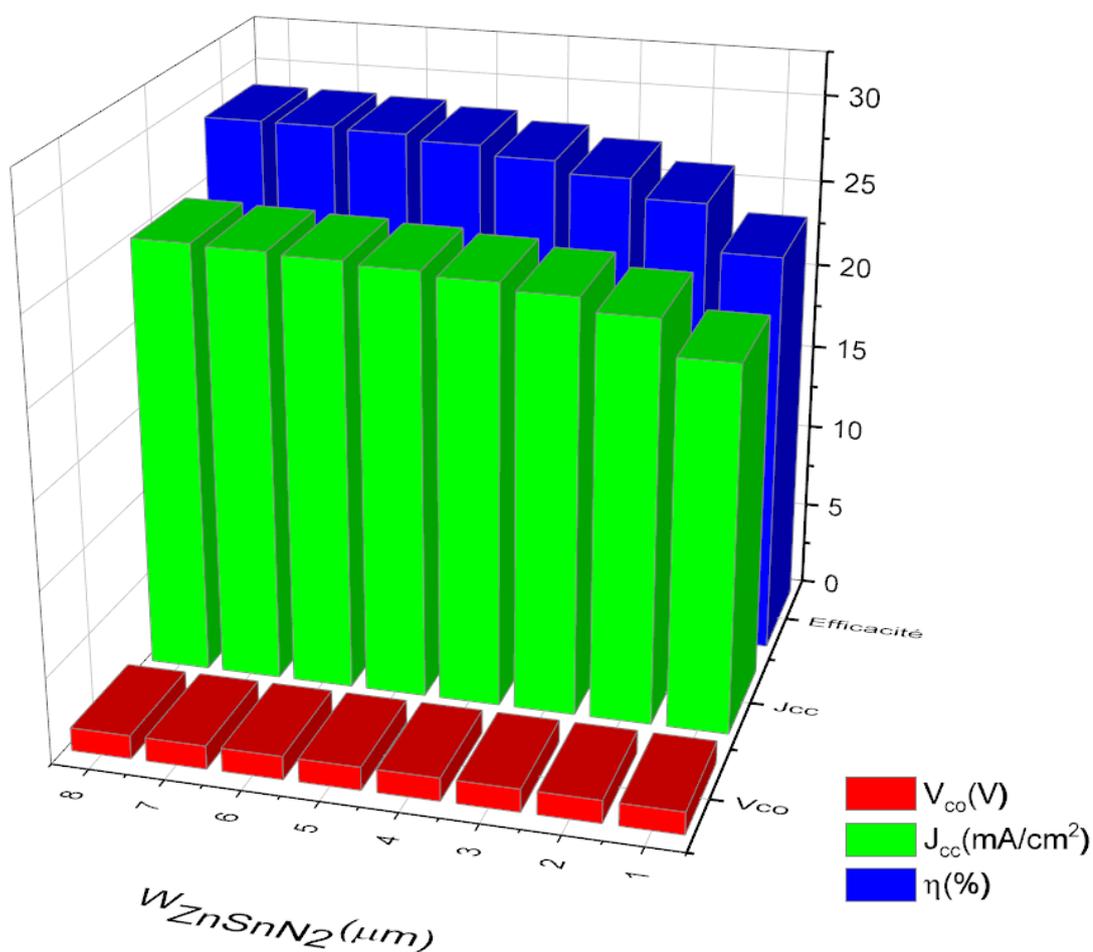


Figure 3.28 Histogrammes des paramètres de performance de la cellule solaire J_{cc} , V_{co} , et l'efficacité en fonction de l'épaisseur de ZnSnN₂ (w_p) de 1 à 8 μm et $T=300\text{K}$.

La figure 3.29 (a ,b et c) résume les résultats finaux, combinés à l'effet de l'épaisseur de la couche absorbante et de la température de fonctionnement .

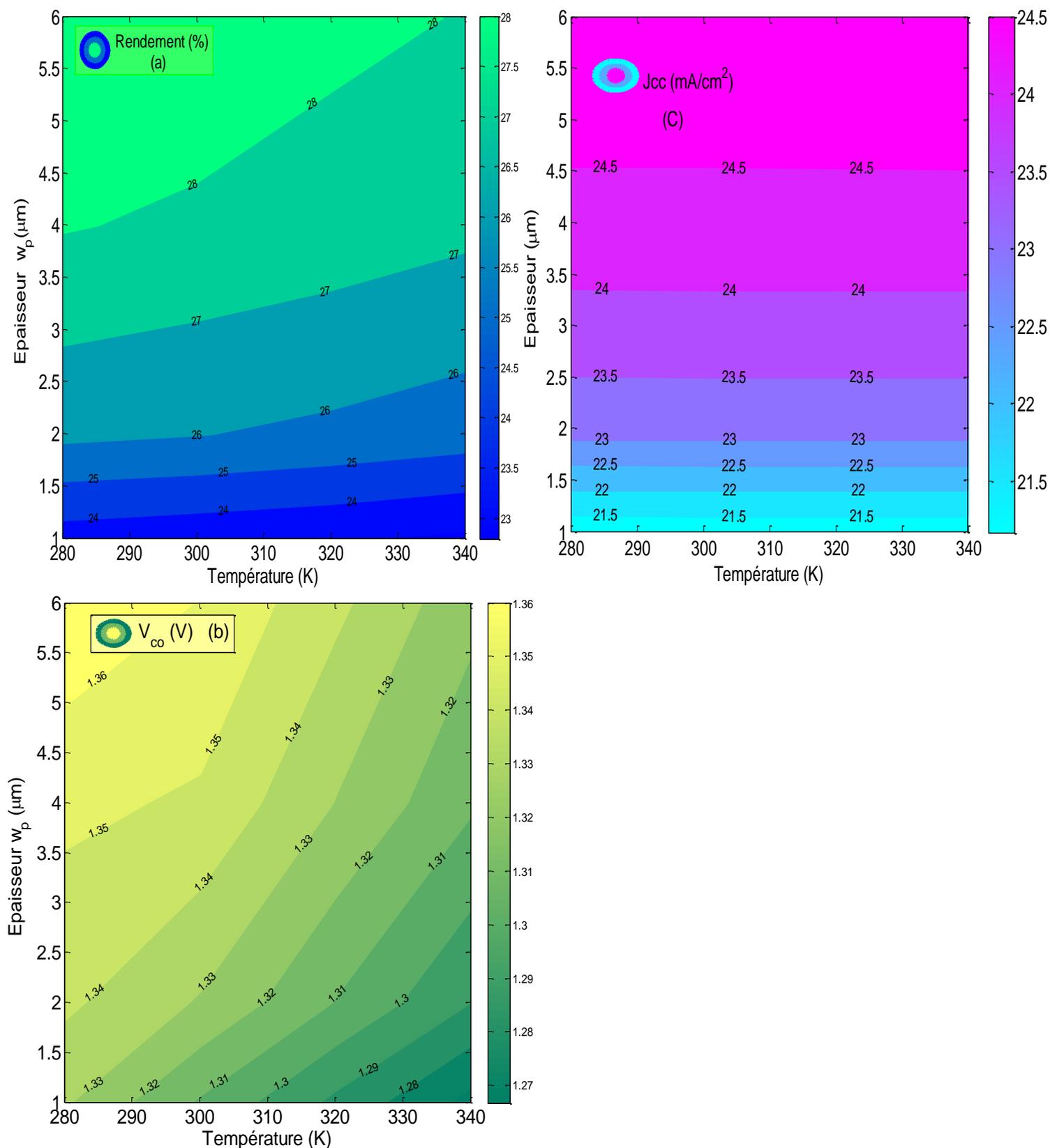


Figure 3.29 (a , b et c) l'effet de l'épaisseur de la couche absorbante ZTN et de la température de fonctionnement sur (a) rendement , (b) V_{co} et (c) J_{cc} .

Nous remarquons sur la figure 3.29, que la couche absorbante et la température de fonctionnement sont bien connues pour affecter les performances des cellules solaires. En conséquence, l'épaisseur de la couche absorbante ZnSnN_2 et la température de fonctionnement ont été augmentées pour améliorer les performances, de 100 nm à 6000 nm (6 μm) et de 280K à 340K, respectivement. Comme le montre la figure 3.29, les paramètres toutes sorties ne sont pas affectés par l'épaisseur de ZnSnN_2 . Par contre, l'augmentation de la température induit une diminution de rendement et de V_{oc} , cette diminution était significative à partir de la température de 280k. Cependant, J_{cc} augmente à mesure que l'épaisseur de la couche absorbante augmente.

3.3.4 Conclusion

En résumé, nous avons étudié l'influence de l'épaisseur de la couche absorbante en ZnSnN_2 , de la température, de la résistance en série (R_s) et de la densité des défauts sur les paramètres électriques des cellules solaires à structure ZnSnN_2 ultra-mince à l'aide du logiciel SCAPS. Toutes les simulations ont été réalisées à température ambiante en utilisant l'irradiation solaire AM1.5G à l'intensité d'un soleil et en considérant la condition de bande plate à l'interface. L'efficacité obtenue dans la présente étude sous différentes valeurs de paramètres optimales qui sont incluses dans le dispositif réel donne une efficacité remarquablement améliorée qui atteint 23,32% sans défaut dans le semi-conducteur ZnSnN_2 .

3.4 Références

- [1] Fioretti, A. N., Boccard, M., Tamboli, A. C., Zakutayev, A., & Ballif, C. (2018). Nitride layer screening as carrier-selective contacts for silicon heterojunction solar cells. *AIP Conference Proceedings*, 1999(1), 040007. <https://doi.org/10.1063/1.5049270>.
- [2] Heriche, H., Rouabah, Z., & Bouarissa, N. (2016). High-efficiency CIGS solar cells with optimization of layers thickness and doping. *Optik*, 127(24), 11751-11757. <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2016.09.071>.
- [3] Quayle, P. C., He, K., Shan, J., & Kash, K. (2013). Synthesis, lattice structure, and band gap of ZnSnN₂. *MRS Communications*, 3(3), 135-138. <https://doi.org/10.1557/mrc.2013.19>.
- [4] Wang, T., Ni, C., & Janotti, A. (2017a). Band alignment and p-type doping of ZnSnN₂. *Physical Review B*, 95(20), 205205. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.95.205205>.
- [5] Arca, E., Fioretti, A., Lany, S., Tamboli, A. C., Teeter, G., Melamed, C., Pan, J., Wood, K. N., Toberer, E., & Zakutayev, A. (2018). Band Edge Positions and Their Impact on the Simulated Device Performance of ZnSnN₂-Based Solar Cells. *IEEE Journal of Photovoltaics*, 8(1), 110-117. <https://doi.org/10.1109/JPHOTOV.2017.2766522>.
- [6] Laidouci, A., Aissat, A., & Vilcot, J. P. (2021). Simulation and Optimization of Cds/ZnSnN₂ Structure for Solar Cell Applications with SCAPS-1D Software. In B. Hajji, A. Mellit, G. Marco Tina, A. Rabhi, J. Launay, & S. E. Naimi (Éds.), *Proceedings of the 2nd International Conference on Electronic Engineering and Renewable Energy Systems* (p. 211-222). Springer. https://doi.org/10.1007/978-981-15-6259-4_21.
- [7] Deng, F., Cao, H., Liang, L., Li, J., Gao, J., Zhang, H., Qin, R., & Liu, C. (2015). Determination of the basic optical parameters of ZnSnN₂. *Optics Letters*, 40(7), 1282-1285. <https://doi.org/10.1364/OL.40.001282>.
- [8] Mebarkia, C., Dib, D., Zerfaoui, H., & Belghit, R. (2016). Energy efficiency of a photovoltaic cell based thin films CZTS by SCAPS. *Journal of Fundamental and Applied Sciences*, 8(2), 363-371. <https://doi.org/10.4314/jfas.v8i2.13>.
- [9] Arbouz, H., Aissat, A., & Vilcot, J. P. (2016). Modeling and optimization of CdS/CuIn_{1-x}Ga_xSe₂ structure for solar cells applications. *International Journal of Hydrogen Energy*, 41(45), 20987-20992. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.06.104>.
- [10] Laidouci, A., Aissat, A., & Vilcot, J. P. (2020). Numerical study of solar cells based on ZnSnN₂ structure. *Solar Energy*, 211, 237-243. <https://doi.org/10.1016/j.solener.2020.09.025>.

- [11] Arbouz, Hayat. (2019). Simulation des structures photovoltaïques à base des matériaux absorbeurs CIGS et CZTS [Thesis, univ-blida1]. <http://di.univ-blida.dz:8080/jspui/handle/123456789/9083>.
- [12] Thao, T. T., Trung, T. Q., Truong, V.-V., & Dinh, N. N. (2015). Enhancement of Power Efficiency and Stability of P3HT-Based Organic Solar Cells under Elevated Operating-Temperatures by Using a Nanocomposite Photoactive Layer. *Journal of Nanomaterials*, 2015, e463565. <https://doi.org/10.1155/2015/463565>.
- [13] Singh, P., & Ravindra, N. M. (2012). Analysis of series and shunt resistance in silicon solar cells using single and double exponential models. *Emerging Materials Research*, 1(1), 33-38. <https://doi.org/10.1680/emr.11.00008>.
- [14] Fioretti, A. N. (2016). Development of zinc tin nitride for application as an earth abundant photovoltaic absorber [Text, Colorado School of Mines]. <https://mountainscholar.org/handle/11124/172032>.
- [15] Qin, R., Cao, H., Liang, L., Xie, Y., Zhuge, F., Zhang, H., Gao, J., Javaid, K., Liu, C., & Sun, W. (2016). Semiconducting ZnSnN₂ thin films for Si/ZnSnN₂ p-n junctions. *Applied Physics Letters*, 108(14), 142104. <https://doi.org/10.1063/1.4945728>.
- [16] Heriche, H., Rouabah, Z., & Bouarissa, N. (2017). New ultra thin CIGS structure solar cells using SCAPS simulation program. *International Journal of Hydrogen Energy*, 42(15), 9524-9532. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2017.02.099>.
- [17] Coronel, N. C. (2016). Earth-Abundant Zinc-IV-Nitride Semiconductors [Phd, California Institute of Technology]. <https://doi.org/10.7907/Z9CF9N28>.

Chapitre 4 SIMULATIONS DES CELLULES SOLAIRES A BASE DE $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$ ET DE $\text{ZnGe}_x\text{Sn}_{1-x}\text{N}_2$ A L'AIDE DE LOGICIEL SILVACO TCAD

4.1.1 Introduction

Dans ce travail, nous nous intéressons à la modélisation et à la simulation des cellules solaires à base de p-i-n $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$ et de p-i-n $\text{ZnGe}_x\text{Sn}_{1-x}\text{N}_2$ en utilisant SILVACO TCAD dans le but de montrer les effets de nombre de puits quantique, la concentration et de la température sur les paramètres caractéristiques de la cellule solaire étudiée sans pris en compte les phénomènes de polarisation dans la structure wurtzite.

4.1.2 Structure des cellules solaires p-i-n à base de $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$

La figure 4.1 (a) représente la structure de la cellule solaire p-i-n ZnSnGeN_2 utilisée dans cette simulation [1]. Le diagramme schématique de l'actuelle cellule solaire à puits quantiques $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2 / \text{GaN}$ est illustré à la figure 4.1 (b) les barrières de 50 périodes de puits quantiques $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$ (3 nm) / GaN (6 nm) sont prises en sandwich entre les types p et n de couches de GaN. Ainsi que le $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}$ est la couche de blocage des électrons (**Electron-Blocking-Layer**). Elle fournit une barrière de potentiel suffisante, de sorte que les électrons sont confinés dans la bande de conduction. [1]

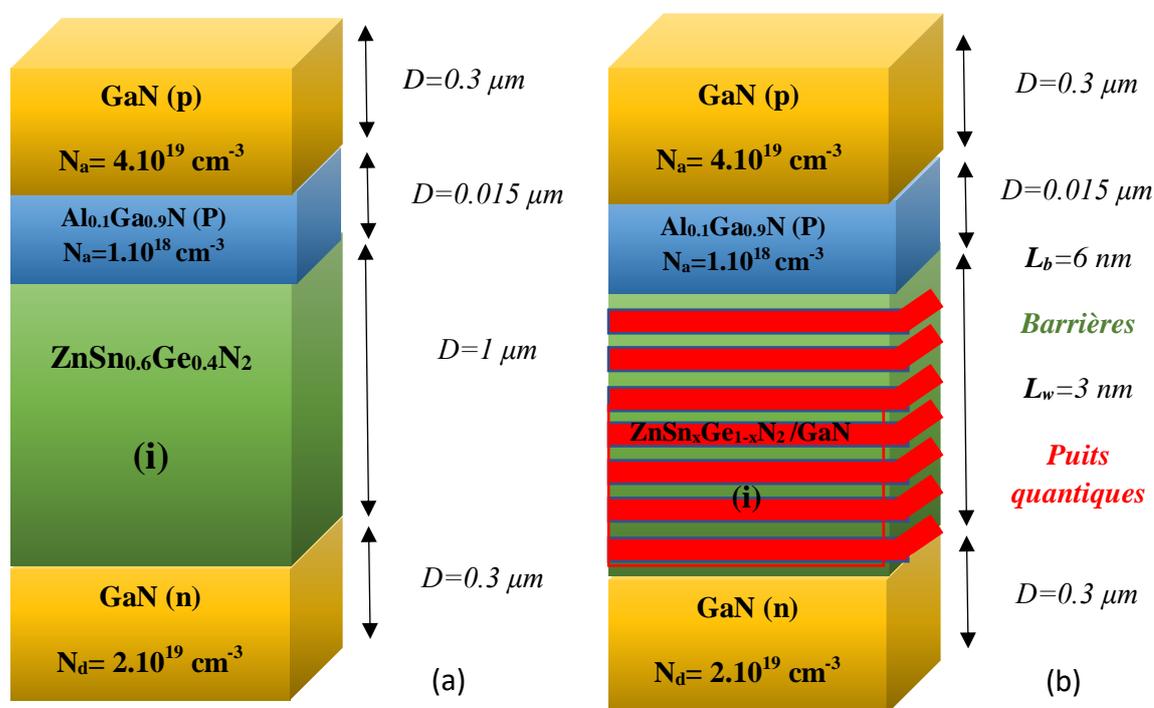


Figure 4.1 (a) Structure de la cellule solaire p-i-n ZnSnGeN_2 . (b) Structure de la cellule solaire à puits quantiques $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2 / \text{GaN}$.

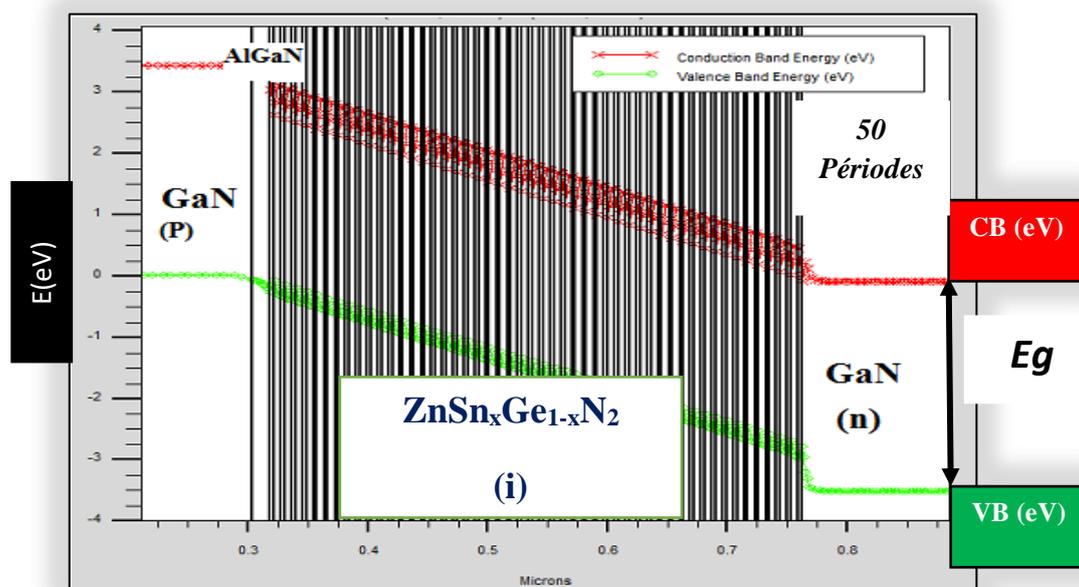


Figure 4.2 Diagramme de bande de $ZnSn_xGe_{1-x}N_2/GaN$ avec 50 périodes de puits quantiques.

4.1.3 Résultats et discussions

Dans cette section de l'étude, les paramètres d'entrée utilisés dans la simulation sont indiqués dans les tableaux 4.1 (a) et (b). Ainsi que toutes les simulations ont été effectuées à une température de 300K et sous un spectre solaire AM1.5G.

Tableaux 4.1. (a) et (b) : Paramètres physiques utilisés dans la simulation [2-9].

(a)

Matériaux	ZnSnN ₂	ZnGeN ₂
E _g (eV) à 0K	1.497	3.36
α (meV/K)	0.71	4.54
β (K)	488	4850
n_i (cm ⁻³) à 300K	$6.041 \cdot 10^3$	$2.715 \cdot 10^{-10}$
m_e^* (m ₀) à 300K	0.12	0.15
m_h^* (m ₀) à 300K	1.79	1.90
μ_e (cm ² /Vs) à 300K	0.3-10	0.5-20
μ_h (cm ² /Vs) à 300K	/	/

(b)

Matériaux	ZnSn _x Ge _{1-x} N ₂
E _g (eV) à 300 K	1.7-3.4
N _c (cm ⁻³) à 300K	$(1.047-1.464)10^{18}$
N _v (cm ⁻³) à 300K	$(6.035-6.600)10^{19}$
χ (eV)	(4.1-5.1)
ξ (statique)	(15-10)

4.1.3.1 L'effet de la concentration d'étain

La figure 4.3 montre la variation de l'énergie de la bande interdite et de déformation de la structure $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$ sur un substrat GaN en fonction de la concentration en étain (Sn). Nous avons remarqué que lorsque la concentration d'étain augmente, l'énergie de la bande interdite diminue. Pour une concentration $x = 0,1$, l'énergie de la bande interdite est égale à 3,2 eV, avec une déformation égale à 1,44%, si l'on augmente la concentration d'étain jusqu'à 0,50 l'énergie de la bande interdite est égale à 2,4 eV avec la déformation égale à 3,3%. $\Delta E_g = 0,8$ eV diminue. La structure devient comme un matériau à large bande interdite.

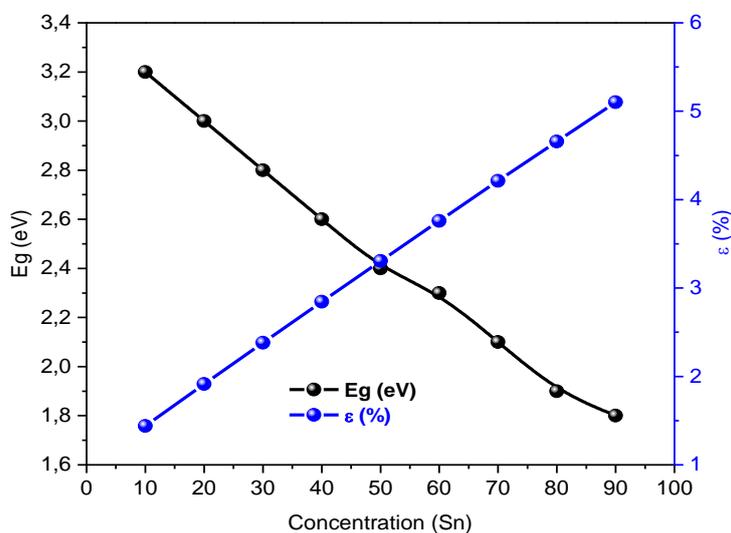


Figure 4.3 Variation de la bande interdite et de la déformation de la structure $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$ sur substrat GaN en fonction de la concentration en étain Sn.

La figure 4.4 montre la variation de l'épaisseur critique en fonction de la concentration d'étain, lorsque la concentration d'étain est supérieure à 50% de l'épaisseur critique $L_c < 100\text{\AA} = 10\text{nm}$, cette étude nous a permis d'utiliser une faible épaisseur de couche active de puits quantique composée de $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$, donc L_w doit $< 10\text{nm}$ car c'est la limite de la structure pour entrer dans la zone où la dislocation aura lieu et ainsi perdre sa stabilité.

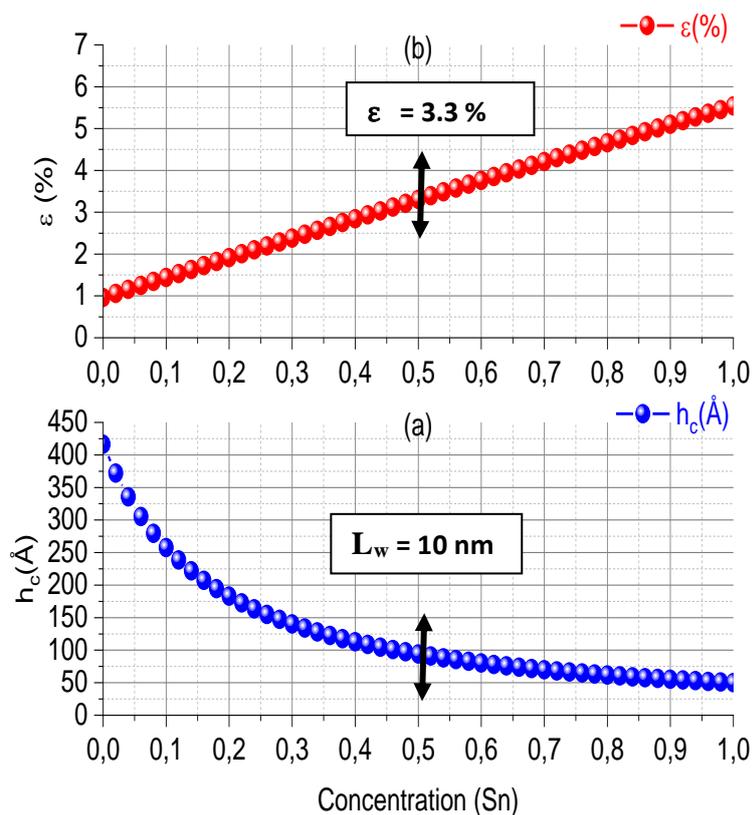


Figure 4.4 (a) Variation de l'épaisseur critique et (b) la déformation de la structure $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$ sur substrat GaN en fonction de la concentration en étain (Sn).

La figure 4.5 montre la variation de l'efficacité quantique externe EQE en fonction de la longueur d'onde pour différentes concentrations d'étain. L'augmentation de la concentration d'étain induit une augmentation de l'amplitude de l'efficacité quantique externe avec un rétrécissement de la largeur spectrale EQE. Pour absorber le maximum du spectre solaire, la structure doit avoir une efficacité externe maximale. L'efficacité externe maximale égale à 13,20%, correspond à une concentration d'étain $\text{Sn} = 60\%$, pour une longueur d'onde d'environ 700 nm.

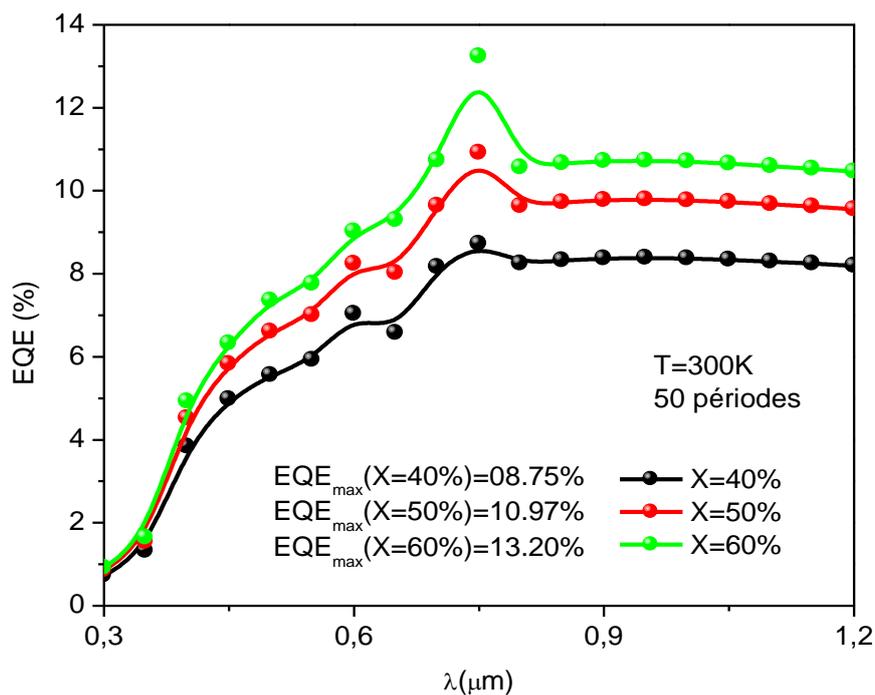


Figure 4.5 Variation de l'EQE en fonction de la longueur d'onde pour différentes concentrations d'étain (Sn %) dans l'alliage $ZnSn_xGe_{1-x}N_2$.

La figure 4.6 (a) illustre la variation de la densité de courant J (V) de cellule solaire $ZnSn_xGe_{1-x}N_2$ pour différentes concentrations d'étain Sn. Lorsque la concentration d'étain augmente, la tension V_{co} diminue considérablement mais la densité de courant de court-circuit J_{cc} augmente, par exemple pour Sn = 60% on a $V_{co} = 1,865$ V avec une densité de courant $J_{cc} = 9,23$ mA /cm². (b) montre la variation de puissance de sortie de la cellule solaire basée sur la tension pour différentes concentrations d'étain. L'augmentation de la concentration d'étain conduit à une augmentation de la puissance maximale délivrée par la cellule. Pour une concentration d'étain Sn = 60%, la puissance maximale est de 12,62 mW/cm² (AM1,5G).

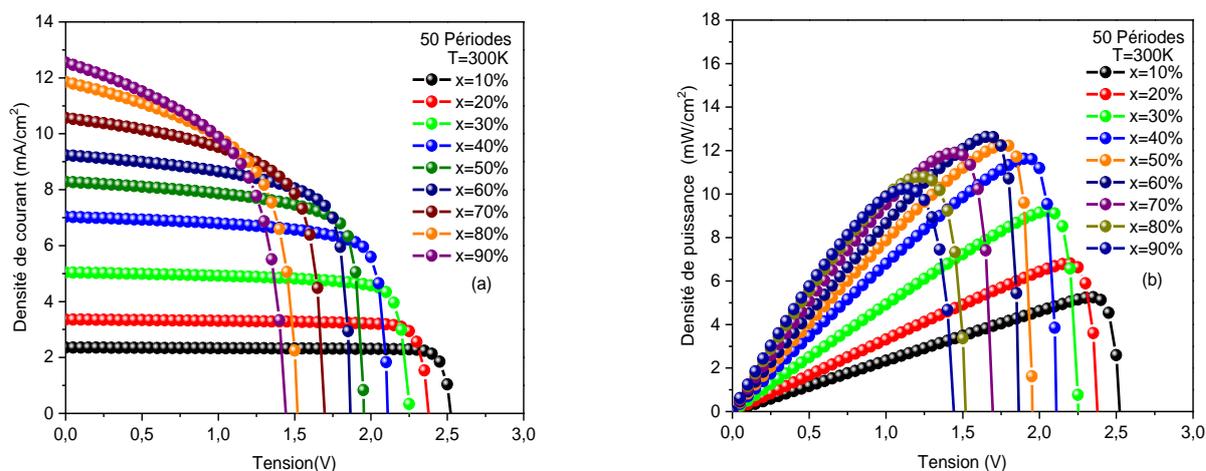


Figure 4.6 (a) Variation de la densité de courant en fonction de la tension pour différentes concentrations d'étain. (b) Variation de la puissance en fonction de la tension pour différentes concentrations d'étain (Sn%).

Tableaux 4.2 (a) et (b) : Présentent les résultats de la simulation du $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2 / \text{GaN}$.

- (a) Effet de la concentration d'étain

x (%)	V _{co} (V)	J _{cc} (mA/cm ²)	FF (%)	η (%)	E _g (eV)	ε	ε (%)
x=10%	2,52	2,35	88,47	5,25	3,2	-0,0144	1,44
x=20%	2,38	3,35	85,24	6,8	3	-0,01913	1,913
x=30%	2,25	5,04	81,18	9,22	2,8	-0,02382	2,382
x=40%	2,11	7,02	78,36	11,62	2,6	-0,02845	2,845
x=50%	1,95	8,28	75,75	12,25	2,4	-0,03305	3,305
x=60%	1,87	9,23	73,29	12,62	2,3	-0,0376	3,76
x=70%	1,70	10,56	66,39	11,9	2,1	-0,04211	4,211
x=80%	1,52	11,86	59,92	10,79	1,9	-0,04658	4,658
x=90%	1,44	12,54	56,68	10,25	1,8	-0,05101	5,101

- (b) p-i-n avec 50 périodes

Pour x=60%	V _{co} (V)	J _{cc} (mA/cm ²)	FF (%)	η (%)
50 périodes	1,87	9,23	73,29	12,62
p-i-n	1,65	7,89	37,53	4,89

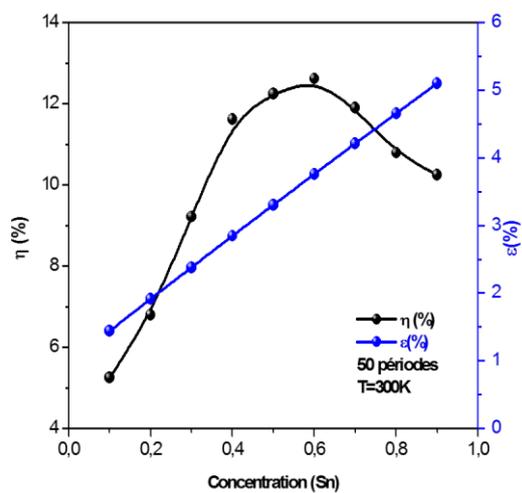
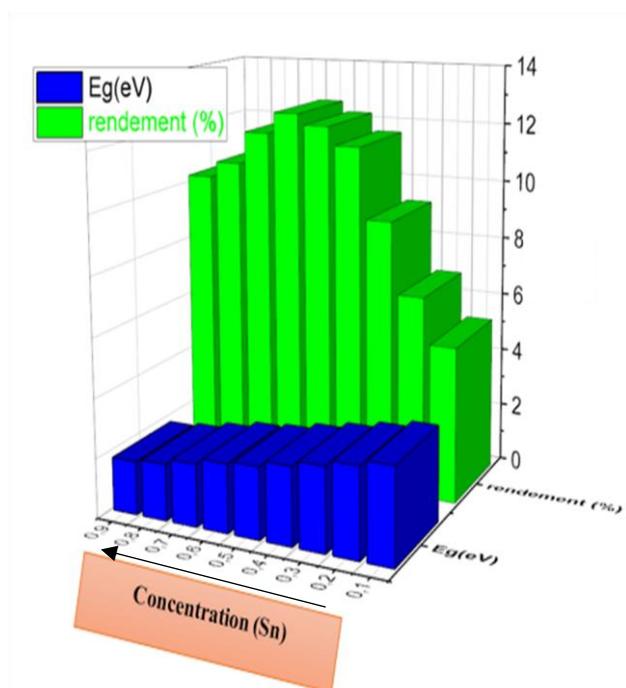
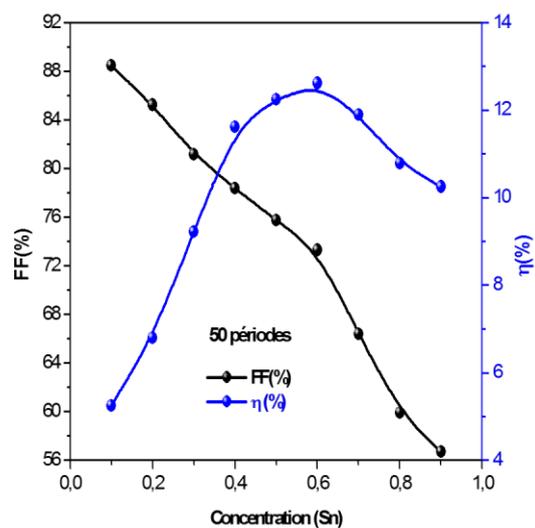
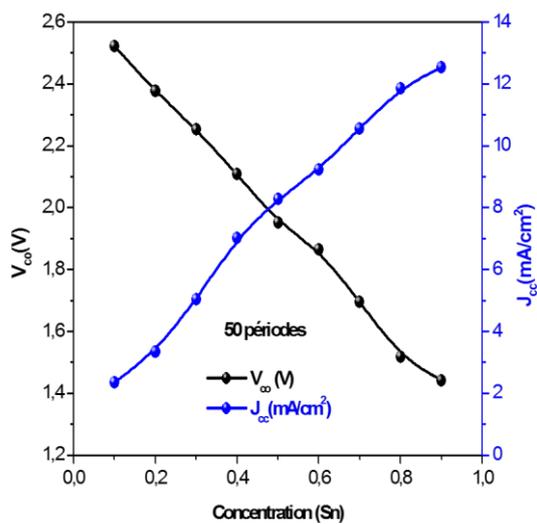


Figure. 4.7 Effets de la concentration d'étain (Sn%).

D'après le tableau 4.2 et la figure 4.7, il est clair que la densité de courant de court-circuit et l'efficacité augmentent avec l'augmentation de la teneur en étain dans la structure $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2/\text{GaN}$.

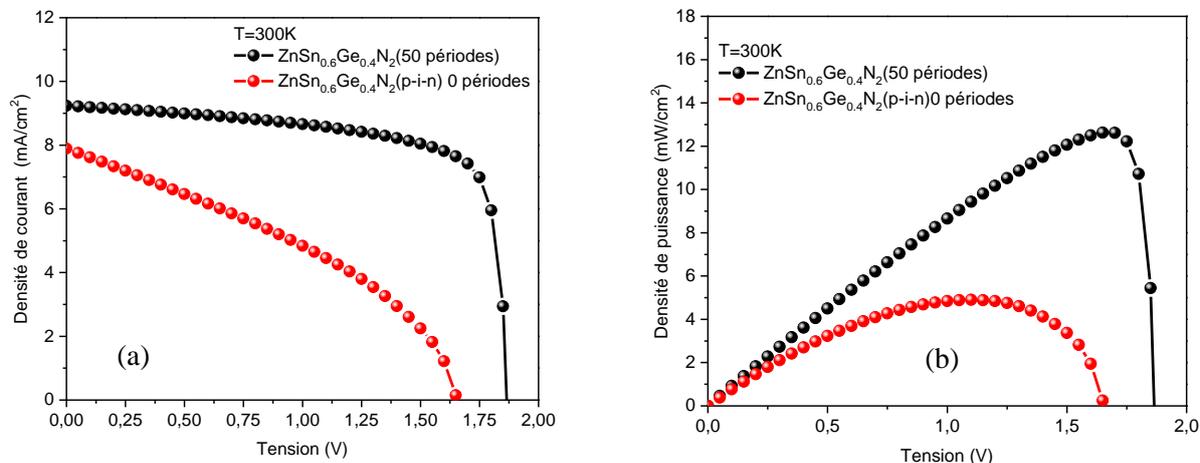


Figure 4.8 (a, b) La variation de la densité de courant et de la puissance en fonction de la concentration d'étain pour deux structures p-i-n (pour 0 et 50 périodes)

La figure 4.8 (a, b) montrent la variation de la densité de courant et de la puissance en fonction de la concentration d'étain pour deux structures p-i-n, la première est basée sur le $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$ et la seconde sur le puits quantique $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$.

Nous avons remarqué que la densité de courant J_{cc} et la puissance de la structure $\text{ZnSn}_{0.6}\text{Ge}_{0.4}\text{N}_2$ sont respectivement de 7,89 mA/cm² et 4,98 mW/cm². Lorsqu'elles sont incorporées à 50 périodes de puits quantiques dans la région d'appauvrissement de la structure $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$, la densité de courant et la puissance maximale deviennent $J_{cc} = 9,23\text{mA/cm}^2$ et $P_{max} = 12,62\text{ mW/cm}^2$. L'efficacité entre les deux structures passe de 4,89 à 12,62% (AM1,5). Ainsi, nous avons obtenu un gain de 7,64% (Tableau 4.2 (b)).

4.1.3.2 L'effet de la température de fonctionnement

Tableau 4.3 : Effets de la température de fonctionnement sur les paramètres photovoltaïques.

Pour x=60%	V _{co} (V)	J _{cc} (mA/cm ²)	FF (%)	η (%)
Température(K)				
280	1,92	9,92	73,56	13,99
300	1,87	9,23	73,29	12,62
320	1,81	8,53	72,83	11,25
340	1,76	7,89	72,22	10,02
360	1,70	7,41	71,44	9,01
380	1,64	7,02	70,68	8,14

Figure 4.9 montre les caractéristiques J (V) pour différentes températures de fonctionnement. Dans le photovoltaïque, le V_{co} est le plus affecté en raison de la dépendance du courant inverse de saturation qui est fonction de la température et par conséquent de la diminution du rendement. Les résultats sont présentés sur la figure 4.9, la figure 4.10 et le tableau 4.3, confirment ces résultats. Comme déjà mentionnée dans chapitre 03 sur l'effet de la température.

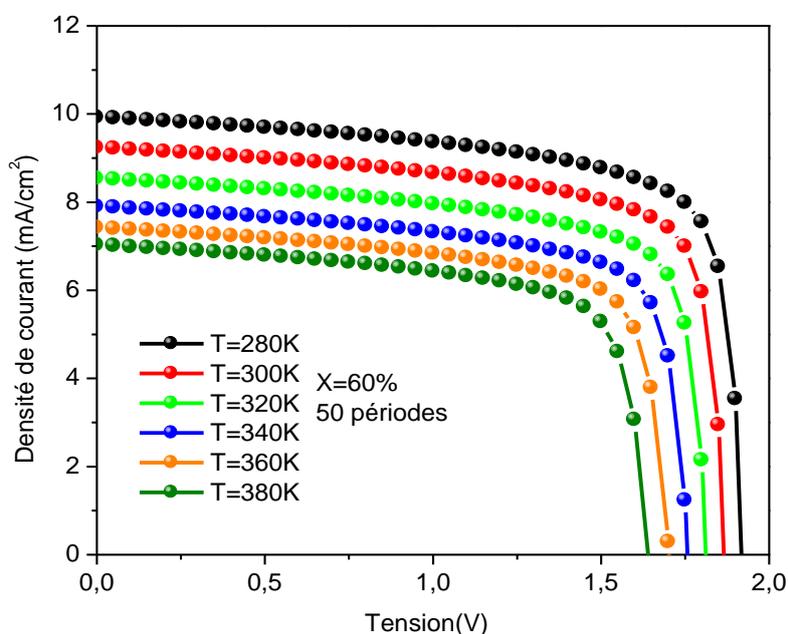


Figure 4.9 Caractéristiques J (V) pour différentes températures de fonctionnement.

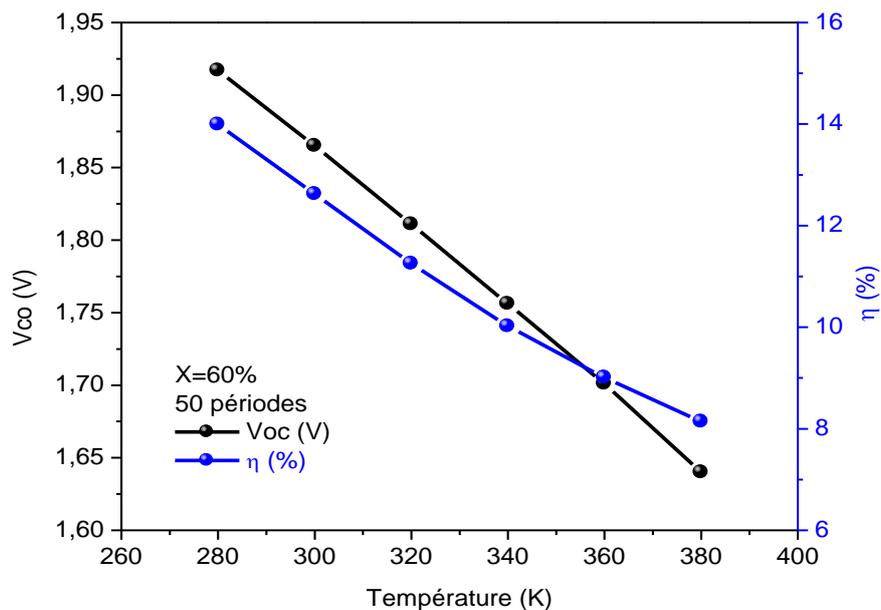


Figure 4.10 Variation du V_{co} (V) et de l'efficacité η (%) en fonction de la température de fonctionnement pour $x=60\%$ et 50 périodes.

4.1.3.3 L'effet de nombre de puits quantiques (N périodes)

Tableaux 4.4 (a) et (b) : Les paramètres caractéristiques d'une cellule solaire p-i-n et d'un puits quantique $ZnSn_{0.6}Ge_{0.4}N_2$ / GaN pour un certain nombre de couches ou périodes de puits différents par rapport à p-i-n $ZnSn_{0.6}Ge_{0.4}N_2$.

(a) N périodes

NQWs	V_{co} (V)	J_{cc} (mA/cm ²)	FF (%)	η (%)
$In_{0.35}Ga_{0.65}N/GaN$	2,340	0,89	37,45	0,78
0 [10]				
0 ($x=60\%$)	1,65	7,89	37,53	4,89
10($x=60\%$)	1,87	10,60	72,41	14,39
30($x=60\%$)	1,87	9,44	72,86	12,85
50 ($x=60\%$)	1,87	9,23	73,29	12,62

(b) 10 à 50 périodes

$x=60\%$ N périodes	V_{co} (V)	J_{cc} (mA/cm ²)	FF (%)	η (%)
10	1,87	10,60	72,41	14,39
30	1,87	9,44	72,86	12,85
50	1,87	9,23	73,29	12,62

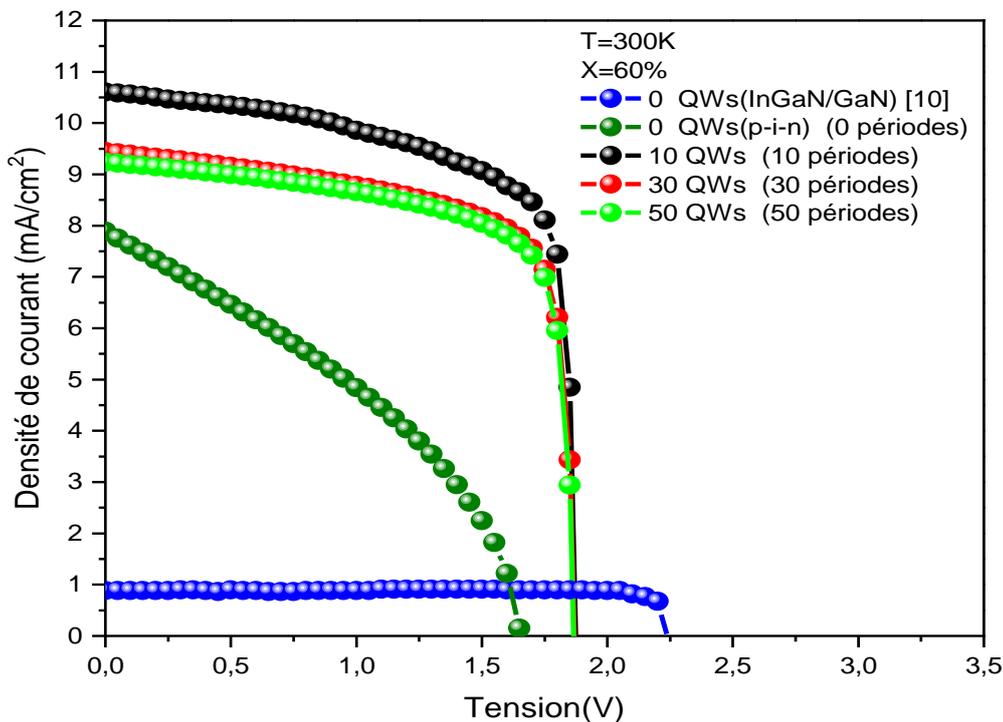


Figure 4.11 J (V) Cellule solaire à puits quantique de $\text{ZnSn}_{0.6}\text{Ge}_{0.4}\text{N}_2 / \text{GaN}$, nombre de couches du puits = 0, 10, 30 et 50.

La figure 4.11 et le tableau 4.4 montrent la variation de la densité-tension de courant et le rendement de la cellule en fonction de la tension appliquée pour différents nombres du puits quantique. Comme on peut le voir, une efficacité maximale pour 10 couches puits quantiques avec $\eta = 14,39\%$ obtenue, au-delà de ce nombre, l'efficacité commence à diminuer à $12,62\%$, en raison du nombre élevé de pièges disponibles dans la région active (multi-puits quantique) qui a rendu le taux de recombinaison domine le taux de génération des porteurs.

4.1.4 Conclusion

Dans ce travail, nous avons étudié et simulé les structures $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2 / \text{GaN}$ et $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$ à puits quantiques. Nous avons pris en compte les effets de la concentration d'étain et de la température sur la déformation, l'énergie de la bande interdite, les caractéristiques courant-tension, la puissance de sortie maximale et le rendement. Nous avons obtenu pour une

concentration d'étain $\text{Sn} = 60\%$, l'énergie de bande interdite optimale égale à 2,3 eV avec une déformation de 3,76%. La structure optimale pour 50 puits quantiques fournit une EQE d'efficacité quantique externe de 13,20% avec $J_{\text{cc}} = 9.23 \text{ mA/cm}^2$ et rendement d'environ 12,62%. L'incorporation du multi-puits quantique dans la région active se traduit par une augmentation de l'efficacité des cellules solaires. Dans un second temps, nous avons étudié l'effet du nombre de puits quantiques sur les caractéristiques de la cellule solaire, un rendement maximal pour 10 couches du puits quantiques avec $\eta = 14,39\%$ obtenu, au-delà de ce nombre, le rendement commence à diminuer à 12,62%.

4.2.1 Simulation des cellules solaires p-i-n à base de $\text{ZnGe}_x\text{Sn}_{1-x}\text{N}_2$

Le développement et l'amélioration de nouveaux matériaux semiconducteurs est le but principal de la recherche courante dû au marché rapidement croissant, qui a par conséquent mené des chercheurs à découvrir des systèmes avec des nanostructures de basse dimensionnalité par exemple en tenant compte des effets de confinement quantique telles que les puits quantiques, les fils quantiques et les boîtes quantiques, qui consiste en insertion des matériaux avec différentes bandes interdites, et la taille de ces nanostructures doit être petite comparée à la longueur d'onde de Broglie, ceci permet l'absorption de photons de faible d'énergie et améliore donc l'efficacité de conversion.[11-12] Nous croyons que le $\text{ZnGe}_x\text{Sn}_{1-x}\text{N}_2$ comme le $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$ également sera un matériau alternative à $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ pour l'usage dans les dispositifs photovoltaïques.

4.2.2 Structure des cellules solaires p-i-n à base de $\text{ZnGe}_x\text{Sn}_{1-x}\text{N}_2$

Le diagramme schématique d'une cellule solaire à puits quantique $\text{ZnGe}_{0,3}\text{Sn}_{0,7}\text{N}_2/\text{GaN}$ est montré dans (la figure 4.12). Le $\text{ZnGe}_{0,3}\text{Sn}_{0,7}\text{N}_2/\text{GaN}$ puits quantique sont serrés entre les couches de GaN de type n et de type p et les couches fenêtres $\text{Al}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{N}$ pour, les épaisseurs des puits et les barrières sont 5nm et 15nm respectivement, nous avons employé un GaN comme substrat (nous pouvons également employer le saphir comme substrat [13-16]).

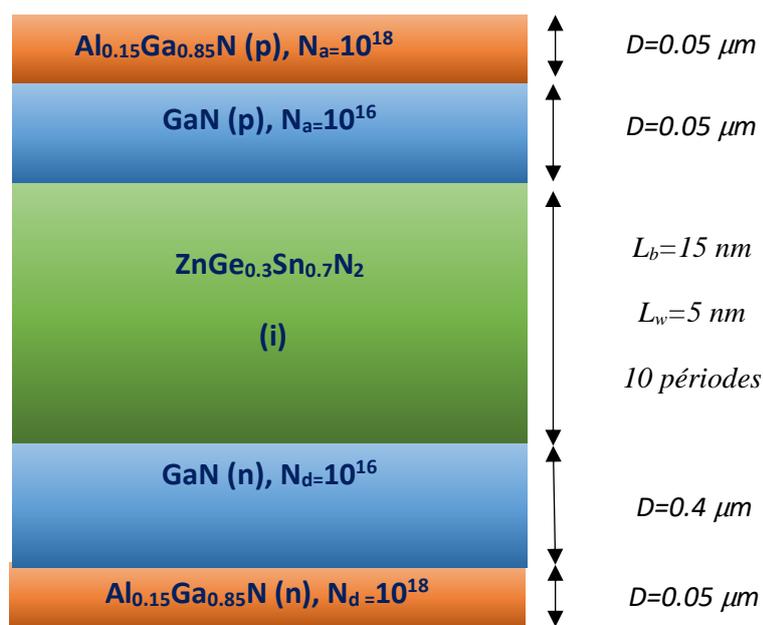


Figure 4.12 Structure de la cellule solaire à puits quantiques $\text{ZnGe}_{0,3}\text{Sn}_{0,7}\text{N}_2/\text{GaN}$.

4.2.3 Résultats et discussions

Toutes les simulations ont été effectuées sous un spectre solaire AM1.5G.

4.2.3.1 L'effet de la température de fonctionnement

Dans ce travail, nous avons étudié l'effet de la température sur les paramètres de la caractéristique de la cellule à puits quantiques $\text{ZnGe}_{0,3}\text{Sn}_{0,7}\text{N}_2/\text{GaN}$ avec 10 périodes. Toutes les simulations ont été effectuées à la température ambiante en utilisant l'irradiance AM1.5 solaire à l'intensité de l'un soleil. La figure 4.13 montre la variation de la bande interdite et la variation de contrainte pour différent concentration de germanium pour l'alliage $\text{ZnGe}_x\text{Sn}_{1-x}\text{N}_2$, nous pouvons voir que la gamme optimale de Ge % est inférieure de 40 %, nous notons également qu'il y a une contrainte simple (contrainte compressive). Selon cette simulation, nous ait choisi une concentration de 30 % de germanium ce qui nous donne un meilleur accord $E_g=2\text{eV}$ et $\varepsilon=4\%$.

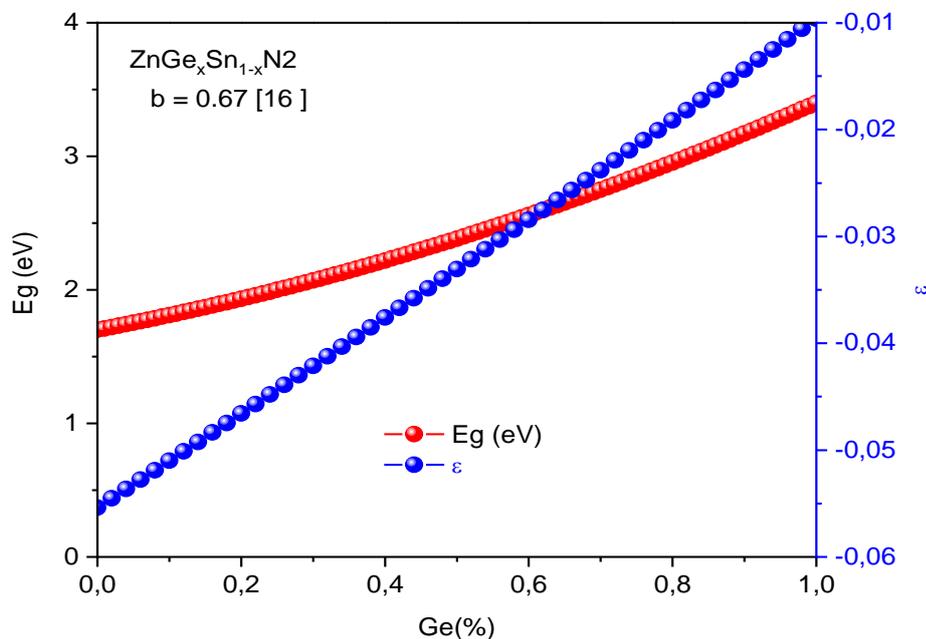


Figure 4.13 Variation de la bande interdite et de la déformation de la structure $\text{ZnGe}_x\text{Sn}_{1-x}\text{N}_2$ sur substrat GaN en fonction de la concentration en germanium (Ge).

La figure 4.14 (a et b) montrent la variation de la caractéristique $J(V)$ de la cellule solaire étudiée et $P(V)$ la puissance émise en fonction de la tension appliquée pour différentes valeurs de la température de fonctionnement. Il peut voir que l'effet de la température est remarquable sur J_{cc} et V_{co} . À 300K (27°C), les résultats de la température ont prouvé que la cellule fournit la densité de courant de court-circuit de $J_{cc}=1,68 \text{ mA/cm}^2$ et une tension ouverte de $V_{CO}=2,10\text{V}$. On peut conclure que l'augmentation de la température de notre cellule solaire présente une dégradation remarquable de la tension de circuit ouvert et une légère augmentation du courant de court-circuit. Cette influence est expliquée par l'augmentation forte du courant inverse de saturation en fonction de la température et la diminution de la largeur de la bande interdite. En effet, les figures ci-dessous confirment ces résultats.

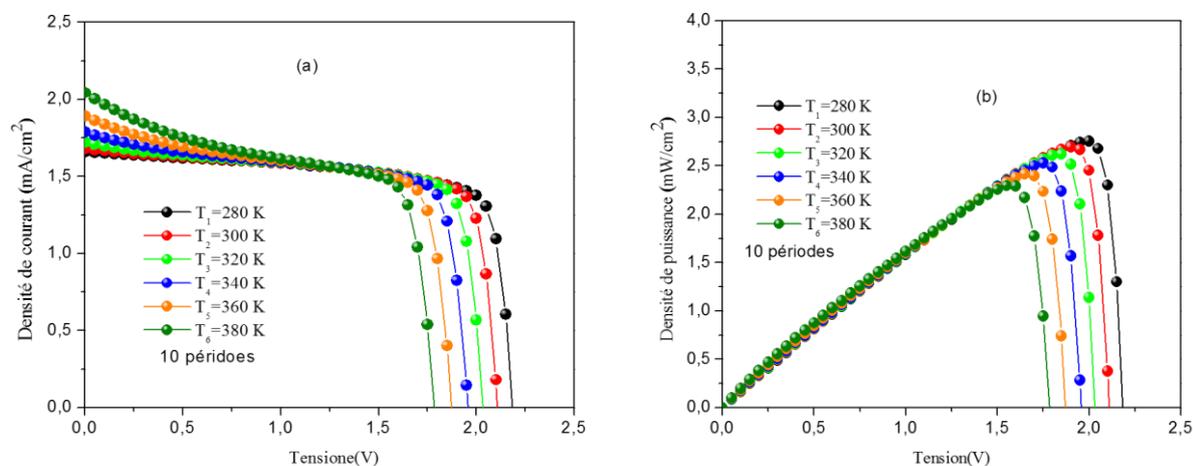


Figure 4.14 (a) $J(V)$ de la cellule $\text{ZnGe}_{0,3}\text{Sn}_{0,7}\text{N}_2/\text{GaN}$ avec 10 périodes en fonction de la température de fonctionnement . (b) $P(V)$ de la cellule $\text{ZnGe}_{0,3}\text{Sn}_{0,7}\text{N}_2/\text{GaN}$ avec 10 périodes en fonction de la température de fonctionnement.

La figure 4.15 (a et b) montrent la variation de paramètres caractéristiques de la cellule solaire $\text{ZnGe}_{0,3}\text{Sn}_{0,7}\text{N}_2/\text{GaN}$ avec 10 périodes sous différentes températures, car on lui montre une augmentation de la température menée à une diminution d'efficacité de conversion. Il est clair que la température réduit la largeur de la bande interdite qui conduisent à contribuer à la création de plus de porteurs de charges (donc J_{cc} augmente). Par contre, V_{co} et FF diminuent avec l'augmentation de la température. Les résultats de la cellule sont montrés dans le tableau 4.5.

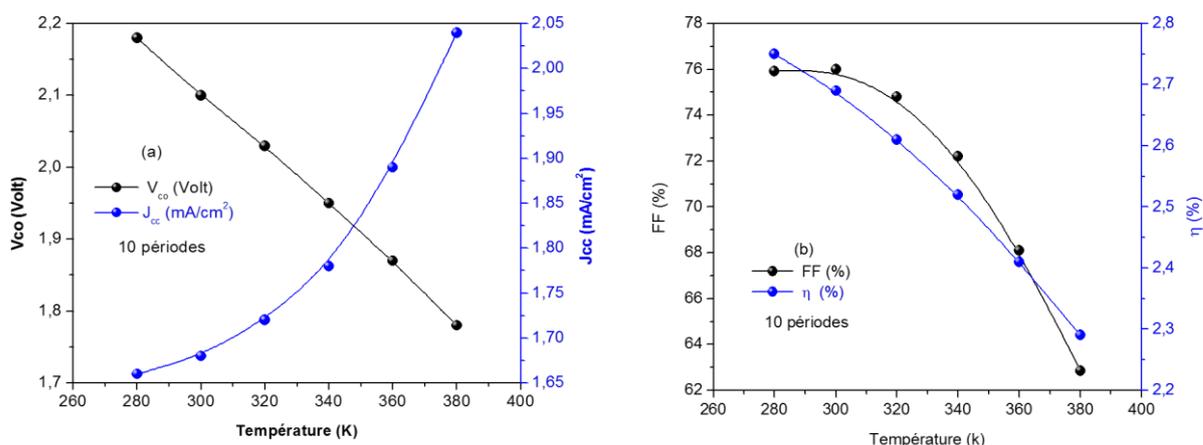


Figure 4.15 (a) Variation de courant de court-circuit et la tension de circuit ouvert en fonction de la température de fonctionnement . (b) Evolution du rendement de conversion et le facteur de remplissage en fonction de la température de fonctionnement.

Tableau 4.5 : Paramètres caractéristiques d'une cellule à puits quantiques ZnGe_{0.3}Sn_{0.7}N₂/GaN avec 10 périodes pour différente température.

Température (K)	V _{co} (V)	J _{cc} (mA/cm ²)	FF (%)	η (%)
280	2.18	1.66	75.92	2.75
300	2.10	1.68	75.99	2.69
320	2.03	1.72	74.81	2.61
340	1.95	1.78	72.19	2.52
360	1.87	1.89	68.10	2.41
380	1.78	2.04	62.86	2.29

Le tableau 4.6 récapitule les résultats de simulation de la cellule solaire ZnGe_{0.3}Sn_{0.7}N₂/GaN à puits quantiques et les résultats de la structure InGaN/GaN à puits quantiques pour 10 périodes.

Tableau 4.6 : Paramètres photovoltaïques d'une cellule solaire à puit quantique d'InGaN/GaN avec 10 périodes comparées avec nos résultats (à 300K)

Température (27°C)	Nos résultats (10 périodes)	InGaN/GaN 10 périodes [17]
J _{cc} (mA/cm ²)	1.68	0.21
V _{co} (V)	2.10	2.81
η (%)	2.69	5.63

4.2.4 Conclusion

Nous avons vu que l'absence de la symétrie dans la structure wurtzite dans les matériaux II-IV-N₂ comme les nitrures III-N, signifie que ces nouveaux matériaux sont des matériaux polaires. Ainsi que les matériaux II-IV-N₂ avec une structure wurtzite possèdent deux types de polarisation : (a) spontanée et (b) piézoélectrique qu'ils jouent un rôle important dans les dispositifs optoélectroniques comme les cellules photovoltaïques et les LED. Dans ce travail, nous avons étudié l'effet de la température sur les caractéristiques de la cellule solaire en utilisant les puits quantiques (QWs). Les résultats indiquent qu'une augmentation de la température mène à une diminution d'efficacité de conversion. De ce travail, nous pouvons conclure que le ZnGe_xSn_{1-x}N₂ comme le ZnSn_xGe_{1-x}N₂ sera un matériau alternatif important à In_xGa_{1-x}N et également peut être employé dans plusieurs dispositifs optoélectroniques telle que les diodes luminescentes pour les LEDs et les matériaux absorbeurs pour le photovoltaïques.

4.3 Références

- [1] Aissat, A., Arbouz, H., Nacer, S., Benyettou, F., & Vilcot, J. P. (2016). Efficiency optimization of the structure pin-InGaN/GaN and quantum well-InGaN for solar cells. *International Journal of Hydrogen Energy*, 41(45), 20867-20873. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.06.028>.
- [2] Martinez, A. D., Fioretti, A. N., Toberer, E. S., & Tamboli, A. C. (2017). Synthesis, structure, and optoelectronic properties of II–IV–V₂ materials. *Journal of Materials Chemistry A*, 5(23), 11418-11435. <https://doi.org/10.1039/C7TA00406K>.
- [3] Sato, H., Muraba, Y., Iimura, S., Hiramatsu, H., Tanaka, I., ... Oba, F. (2016). Discovery of earth-abundant nitride semiconductors by computational screening and high-pressure synthesis. *Nature Communications*, 7(1), 11962. <https://doi.org/10.1038/ncomms11962>.
- [4] Fioretti, A. N., Pan, J., Ortiz, B. R., Melamed, C. L., Dippo, P. C., Schelhas, L. T., Perkins, J. D., Kuciauskas, D., Lany, S., Zakutayev, A., Toberer, E. S., & Tamboli, A. C. (2018). Exciton photoluminescence and benign defect complex formation in zinc tin nitride. *Materials Horizons*, 5(5), 823-830. <https://doi.org/10.1039/C8MH00415C>.
- [5] Misaki, T., Tsuchiya, K., Sakai, D., Wakahara, A., Okada, H., & Yoshida, A. (2003). Growth and Characterization of ZnGeN₂ by Using Remote-Plasma Enhanced Metalorganic Vapor Phase Epitaxy. *Physica Status Solidi (c)*, n/a(1), 188-191. <https://doi.org/10.1002/pssc.200390019>.
- [6] Paudel, T. R., & Lambrecht, W. R. L. (2008). First-principles study of phonons and related ground-state properties and spectra in Zn-IV-N₂ compounds. *Physical Review B*, 78(11), 115204. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.78.115204>.
- [7] Jaroenjittichai, A. P., Lyu, S., & Lambrecht, W. R. L. (2017). Erratum: Band offsets between ZnGeN₂, GaN, ZnO, and ZnSnN₂ and their potential impact for solar cells [Phys. Rev. B 88, 075302 (2013)]. *Physical Review B*, 96(7), 079907. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.96.079907>.
- [8] Laidouci, A., Aissat, A., & Vilcot, J. P. (2020). Numerical study of solar cells based on ZnSnN₂ structure. *Solar Energy*, 211, 237-243. <https://doi.org/10.1016/j.solener.2020.09.025>.

- [9] Bernard Gil. (2013). III-Nitride Semiconductors and their Modern Devices. In III-Nitride Semiconductors and their Modern Devices. Oxford University Press. <https://oxford.universitypressscholarship.com/view/10.1093/acprof:oso/9780199681723.001.0001/acprof9780199681723>.
- [10] Aissat, A., & Vilcot, J. P. (2019). Improvement in carrier dynamics in $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ multi-quantum well for solar cell applications. *Journal of Optics*, 48(3), 324-331. <https://doi.org/10.1007/s12596-019-00536-y>.
- [11] Li, Z., Jiang, H., Xu, C., & Gu, L. (2015). A review : Using nanoparticles to enhance absorption and bioavailability of phenolic phytochemicals. *Food Hydrocolloids*, 43, 153-164. <https://doi.org/10.1016/j.foodhyd.2014.05.010>.
- [12] Edman Jonsson, G., Fredriksson, H., Sellappan, R., & Chakarov, D. (2011). Nanostructures for Enhanced Light Absorption in Solar Energy Devices. *International Journal of Photoenergy*, 2011, e939807. <https://doi.org/10.1155/2011/939807>.
- [13] Harchouch, Nabila, Aissat, A., Laidouci, A., & Vilcot, J. P. (2017). Temperature Effect on GaSb/GaAs Quantum Dots Solar Cell. 2017 International Renewable and Sustainable Energy Conference (IRSEC), 1-4. <https://doi.org/10.1109/IRSEC.2017.8477268>.
- [14] Harchouch, N., Aissat, A., Laidouci, A., & Vilcot, J. P. (2018). Temperature Effect on InGaN/GaN Multiwell Quantum Solar Cells Performances. In M. Hatti (Éd.), *Artificial Intelligence in Renewable Energetic Systems* (p. 492-498). Springer International Publishing. https://doi.org/10.1007/978-3-319-73192-6_52.
- [15] Laidouci, A., Aissat, A., & Vilcot, J. P. (2018). Temperature Effect on $\text{ZnGeN}_2/\text{GaN}$ Multiwell Quantum Solar Cells. 2018 6th International Renewable and Sustainable Energy Conference (IRSEC), 1-5. <https://doi.org/10.1109/IRSEC.2018.8702863>.
- [16] Laidouci, A., Aissat, A., & Vilcot, J. P. (2019). Temperature Effect on $\text{ZnGe}_x\text{Sn}_{1-x}\text{N}_2/\text{GaN}$ Multiwell Quantum Solar Cells. 2019 7th International Renewable and Sustainable Energy Conference (IRSEC), 1-5. <https://doi.org/10.1109/IRSEC48032.2019.9078284>.

[17] Yassine, S., & AbdelKader, N. (2014). Simulation study of InGaN/GaN multiple quantum well solar cells. *Journal of New Technology and Materials*, 4(1), 9-10. <https://www.asjp.cerist.dz/en/article/2289>.

CONCLUSION GENERALE

Dans ce travail de thèse, nous avons effectué des simulations sur les cellules solaires à base de nouveaux matériaux (II-IV-N₂). Dans ce contexte, nous avons adopté plusieurs modèles mathématiques et physiques permettant de détermination des caractéristiques optiques, mécaniques et électriques de ces nouveaux matériaux.

Dans la première partie de la thèse, nous avons présenté une introduction bibliographique au travail de thèse. Nous avons soulevé la question de l'abondance des matériaux et du manque de certains éléments sur terre malgré leurs présences dans plusieurs dispositifs optoélectroniques. Ensuite, nous avons présenté également les différentes technologies photovoltaïques en cours de développement, mais nous voulons utilisés les technologies vertes qui peuvent être écologique donc plus respectueux de l'environnement, c'est-à-dire moins polluantes. Ce qui nous a motivé à utiliser des matériaux du bon marché qui contiennent des matériaux avec des éléments abondants, non toxique et peu couteux avec des caractéristiques optoélectroniques intéressantes.

Dans une deuxième partie, nous avons présenté les grandeurs caractéristiques et les paramètres physiques et fonctionnels d'une cellule photovoltaïques. Ce chapitre est consacré à l'étude des propriétés physiques : optiques, mécaniques et électroniques des semiconducteurs (II-IV-N₂). Les paramètres optiques, mécaniques et électroniques des alliages et de leur dépendance à la composition sont très importants. Dans ce contexte, nous utilisons généralement des lois d'interpolation (quadratique ou linéaire). Pour cela, nous avons utilisé une loi empirique (la loi de Vegard). Nous avons montré que les matériaux (II-IV-N₂) présentaient un bon coefficient d'absorption ($\alpha \sim 10^5 \text{ cm}^{-1}$), ainsi que la variation du gap non contraint de l'alliage ZnSn_xGe_{1-x}N₂ (II-IV-N₂) est plus linéaire et sa modulation plus simple que l'alliage In_xGa_{1-x}N (III-V). Nous avons étudié également la qualité cristalline de l'alliage ZnSn_xGe_{1-x}N₂ pour les deux systèmes (orthorhombique et wurtzite) en fonction de la concentration d'étain (Sn), de l'épaisseur de la couche (épaisseur critique) et du substrat (GaN ou Si_{1-y}Ge_y). D'après les résultats la meilleure zone de travail pour l'alliage ZnSn_xGe_{1-x}N₂ (système wurtzite) épitaxie sur un substrat de GaN est pour x compris entre 0% et 30% (correspond à $\epsilon \sim 2\%$), et pour l'alliage ZnSn_xGe_{1-x}N₂ (système orthorhombique) épitaxie sur un substrat de Si_{1-y}Ge_y est pour $y=0.1+1.7x$ (correspond à $\epsilon=0$).

Dans la troisième partie, des structures de cellules solaires à base de nouveau matériau ZnSnN₂ ont été étudié, comparé et optimisé avec des résultats théoriques disponible à l'aide de

logiciel SCAPS-1D pour la validation malgré la rareté des données expérimentales, car il est jusqu'à présent, les recherches sur ces nouveaux matériaux sont en cours. Une bonne corrélation des résultats a été observé concernant le dispositif à base de jonction (p-CuCrO₂ / n-ZnSnN₂). En deuxième étape, le CIGS (I-III-VI₂) est remplacé par le ZnSnN₂ dans la cellule solaire ultra-mince en ZnSnN₂/Si pour éviter la toxicité de l'indium, du sélénium et d'éléments coûteux comme le gallium, ainsi que le record de rendement de conversion $\eta=26.03\%$ par rapport à la cellule CIGS pour $w_p=2\ \mu\text{m}$. Enfin, à ce niveau-là, le but a été de simuler des structures à base de ZnSnN₂ et d'optimiser les paramètres physiques et géométriques afin d'atteindre les performances pour l'obtention d'un meilleur rendement et aussi la stabilité de dispositif optoélectronique.

Enfin, dans le dernier chapitre, nous avons présenté la modélisation et la simulation des cellules conventionnelles (p-i-n) à base de l'alliage ZnSn_xGe_{1-x}N₂ à l'aide de logiciel SILVACO-TCAD en tenant compte l'effet d'insertion de puits quantiques dans la région intrinsèque. Nous avons pris en compte les effets de la concentration d'étain et de la température sur la déformation, l'énergie de la bande interdite, les caractéristiques J-V, P-V et le rendement. Nous avons vu que l'utilisation de la couche de blocage d'électron ou EBL d'Al_{0.1}Ga_{0.9}N (**E**lectron-**B**locking-**L**ayer) fournit une barrière de potentiel suffisantes pour que les électrons confinés dans la bande de conduction, ainsi que le GaN comme un matériau substrat et barrière (≡ faible déformation + effet de confinement) donc un très bon choix comme les nitrures dans les cellules solaires et les LED à base de nanostructures. Nous avons vu que le nombre de couches ou périodes maximal à ne pas dépasser 10 périodes pour avoir un meilleur rendement, nous avons obtenu un rendement 14.39% a été atteint à un taux d'étain 60% et à température ambiante 300K (27°C).

Les perspectives de ce travail sont nombreuses :

- Des LED à base de ZnSnN₂.
- Des LED à base de ZnGeN₂.
- Des LED à base de l'alliage ZnSn_xGe_{1-x}N₂.
- Des cellules solaires à base de ZnSnN₂ tandem avec le silicium (comme top cell).
- Des cellules solaires à base de l'alliage ZnSn_xGe_{1-x}N₂.

PUBLICATIONS ET CONFERENCES

PUBLICATIONS

- [1] **Laidouci, A.**, Aissat, A., & Vilcot, J. P. (2020). Numerical study of solar cells based on ZnSnN₂ structure. *Solar Energy*, 211, 237-243. <https://doi.org/10.1016/j.solener.2020.09.025>.

CONFERENCES

- [2] **Laidouci, A.**, Aissat, A., & Vilcot, J. P. (2021). Simulation and Optimization of CdS/ZnSnN₂ Structure for Solar Cell Applications with SCAPS-1D Software. In B. Hajji, A. Mellit, G. Marco Tina, A. Rabhi, J. Launay, & S. E. Naimi (Éds.), *Proceedings of the 2nd International Conference on Electronic Engineering and Renewable Energy Systems* (p. 211-222). Springer. https://doi.org/10.1007/978-981-15-6259-4_21. (**Springer**)
- [3] **Laidouci, A.**, Aissat, A., & Vilcot, J. P. (2019). Temperature Effect on ZnGe_xSn_{1-x}N₂ /GaN Multiwell Quantum Solar Cells. 2019 7th International Renewable and Sustainable Energy Conference (IRSEC), 1-5. <https://doi.org/10.1109/IRSEC48032.2019.9078284>. (**IEEE**)
- [4] **Laidouci, A.**, Aissat, A., & Vilcot, J. P. (2018). Temperature Effect on ZnGeN₂/GaN Multiwell Quantum Solar Cells. 2018 6th International Renewable and Sustainable Energy Conference (IRSEC), 1-5. <https://doi.org/10.1109/IRSEC.2018.8702863>. (**IEEE**)
- [5] Harchouch, N., Aissat, **A.**, **Laidouci, A.**, & Vilcot, J. P. (2018). Temperature Effect on InGaN/GaN Multiwell Quantum Solar Cells Performances. In M. Hatti (Éd.), *Artificial Intelligence in Renewable Energetic Systems* (p. 492-498). Springer International Publishing. https://doi.org/10.1007/978-3-319-73192-6_52. (**Springer**)
- [6] Aissat, A., Bahi Azzououm, A., Benyettou, F., & **Laidouci, A.** (2018). Optimization of Copper Indium Gallium Diselenide Thin Film Solar Cell (CIGS). In M. Hatti (Éd.), *Artificial Intelligence in Renewable Energetic Systems* (p. 479-485). Springer International Publishing. https://doi.org/10.1007/978-3-319-73192-6_50. (**Springer**)
- [7] Harchouch, Nabila, Aissat, **A.**, **Laidouci, A.**, & Vilcot, J. P. (2017). Temperature Effect on GaSb/GaAs Quantum Dots Solar Cell. 2017 International Renewable and Sustainable Energy Conference (IRSEC), 1-4. <https://doi.org/10.1109/IRSEC.2017.8477268>. (**IEEE**)

Annexe A

Tableau 1.1 : Résultats cristallographiques de ZnSnN₂ dans les travaux précédents.

Structure	Paramètre calculé (Å)			Paramètre expérimental (Å)		
	a	b	c	a	b	c
Orthorhombique	6.76	5.85	5.58	-	-	-
	6.76	5.85	5.58			
	6.59	5.70	5.41	-	-	-
Orthorhombique	6.70	5.80	5.53			
Monoclinique	-	-	-	3.395	3.400	5.534
				$\alpha=89.885^\circ$	$\beta=90.033^\circ$	$\gamma=120.036^\circ$
Orthorhombique	-	-	-	5.842	6.753	5.462
Orthorhombique	-	-	-	6.755	5.846	5.473
Orthorhombique	6.721	5.842	5.459	-	-	-
Orthorhombique	-	-	-	5.853	6.741	5.498
Wurtzite	-	-	-	-	-	-
Orthorhombique	-	-	-	6.721	5.842	5.459
Wurtzite	-	-	-	6.755	5.846	5.473
Wurtzite	-	-	-	-	-	-
Orthorhombique	6.812	5.914	5.542	6.885	5.955	5.557
Wurtzite	-	-	-	3.366	3.366	5.842
Orthorhombique	-	-	-	5.842	6.753	5.464
Wurtzite	-	-	-	3.376	3.376	5.467
Wurtzite	-	-	-	-	-	-
Wurtzite	-	-	-	6.885	5.955	5.577
Orthorhombique	-	-	-	3.366	3.366	5.842
Orthorhombique	6.82	5.91	5.54	-	-	-
Wurtzite	-	-	-	3.366	3.366	5.842

Tableau 1.2 : Résultats de la bande interdite de ZnSnN₂ dans les travaux précédents.

Bande interdite (eV)	Méthode de calcul	Méthode expérimentale	Structure
2.02	QSGW	-	Orthorhombique
2.0	DFT	-	Orthorhombique
2.1	-	Transmittance	Monoclinique
2.09	DFT	-	Orthorhombique
1.12	DFT	-	Monoclinique
2.12-2.38		Transmittance	Orthorhombique
1.7	-	Photoluminescence (PL)	Orthorhombique
1.42	Fonctionnel hybride DFT	-	Orthorhombique
2.0	-	Ellipsométrie spectroscopique	Orthorhombique
1.8	QSGW	-	Orthorhombique
1.9	-	Ellipsométrie spectroscopique	Orthorhombique
1.0	-	Spectromètres UV-Visible-NIR	Wurtzite
1.81	QSGW	-	Orthorhombique
1.4	-	Transmittance	Ortho /Wurtzite
1.64	-	-	Wurtzite
1.75	DFT	-	Orthorhombique
2.62	PBE0	-	Orthorhombique

Tableau 1.3 : Paramètres de maille du ZnGeN₂ référencés dans la littérature pour la maille orthorhombique.

Structure	Forme	a (Å)	b (Å)	c (Å)	Référence
Orthorhombique	Poudre	5.454	6.441	5.194	Wintenberger et al.
	Bulk	5.4715	6.4580	5.2004	Endo et al.
	Poudre	5.454	6.441	5.124	Viennois et al.
	Film	5.50	6.44	5.14	Misaki et al.
	Poudre	5.4461	6.4355	5.1889	Zhang et al.
	Film			5.24	Coronel et al.
	Aiguille	5.476	6.441	5.194	Blanton et al.
	Poudre	5.4638	6.4447	5.1816	Shang et al.
	Film			5.25	Coronel et al.
	Poudre	5.46677	6.44640	5.19080	Häusler et al.

Tableau 1.4 : Paramètres de maille du ZnGeN₂ référencés dans la littérature pour une maille hexagonale ou monoclinique.

Structure	Forme	a (Å)	c (Å)	φ	Référence
Monoclinique	Poudre	3.167	5.194	118°53'	Maunaye et al.
Wurtzite	Film	3.193	5.187		Larson et al.
Hexagonale	Film	3.213	5.191		Kikkawa et al.
Wurtzite	Film	3.186	5.174		Zhu et al.
Monoclinique	Aiguille	3.157	5.137	119°30'	Du et al.
		3.19	5.12	119°30'	
Wurtzite	Aiguille	3.213	5.20		Peshek et al.
Wurtzite	Aiguille	3.194	5.196		Blanton et al.
Wurtzite (GaN)		3.189	5.186		

Tableau 1.5 : Bande interdite de ZnGeN₂ mesurée dans la littérature.

Méthode	E _g (eV)	Référence
Absorption optique	2.67	Larson et al.
Absorption optique	3.1	Kikkawa al.
Absorption optique	3.2	Osinky al.
Photoluminescence	3.25	Viennois et al.
Absorption optique	3.0-3.3	Misaki et al.
Photoluminescence	3.3	
Absorption optique	3.16	Muth et al.
Photoluminescence	3.4	Du et al.
Réflexion diffuse	3.3	Zhang et al.
Réflexion diffuse	3.5	Shang et al.
Photoluminescence	3.6	
Absorption optique	3.1	Coronel et al.
Réflexion diffuse	3.2	Häusler et al.
	3.39	GaN

Table 1.6 : Le nombre de degrés de liberté D_f (freedom) dans le mouvement d'électron, en même temps que les directions de confinement D_c (confinement), pour les quatre de bases systèmes de dimensionnalité.

Système	Directions de confinement (D _c)	Degrés de liberté (D _f)
Matériau massif	0	3
Puits quantiques	1	2
Fils quantiques	2	1
Boîtes quantiques	3	0

Tableau 1.7 : La dimensionnalité des matériaux comme degrés de liberté, de la relation de dispersion et de la densité correspondante des états et de densité efficace des états à la bande de conduction en semi-conducteurs bas-dimensionnels.

Degré de liberté	Dispersion (énergie cinétique)	Densité d'états (BC)	Densité d'états effective (BC)
3D (Matériau massif)	$E(k) = \frac{\hbar^2}{2m^*} (K_x^2 + K_y^2 + K_z^2)$	$\rho_{3D} = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} (E - E_c)^{\frac{1}{2}}$	$N_c^{3D} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{KTm^*}{\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}$
2D (puits quantiques)	$E(k) = \frac{\hbar^2}{2m^*} (K_x^2 + K_y^2)$	$\rho_{2D} = \sum_{i=1}^n \frac{m^*}{\pi\hbar^2} H(E - E_c)$	$N_c^{2D} = \frac{KTm^*}{\pi\hbar^2}$
1D (fils quantiques)	$E(k) = \frac{\hbar^2}{2m^*} (K_x^2)$	$\rho_{1D} = \frac{1}{\hbar\pi m^*} \left(\frac{m^*}{2(E - E_c)}\right)^{\frac{1}{2}}$	$N_c^{1D} = \left(\frac{KTm^*}{2\pi\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}}$
0D (boîtes quantiques)	$E(k) = /$ (pas de périodicité)	$\rho_{0D} = 2\delta(E - E_c)$	$N_c^{0D} = 2$

Annexe B

Tableau B.1 : Paramètres physiques [1-3]

Matériaux	ZnSnN ₂	ZnGeN ₂	GaN
Paramètre de maille : a _w (Å)	3.3	3.22	3.189
Paramètre de maille : c _w (Å)	5.462	5.19	5.185
Constante élastique C ₁₁ (GPa)	272	341	390
	270	342	
Constante élastique C ₁₂ (GPa)	128	136	145
	115	138	

B.2 Expression des paramètres

Les coefficients d'extinction de la structure $\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2$, sont calculés à partir des coefficients d'extinction des ternaires selon la loi de Vegard. [4]

Quaternaire type $\text{AB}_x\text{C}_{1-x}\text{D}$

$$K(\text{ZnSn}_x\text{Ge}_{1-x}\text{N}_2) = x \cdot K(\text{ZnSnN}_2) + (1-x) \cdot K(\text{ZnGeN}_2) \quad (\text{B.2.1})$$

Pour le cas du matériau $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$, le paramètre de maille est déterminé à partir la loi de Vegard, on a : $a_{\text{Si}} = 5.432 \text{ \AA}$; $a_{\text{Ge}} = 5.657 \text{ \AA}$ à 0K. [5]

avec :

$$a(\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y) = a_{\text{Si}} + 0.200326 \cdot y + 0.0247 \cdot y^2 \quad (\text{B.2.2})$$

Figure B.3 : Structure Orthorhombique pour le ZnSnN_2 (Logiciel CASTEP)

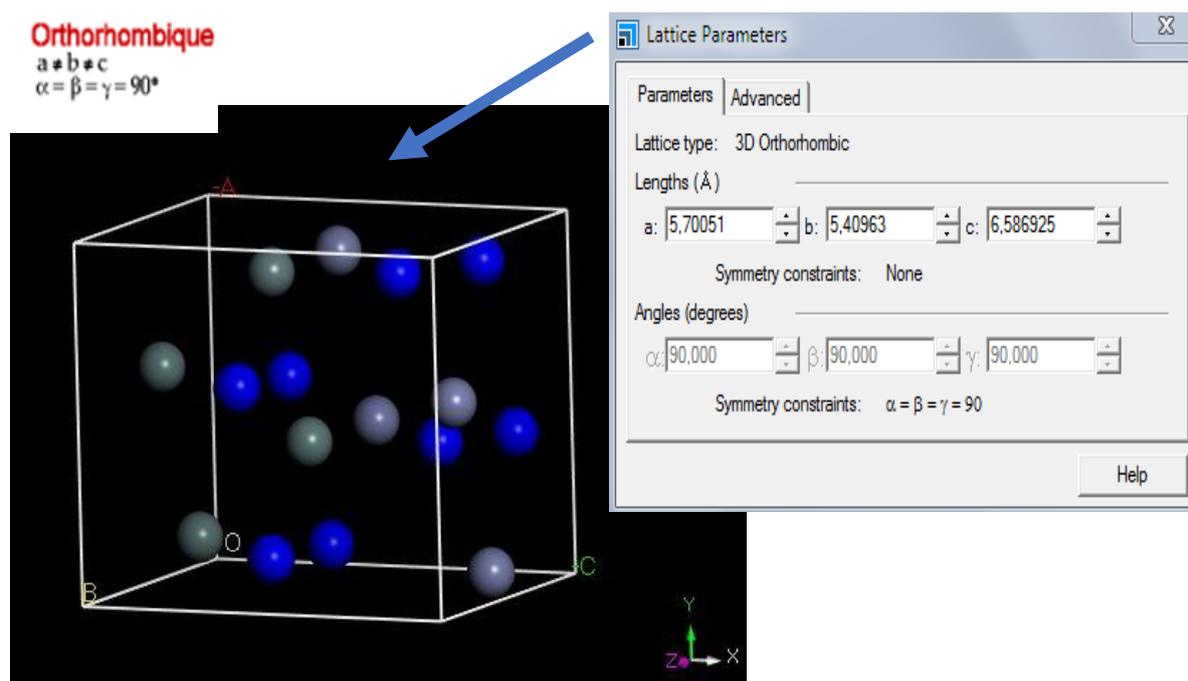


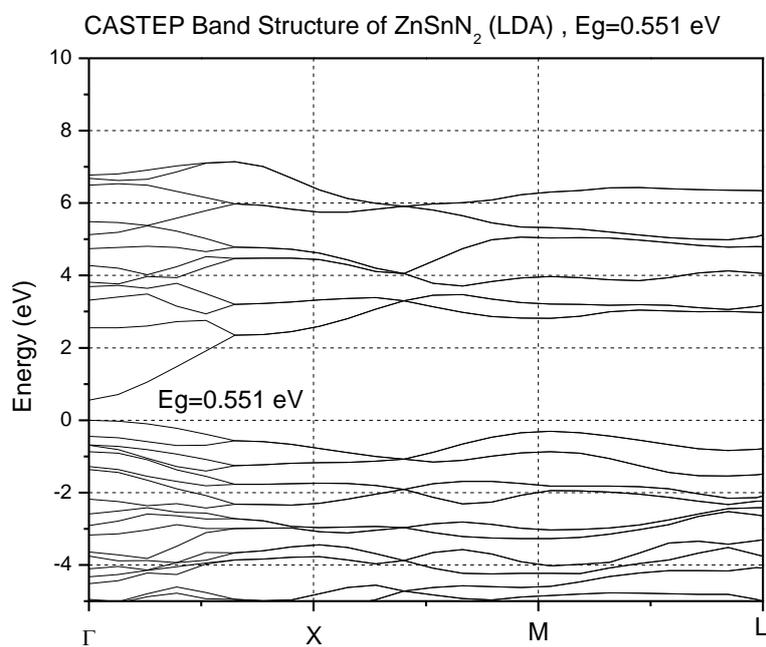
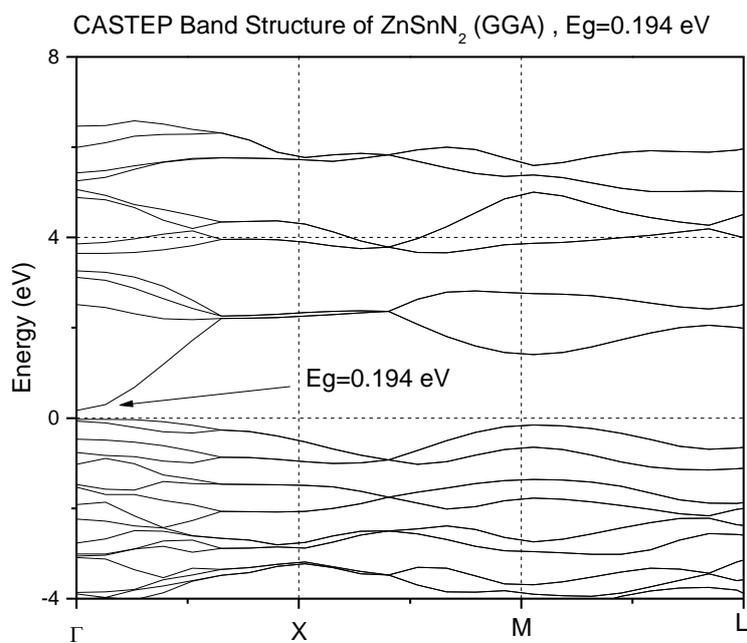
Figure B.3.1 : Structure de bande de ZnSnN_2 (en LDA)Figure B.3.2 : Structure de bande de ZnSnN_2 (en GGA)

Tableau B.2 : Bande interdite du ZnSnN₂ calculé par deux approches LDA et GGA et comparé avec les résultats [1]

Matériau		LDA[1]	GGA[1]	E _g (LDA) (eV) [1]	E _g (GGA) (eV) [1]	E _g (LDA) (eV)	E _g (GGA) (eV)	E _g (Exp) (eV) [1]
ZnSnN ₂ (Orthorhombique)	a(Å)	6.59	6.70					1.7
	b(Å)	5.70	5.80	0.55	0.35	0.551	0.194	±
	c(Å)	5.41	5.53					0.1
	V(Å ³)	203.21	214.89					

LDA : Approximation de la densité locale.

GGA : Approximation de gradient généralisé.

La densité du courant de saturation d'une diode dépend fortement de la concentration des porteurs de charges intrinsèques, comme nous le savons tous et comme déjà vu précédemment, ce dernier a une forte dépendance à la température. En simplifiant les équations de transport (diffusion), il est possible d'établir l'équation suivante qui représente le courant de saturation et qui tient compte de l'effet de la température elle est donnée par : [6]

$$J_0 = C \cdot T^3 \cdot e^{\left(\frac{-E_g}{k_B T}\right)} \quad (\text{B.2.3})$$

Avec C, une constante n'est pas facile à définir et indépendante de la température mais dépendante des paramètres de transport du matériau

REFERENCES

- [1] Bernard Gil. (2013). III-Nitride Semiconductors and their Modern Devices. In III-Nitride Semiconductors and their Modern Devices. Oxford University Press. <https://oxford.universitypressscholarship.com/view/10.1093/acprof:oso/9780199681723.001.0001/acprof9780199681723>.
- [2] Adamski, N. L., Wickramaratne, D., & Walle, C. G. V. de. (2020). Band alignments and polarization properties of the Zn-IV-nitrides. *Journal of Materials Chemistry C*, 8(23), 7890-7898. <https://doi.org/10.1039/D0TC01578D>.
- [3] Laidouci, A., Aissat, A., & Vilcot, J. P. (2019). Temperature Effect on ZnGe_xSn_{1-x}N₂ /GaN Multiwell Quantum Solar Cells. 2019 7th International Renewable and Sustainable Energy Conference (IRSEC), 1-5. <https://doi.org/10.1109/IRSEC48032.2019.9078284>.
- [4] Liu, Y., Li, Q. X., Wan, L. Y., Kucukgok, B., Ghafari, E., Ferguson, I. T., Zhang, X., Wang, S., Feng, Z. C., & Lu, N. (2017). Composition and temperature dependent optical properties of Al_xGa_{1-x}N alloy by spectroscopic ellipsometry. *Applied Surface Science*, 421, 389-396. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2017.01.309>
- [5] Richard, S. (2004). Modélisation physique de la structure électronique, du transport et de l'ionisation par choc dans les matériaux IV-IV massifs, contraints et dans les puits quantiques [Phdthesis, Université Paris Sud - Paris XI]. <https://doi.org/10/document>.
- [6] Gow, J. A., & Manning, C. D. (1999). Development of a photovoltaic array model for use in power-electronics simulation studies. *IEE Proceedings - Electric Power Applications*, 146(2), 193-200. <https://doi.org/10.1049/ip-epa:19990116>.

