

UNIVERSITE DE BLIDA 1

Faculté de Technologie

Département d'électronique

THESE DE DOCTORAT LMD

En Télécommunications

MODELISATION ET SIMULATION DE CELLULES SOLAIRES A BASE DE
NANOSTRUCTURES

Par

Houcine GUESMI

Devant le jury composé de :

Mr. M. DJEBARI	Professeur, U. de Blida 1	Président
Mr. S. NACER	Professeur, U. de Blida 1	Examineur
Mme. K. RAHMOUN	Professeur, U. de Tlemcen	Examinatrice
Mr. A. AISSAT	Professeur, U. de Blida 1	Directeur de thèse
Melle. I. BERBEZIER	Docteur, U. d'Aix-Marseille	Invitée

Blida, 16/01/2022

REMERCIEMENTS

Tout d'abord, Je remercie vivement, Monsieur **Abdelkader AISSAT**, mon tuteur, professeur à l'université de Blida 1, d'avoir accepté de m'encadrer ainsi que pour son aide, son suivi et ses précieux conseils durant tout le long de ces années d'études doctoral.

Que soient également remerciés tous les membres du jury, pour l'honneur et l'intérêt qu'ils m'ont accordé, en acceptant d'examiner mon manuscrit.

Je voudrais aussi exprimer mes sincères remerciements à tous mes collègues de doctorat et à l'équipe de Microélectronique de l'université de Blida, en particulier, la doctorante **BOUBAKEUR Manel**, pour leurs encouragements et pour avoir, d'une manière ou d'une autre contribué à cette étude.

Dans un autre cadre, j'ai pu côtoyer des personnes merveilleuses qui ont plus ou moins subi mes vanes foireuses, mes sautes d'humeur et états d'âmes et finalement assez rarement des remarques scientifiquement utiles. Je tiens à remercier les deux prochaine Docteurs **SAFI Meriem** et **ZOULIKHA Meriem** qui sont pour moi, des sœurs plus que des amis avec lesquelles j'ai passé de très agréables moments. J'ai conscience maintenant que ces années de thèse ont été, aussi grâce à eux, une période bénite de ma vie.

Mes remerciements les plus sincères à **NEZELFAR Fatima** ma meilleur amie, qui a toujours entaillé pour moi.

DEDICACES

Je dédie cette thèse à ma fiancée **Asma**, pour la patience et le soutien dont elle a fait preuve pendant toute la durée de cette thèse, à mes parents pour leurs motivations et leur encouragement permanent, et aussi à ma sœur, à mes frères et à toute ma famille.

ملخص

تناقش هذه الأطروحة نمذجة و محاكاة الخلايا الشمسية ذات البنية النانوية الكمية النقطية BQs , المبنية على المواد النصف الناقلية الجديدة III-V . من اجل هذا الهدف قمنا بتطوير برامج حسابات باستخدام برنامج التي سمحت لنا باستخراج منحني التيار-التوتر J-V، منحني الاستجابة الطيفية EQE, و كذا استخراج مختلف الخصائص المميزة للخلايا الشمسية. هدف هذه الدراسة هو تحسين مردود الخلايا الشمسية عن طريق دراسة تأثير عدد طبقات النقط النانوية الكمية BQs, الجزء المولي للعناصر المكونة للمواد ذات البنية النانوية الكمية ، تأثير درجة الحرارة و أيضا دراسة استخدام مواد حاجزة أخرى من اجل الاستخدامات الفوتوفولتية PV . من ناحية أخرى مقارنة مختلف الخلايا الشمسية المدروسة لاختيار أحسنها مردودا.

الكلمات المفتاحية: الخلايا الشمسية، المواد النصف الناقلية الجديدة III-V ، النقط النانوية الكمية BQs، الفوتوفولتية PV.

RESUME

Ce travail concerne la modélisation et la simulation des structures d'une cellule solaire à nanostructures quantiques comme les boîtes quantiques BQs à base de nouveaux matériaux semi-conducteurs III-V. Nous avons établi des programmes de calcul permettant de calculer les différents paramètres caractéristiques de la cellule photovoltaïque correspondante ; de tracer la caractéristique courant-tension J-V, la réponse spectrale EQE ainsi que le coefficient d'absorption. L'objectif de cette étude est d'optimiser l'efficacité de conversion de la cellule solaire conventionnelle d'une part par l'étude de l'influence de certains paramètres comme le nombre des couches de BQs, la fraction molaire des éléments constituant la Boîte quantique, l'effet de la température et aussi l'étude de l'utilisation d'autres matériaux barrière pour les applications photovoltaïque PV. Cette étude permet de comparer les différentes structures étudiées afin d'en sélectionner la meilleure.

Mots clés : cellule solaire, semi-conducteurs III-V, boîtes quantiques BQs.

ABSTRACT

This thesis describes the modeling and simulation of quantum nanostructures solar cell structures such as quantum dots QDs based on new semiconductor materials III-V. We have established numerical programs that allow us to plot and extract the current-voltage J-V characteristic, external quantum efficiency EQE, absorption coefficient, and the different characteristics of a quantum dots solar cell. The goal of this work is to optimize the efficiency of a conventional solar cell by the study of the influence of some parameters such as the

number of QDs layers, the content of the elements, which constitute the quantum nanostructure materials, the temperature effect and the study of the use of other host materials for the photovoltaic applications PV. In the other hand, compare the different structures studied in order to select the better quantum dots solar cell.

Keywords: Solar cell, semiconductor materials III-V, quantum dots QDs, photovoltaic applications PV.

TABLE DE MATIERE

REMERCIEMENTS.....	II
DEDECACES.....	III
RESUME.....	IV
TABLE DE MATIERES.....	VI
Liste des illustrations et tableaux.....	VIII
Liste des symboles et abreviations.....	XII
INTRODUCTION GENERALE.....	1

CHAPITRE 1 : LA PHYSIQUE DE LA CELLULE SOLAIRE

1.1 Introduction.....	4
1.2 L'effet photovoltaïque	4
1.2.1 Générations photovoltaïque.....	5
1.3 Rayonnement solaire.....	6
1.4 Bases des semi-conducteurs	9
1.5 La jonction P-N	10
1.6 Fonctionnement des cellules solaires	12
1.6.1 Cellules solaires idéales	12
1.6.2 Cellules solaires réelles	14
1.6.3 Pertes dans la cellule solaire	16
1.6.4 Paramètres caractéristiques d'une cellule photovoltaïque	17
1.7 Conclusion.....	20

CHAPITRE 2 : GENERALITES SUR LES NANOSTRUCTURES DE BASSE DIMENSIONALITÉ

2.1 Introduction.....	21
2.2 Les cellules solaires multi jonction	21
2.3 Les cellules solaires à bande intermédiaire	22
2.4 Les cellules solaires à bande intermédiaire à base de boîte quantique	24
2.5 Propriétés des nanostructures de basse dimensionnalité	25
2.5.1 Propriétés électroniques	25
2.5.2 Propriétés optiques	32
2.6 Croissance auto-organisée des BQs.....	34
2.6.1 modes de croissance	34
2.6.2 contrainte dans les boîtes quantiques	37
2.7 Techniques de fabrication et de croissance des BQs	39
2.7.1 Epitaxie par jets moléculaires MBE	40
2.7.2 Epitaxie en phase vapeur de composés organométalliques MOCVD	42
2.8 Choix de matériau semiconducteurs boîte quantiques	43
2.9 L'intérêt des BQs dans le domaine de photovoltaïque	49
2.10 Energie de transition dans les boîtes quantiques	50
2.11 Conclusion	55

**CHAPITRE 3 : MODELISATION ET SIMULATION DES
CELLULES SOLAIRES À BOITES QUANTIQUES : BQs à base de
GaAs**

3.1 Introduction	57
3.2 Cellules solaires à boîte quantiques simulées à base de GaAs	57
3.2.1 La cellule solaire à BQs de GaAsBi/GaAs	57
3.2.1.1 Résultats et discussion.....	58
3.3.1.2 Effet de la couche d’InGaP sur l’efficacité de la structure à GaAs _{0.95} Bi _{0.05} /GaAs	62
3.2.2 La cellule solaire à BQs InGaNAs/GaAs	66
3.2.2.1 Résultats et discussion.....	66
3.3.2.2 Effet de la couche d’InGaP sur l’efficacité de la structure à In _{0.1} Ga _{0.9} N _{0.01} As _{0.99} /GaAs	75
3.3 Conclusion.....	78

**CHAPITRE 4 : MODELISATION ET SIMULATION DES
CELLULES SOLAIRES À BOITES QUANTIQUES : BQs à base de
GaAsP**

4.1 Introduction.....	79
4.2 Cellules solaires à boîte quantiques simulées à base de GaAsP	79
4.2.1 La cellule solaire à BQs de GaAs/GaAsP	79
4.2.1.1 Résultats et discussion.....	81
4.2.2 La cellule solaire à BQs de InP/GaAsP	95
4.2.2.1 Résultats et discussion.....	96
4.3 Comparaison entre les différentes cellules solaires à BQs étudiés	99
4.3.1 Pour les cellules solaires à base de GaAs	99
4.3.2 Pour les cellules solaires à base de GaAsP	99
4.4 Conclusion.....	99
CONCLUSION GENERALE.....	102
REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES.....	104

LISTE DES ILLUSTRATIONS, GRAPHIQUES ET DES TABLEAUX

Figure 1.1	Normes de mesures du spectre d'énergie lumineuse émis par le soleil, notion de la convention AM [15].....	7
Figure 1.2	L'irradiance spectrale selon la convention AM	8
Figure 1.3	Coefficient d'absorption en fonction de l'énergie des photons pour Si et GaAs à 300K [17].....	10
Figure 1.4	La jonction P-N, l'Absorption est représentée par la lettre (A), le Thermalisation par la lettre (T), les recombinaisons non radiatives par (RN), les recombinaisons radiatives par (R), rayonnement non absorbé (RNA). Les niveaux de fermi sont désignés par (EF)	11
Figure 1.5	Structure d'une simple cellule solaire [18].....	12
Figure 1.6	(a) caractéristique J-V de la cellule solaire et (b) circuit équivalent de la cellule solaire.	14
Figure 1.7	Modèle électrique réel d'une cellule photovoltaïque [20].....	15
Figure 1.8	Pertes dans une cellule solaire	16
Figure 1.9	Efficacité quantique d'une cellule solaire idéale et d'une cellule solaire pratique.....	16
Figure 1.10	Caractéristique I(V) d'une cellule photovoltaïque [22].....	18
Figure 2.1	énergie de bande interdite des semi-conducteurs représentés sur le spectre AM1.5 (a) et la structure des cellules solaires multi-jonctions(b) [24].....	21
Figure 2.2	phénomène d'absorption des photons a faible énergie dans les cellules solaire à bande intermédiaire	22
Figure 2.3	circuit équivalente d'une cellule solaire à bande intermédiaire	23
Figure 2.4	(a) structure d'un semiconducteur massif, (b) évolution de la densité d'états en fonction d'énergie dans un semiconducteur massif [35][36]	25
Figure 2.5	(a) structure d'un puits quantique, (b) potentiel fini dans la structure à puits quantique, (c) évolution de la densité d'états en fonction d'énergie dans un puits quantique. (d) diagramme d'énergie d'une structure à puits quantique [35].....	25
Figure 2.6	(a) structure d'un fil quantique, (b) évolution de la densité d'états en fonction d'énergie dans un fil quantique, (c) potentiel fini dans la structure à fil quantique [35][36].....	26
Figure 2.7	(a) structure d'une boîte quantique, (b) évolution de la densité d'états en fonction de l'énergie dans une boîte quantique, (c) potentiel fini dans la structure à boîte quantique [35][36].....	27
Figure 2.8	Spectre de photoluminescence d'une structure à boîte quantique InAs/GaAs à la température ambiante [40].....	32
Figure 2.9	(a) mode de croissance Volmer-Weber (VW : formation des ilots), (b) mode de croissance Frank-van der Merwe (FM : couche par couche), (c) mode de croissance Stranski-Krastanov (SK : couche+ilots).	34
Figure 2.10	(a) étapes de la méthode de croissance Stranski-Krastanov, (b) image AFM d'une structure à boîtes quantiques de Ge/Si, (c) image AFM d'une structure à boîtes quantiques d'InGaAs/GaAs [45]	35
Figure 2.11	Types de la contrainte : (a) contrainte extensive, (b) contrainte compressive [47].....	37
Figure 2.12	Technique de compensation de la contrainte : (a) structure InAs/GaAs sans couches de compensation, (b) structure InAs/GaAs avec les couches de compensation [48].....	38

Figure 2.13	Image de TEM of 10 empilements de boites quantiques d'InAs/GaAs : (a) sans et (b) avec couche de compensation de la contrainte GaP [50].	39
Figure 2.14	Bâti MBE	40
Figure 2.15	Images de RHEED pendant la croissance des BQs d'InAs sur substrat GaAs [52].....	41
Figure 2.16	Montage expérimental du système de croissance MOCVD [54]	41
Figure 2.17	Structure zinc-blinde [64].....	44
Figure 2.18	Structure de bande de GaAs et InAs. Pour le GaAs $E_g=1.42$ eV, $E_L=1.71$ eV et $E_x=1.9$ eV et $E_g=0.35$ eV, $E_L=1.08$ eV et $E_x=1.37$ eV pour le InAs à $T=300$ K [66].....	44
Figure 2.19	Energie de gap en fonction du paramètre de maille de plusieurs semiconducteurs III-V à $T=0$ K [57]	45
Figure 2.20	Discontinuité de la bande de conduction et la bande de valence de quelques semiconducteurs III-V en fonction de paramètre de maille [67].....	47
Figure 2.21	Evolution de l'énergie de la bande interdite de quelques semiconducteurs BQs III-V et II-VI en fonction de ses tailles [71].....	48
Figure 2.22	diagramme de bande d'énergie de la cellule solaire incluant des BQs d'InAs / GaAs	52
Figure 2.23	diagramme d'énergie d'une seule boite quantique d'InAs/GaAs.....	52
Figure 2.24	variation de l'énergie de quantification des électrons	53
Figure 2.25	variation de l'énergie de quantification des trous lourds pour différent largeur de la boite.....	53
Figure 2.26	variation de l'énergie de transition de la structure a BQ d'InAs/GaAs pour différent largeur de la boite.....	54
Figure 3.1	Structure de la cellule solaire p-i-n à base de GaAs [79].....	57
Figure 3.2	Structure de la cellule a BQ de GaAsBi /GaAs [81].....	58
Figure 3.3	variation de l'énergie de la bande interdite et de la contrainte en fonction de la concentration de bismuth [81]	58
Figure 3.4	EQE de la cellule solaire sans et avec un nombre variable de couches de GaAs _{0.95} Bi _{0.05} / GaAs	59
Figure 3.5	coefficient d'absorption de la cellule solaire sans et avec un nombre variable de couches de BQs GaAs _{0.95} Bi _{0.05} / GaAs	61
Figure 3.6	Caractéristique J-V de la cellule solaire sans et avec un nombre variable de couches de BQs GaAs _{0.95} Bi _{0.05} / GaAs....	61
Figure 3.7	Caractéristique P-V de la cellule solaire sans et avec un nombre variable de couches de BQs GaAs _{0.95} Bi _{0.05} / GaAs.....	62
Figure 3.8	Structure de la cellule a BQ de GaAsBi /GaAs avec l'insertion de deux couches d'InGaP	63
Figure 3.9	caractéristique J-V pour notre structure de la cellule solaire à BQs GaAs _{0.95} Bi _{0.05} /GaAs sans et avec l'insertion des deux couches d'InGaP.	64
Figure 3.10	variation de la contrainte en fonction de la concentration d'indium et d'azote dans l'alliage InGaNAs.....	66
Figure 3.11	La variation de la bande gab en fonction de la concentration d'indium et d'azote	66
Figure 3.12	Diagramme de bande d'énergie de la cellule solaire incluant les BQs InGaNAs / GaAs.....	67
Figure 3.13	L'énergie de quantification des électrons et des trous lourds pour la structure a BQs d'InGaNAs / GaAs.....	68
Figure 3.14	Energies de transition de la structure a BQs de InGaNAs / GaAs, pour différent concentrations d'Indium.....	69
Figure 3.15	Energies de transition de la structure a BQs de InGaNAs / GaAs, pour différent concentrations d'Azote.....	69
Figure 3.16	Variation du coefficient de réflexion en fonction de la concentration d'indium et d'azote dans l'alliage InGaNAs.....	70

Figure 3.17	Variation de l'EQE en fonction du nombre couches de BQs $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}_{0.01}\text{As}_{0.99} / \text{GaAs}$	71
Figure 3.18	Variation du coefficient d'absorption en fonction du nombre couches de BQs $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}_{0.01}\text{As}_{0.99} / \text{GaAs}$	71
Figure 3.19	Caractéristique J-V de la cellule solaire sans et avec un nombre variable de couches de BQs $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}_{0.01}\text{As}_{0.99} / \text{GaAs}$	72
Figure 3.20	Caractéristique P-V de la cellule solaire sans et avec un nombre variable de couches de BQs $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}_{0.01}\text{As}_{0.99} / \text{GaAs}$	73
Figure 3.21	Comparaison du caractéristique J-V de notre structure a 25 couches de BQs $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}_{0.01}\text{As}_{0.99}$ avec celle des deux cellules à BQs $\text{In}_{0.167}\text{Ga}_{0.833}\text{As}/\text{GaAs}$ et $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$ et la cellule GaAs de référence.....	74
Figure 3.22	Comparaison du EQE de notre structure à 25 couches de BQs $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}_{0.01}\text{As}_{0.99}$ avec celle des deux cellules à BQs $\text{In}_{0.167}\text{Ga}_{0.833}\text{As}/\text{GaAs}$ et $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$ et la cellule GaAs de référence.	75
Figure 3.23	caractéristique J-V pour notre structure de la cellule solaire à BQs $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}_{0.01}\text{As}_{0.99} / \text{GaAs}$ sans et avec l'insertion des deux couches d'InGaP.	76
Figure 4.1	Structure de la cellule a BQ de GaAs /GaAsP [88].....	79
Figure 4.2	Variation de l'énergie de la bande interdite et de la contrainte en fonction de la concentration de phosphore [88]	80
Figure 4.3	Diagramme d'énergie de la cellule solaire a BQs GaAs / GaAsP, où cinq périodes de BQs de GaAs / GaAsP.....	81
Figure 4.4	Variation de l'énergie de quantification des électrons en fonction de la largeur de la boîte.....	82
Figure 4.5	Variation de l'énergie de quantification des trous lourds en fonction de la largeur de la boîte.....	83
Figure 4.6	Énergies de transition pour les deux premiers niveaux.....	83
Figure 4.7	Énergies de transition pour différents concentration de phosphore	84
Figure 4.8	Caractéristique J-V de la cellule solaire sans et avec un nombre variable de couches de BQs GaAs/GaAs _{0.9} P _{0.1} [88].....	84
Figure 4.9	Caractéristique P-V de la cellule solaire sans et avec un nombre variable de couches de BQs GaAs/GaAs _{0.9} P _{0.1} [88].....	85
Figure 4.10	EQE de la cellule solaire sans et avec un nombre variable de couches de BQs GaAs/GaAs _{0.9} P _{0.1} [88].	86
Figure 4.11	Coefficient d'absorption de la cellule solaire sans et avec un nombre variable de couches de BQs GaAs/GaAs _{0.9} P _{0.1} [88].....	87
Figure 4.12	Caractéristique J-V de la cellule solaire a 25 couches de BQs GaAs/GaAs _{1-x} P _x et pour différent concentration de Phosphore [88].....	88
Figure 4.13	Variation du rendement et de courant de court-circuit en fonction de la contrainte. [88].	88
Figure 4.14	La variation du rendement en fonction de l'énergie du gap et le nombre de BQs insérés. [88].....	89
Figure 4.15	Comparaison du Caractéristique J-V de la cellule solaire a 25 couches de BQs GaAs/GaAs _{0.9} P _{0.1} et la cellule solaire a BQs de $\text{In}_{0.47}\text{Ga}_{0.53}\text{As}/ \text{GaAs}_{0.86}\text{P}_{0.14}$ [75], la cellule solaire a BQs de $\text{In}_{0.167}\text{Ga}_{0.833}\text{As}/ \text{GaAs}$ [84], et la cellule GaAs de référence.....	90
Figure 4.16	Comparaison du EQE de la cellule solaire a 25 couches de BQs GaAs/GaAs _{0.9} P _{0.1} et la cellule solaire a BQs de $\text{In}_{0.47}\text{Ga}_{0.53}\text{As}/\text{GaAs}_{0.86}\text{P}_{0.14}$ [75], la cellule solaire a BQs de $\text{In}_{0.167}\text{Ga}_{0.833}\text{As} / \text{GaAs}$ [84], et la cellule GaAs de référence.....	91
Figure 4.17	variation du rendement en fonction de la température et du nombre de BQs [88].....	92
Figure 4.18	Structure de la cellule à BQ de InP /GaAsP [93].....	94
Figure 4.19	EQE de la cellule solaire sans et avec 5 couches de BQs InP/GaAs _{1-x} P _x pour différent concentration de Phosphor [93].	95

Figure 4.20	Coefficient d'absorption de la cellule solaire sans et avec 5 couches de BQs InP/GaAs _{0,9} P _{0,1} [93].	96
Figure 4.21	J-V de la cellule solaire avec 5 couches de BQs InP/GaAs _{1-x} P _x pour différent concentration de Phosphor [93].	97
Figure 4.22	Caractéristique J-V de la cellule solaire sans et avec un nombre variable de couches de BQs InP/GaAs _{0,9} P _{0,1} [93].	98
Figure 4.23	Caractéristique P-V de la cellule solaire sans et avec un nombre variable de couches de BQs InP/GaAs _{0,9} P _{0,1} [93].	98
Tableau 1.1	Groupes II - VI du tableau périodique des éléments	9
Tableau 2.1	Éléments du groupe III, IV et V du tableau périodique.....	43
Tableau 2.2	Propriétés de quelques semiconducteurs III-V utilisés dans ce travail à T=300 [66, 68].	46
Tableau 3.1	Paramètres caractéristiques d'une cellule solaire p-i-n et à BQs GaAs _{0,95} Bi _{0,05} /GaAs pour un nombre variable de couches.	62
Tableau 3.2	Paramètres caractéristiques d'une à BQs GaAs _{0,95} Bi _{0,05} /GaAs avec l'insertion des deux couche d'InGaP pour un nombre variable de couches.	64
Tableau 3.3	Paramètres caractéristiques d'une cellule solaire p-i-n et à BQs In _{0,1} Ga _{0,9} N _{0,01} As _{0,99} / GaAs pour un nombre variable de couches.....	74
Tableau 3.4	Paramètres caractéristiques d'une à BQs In _{0,1} Ga _{0,9} N _{0,01} As _{0,99} /GaAs avec l'insertion des deux couches d'InGaP pour un nombre variable de couches....	76
Tableau 4.1	Paramètres caractéristiques d'une cellule solaire p-i-n et à BQs GaAs/GaAs _{0,9} P _{0,1} pour un nombre variable de couches	85
Tableau 4.2	Paramètres caractéristiques en fonction de la température et du nombre de BQs [88].	93
Tableau 4.3	caractéristiques de la cellule solaire à BQs InP/GaAs _{1-x} P _x pour un nombre variable de couches.	97
Tableau 4.4	Paramètres caractéristiques d'une cellule solaire p-i-n et à BQs InP/GaAs _{0,9} P _{0,1} pour un nombre variable de couches.	99

LISTE DES SYMBOLES ET ABREVIATIONS

ABREVIATIONS

3J	: Triple Junctions.
AFM	: Microscopie à Force Atomique.
AM1.5G	: Air Mass Global.
BQs	: Boites Quantiques.
BSF	: Champ de Surface Arrière (Back Surface Field).
CM	: Couche de Mouillage.
EQE	: Efficacité Quantique Externe.
EQI	: Efficacité Quantique Interne.
FF	: Facteur de Forme.
FQs	: Fils Quantiques.
SCBI	: Cellule Solaire a Bande Intermédiaire
IR	: Infrarouge
AM	: Air Mass
BV	: Bande de Valence
BC	: Bande de Conduction
LED	: Light Emitting Diode
ZCE	: Zone de Charge d'Esace
EQ	: Efficacité Quantique
BI	: Bande Intermédiaire
EPVOM	: Epitaxie en Phase Vapeur aux Organométalliques (ou en anglais MOCVD pour Metalorganic Chemical Vapor Deposition)
EJM	: Epitaxie par jet moléculaire (Molecular Beam Epitaxy).
MC	: Mono Couche.
MEB	: Microscope Electronique à Balayage.
SC-MJ	: Cellule solaire Multi-Junction.
SC-BI	: Cellule solaire a Bande Intermédiaire.
NFs	: Nanofils.
PL	: Photoluminescence.
PQs	: Puits Quantiques.
PVIB	: Photovoltaïques Intégrés au Bâtiment
RHEED	: Diffractometre d'electron Rapide Sous Incidence Rasante (Reflection High Energy Electron Diffraction).
SK	: Stranski Krastanov.
SOI	: Silicon On Insulator.
SRH	: Shockley Read Hall.
TEM	: Transmission Electron Microscopy.
UHV	: Ultra High Vacuum.
WL	: Wetting Layer.

SYMBOLES

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

$n_{1,2}$: facteur d'idéalité de la diode D_1 et D_2 , respectivement.
J_{cc}	: densité de courant de court-circuit.
V_{co}	: tension de circuit ouvert.
FF	: facteur de forme.
η	: rendement ou l'efficacité de conversion d'une cellule solaire.
P	: puissance délivrée par une cellule.
E_{ph}	: énergie des photons incidents.
h	: constante de Planck.
\hbar	: constante de Planck réduite.
E	: énergie de l'électron.
m_e^*	: masse effective de l'électron.
m_h^*	: masse effective du trou.
λ_B	: longueur d'onde de de Broglie.
λ_{Bth}	: longueur d'onde de de Broglie thermique
$\rho(E)$: densité d'états d'énergie.
E_g	: énergie de la bande interdite.
θ	: fonction de heavyside.
E_{n_i}	: énergie des niveaux discrets n suivant la direction i avec $i=x$ ou y ou z .
$V(r)$: potentiel spatial.
$\psi(r)$: fonction d'onde qui décrit le comportement de l'électron (trou).
L_i	: épaisseur de nanostructure suivant la direction i avec $i=x,y,z$.
k_i	: vecteur d'onde du l'électron (trou) suivant la direction i avec $i=x,y,z$.
n_i	: nombre quantique principale suivant la direction i avec $i=x,y,z$.
$N_{empilement}$: nombre d'empilement.
$\langle \varepsilon_{\perp} \rangle$: contrainte moyenne perpendiculaire aux couches.
e	: épaisseur des couches d'espacement entre les différents plans de BQs.
ε_{\parallel}	: contrainte parallèle aux couches.
$a_{ie\perp}$: paramètre de maille perpendiculaire de l'ième couche épitaxiale.
$a_{ie\parallel}$: paramètre de maille parallèle de l'ième couche épitaxiale
a_s	: paramètre de maille du substrat.
E_g^B	: énergie de gap du matériau barrière non modifié.
ΔE_v	: discontinuité de la bande de valence.
ΔE_c	: discontinuité de la bande de conduction.
E_c	: bande de conduction.
E_v	: bande de valence.
V_s	: potentiel de la contrainte localisé dans la bande de valence.
C_{ACD}	: paramètre de la courbure de bandes du composé ACD.
x	: fraction molaire d'un élément chimique dans un composé.
k_B	: constante de Boltzmann.
T	: température.
L_w	: épaisseur de puits.
V_{out}	: tension de la sortie.

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

C_{11}, C_{12}	: constants élastiques.
m_0	: masse d'électron.
E_X	: énergie du point X.
E_L	: énergie du point L.
E	: énergie du point Γ .
E_{so}	: énergie du spin-orbit.

Pour les semiconducteurs, les symboles suivants, désignent :

Cu	: Copper
In	: Indium
Ga	: Gallium
Se	: Selenide
Cd	: Cadmium
Te	: Telluride
As	: Arsenide
P	: Phosphore
Bi	: Bismuth
Sb	: Antimonide
N	: Nitrure.
Zn	: Zinc

INTRODUCTION GENERALE

La consommation d'énergie n'a arrêté d'accroître à cause du développement de l'industrie, du transport et des moyens de communication. Plus de 85% de la consommation mondiale repose sur les énergies fossiles (pétrole, gaz naturel, charbon, uranium..etc). Avec l'épuisement progressif de ces derniers, d'une part, et la croissance des besoins énergétiques d'autre part, les énergies renouvelables joueront à l'avenir un rôle de plus en plus important dans nos sociétés.

Afin de satisfaire les besoins énergétiques mondiaux, tout en préservant l'environnement avec un coût le plus faible possible, les énergies renouvelables apparaissent comme un bon compromis. Ce sont des énergies inépuisables fournies par le soleil, le vent, les chutes d'eau, la chaleur de la terre...etc. La plus forte croissance parmi ces derniers est le fait de l'énergie solaire photovoltaïque. Elle admet la conversion directe du rayonnement solaire en électricité [1], ce qui lui a permis d'occuper une grande place dans le monde recherche, elle a également connu un développement remarquable de plus en plus important depuis 1990. La recherche dans ce domaine est basée sur deux points essentiels, qui peuvent sembler opposés : l'augmentation du rendement de la cellule tout en assurant une diminution de coût de production.

Ce développement passe essentiellement par la maîtrise des matériaux utilisés dans la conception des composants. Les cellules solaires conventionnelles à base de silicium qui sont mises sur le marché donnent un rendement qui avoisine le 17%, qui est relativement épuisé par rapport à la grande quantité de l'énergie solaire incidente. Ce qui mène au développement de cinq technologies de la cellule solaire, afin de profiter du maximum de la quantité d'énergie solaire incidente, qui sont divisés en trois générations :

- Les cellules solaires de première génération sont basées sur le silicium massif avec un rendement de conversion variant entre 27.6 % pour le silicium monocristallin avec concentrateur, 26.1% pour le silicium monocristallin sans concentrateur et 21.2% pour le silicium multicristallin [2].
- Les cellules solaires de deuxième génération sont basées sur le silicium amorphe avec un rendement de 14% [2] et sur les technologies CIGS avec un rendement de 23.4% [2] et CdTe avec un rendement de 22.1% [2].

- Les cellules solaires de troisième génération sont basées sur les cellules multijonctions avec un rendement de conversion maximal de 47.1% [2] sous un spectre solaire concentré.

Dans ce dernier type de cellules, et depuis une vingtaine d'années, l'insertion des nanostructures dans des structures cellule solaire a suscité un grand intérêt auprès de la communauté scientifique du domaine de photovoltaïque. En 1997, Luque et al [3] ont proposé l'insertion d'une bande intermédiaire dans les cellules solaires afin de réduire les pertes énergétiques par l'exploitation des photons de faible énergie. Ces nanostructures sont divisées en : puits quantiques (PQs), fils quantiques (FQs) et boîtes quantiques (BQs). Pour constituer une nanostructure de basse dimensionnalité, il faut insérer un matériau de faible gap dans une matrice d'un matériau de grand gap. Cette formation permettant la quantification des porteurs de charge dans des puits de potentiel, et le classement de ces nanostructures est basée sur le degré de confinement (2 D pour les PQs, 1 D pour les FQs et 3 D pour les BQs). Les propriétés physiques et optiques remarquables de ces configurations qui résultent de la quantification des états d'énergie et le confinement des porteurs de charge ont imposé un grand intérêt dans le domaine de fabrication des cellules solaires.

Les porteurs de charge occupent des états énergétiques discrets dans les BQs, ces derniers présentent le degré de confinement le plus élevé, ce qui permet un confinement des porteurs dans les trois directions d'espace. Expérimentalement, et pour gagner un photon courant supplémentaires par deux étapes d'absorption des photons moins énergétiques, les BQs sont utilisés pour la création des bandes intermédiaires dans la cellule solaire conventionnelle afin d'améliorer le rendement de conversion [4-6]. Ceci est dû à la bande interdite variable de BQ par le contrôle de sa taille. Avec ces supériorités mentionnées, les BQs sont des bons choix pour les applications optoélectroniques, en particulier les cellules solaires. Le développement de ce type de cellules passe essentiellement par la maîtrise des matériaux utilisés dans la conception des composants. Dans ce contexte, les semi-conducteurs III-V et ses alliages comme le GaAs, InAs, GaP, GaBi, GaAsP, GaAsBi, etc, présentent des propriétés électroniques et optoélectroniques qui leur donnent des avantages convaincants par rapport au Si : une forte mobilité des porteurs de charge, une structure de bandes électroniques à gap direct avec des temps de recombinaisons très courts, des forces d'oscillateur élevées et un rendement d'absorption et d'émission de lumière important.

L'objectif principal de ce présent travail porte essentiellement sur la modélisation et simulation des cellules solaires à BQs à base de nouveaux matériaux semi-conducteurs

III-V. On cherche d'une part à trouver des nouveaux matériaux III-V binaire, ternaires et même quaternaires susceptibles à être employés comme des nanostructures de basse dimensionnalité, et d'autre part à analyser leur influence sur les caractéristiques électriques et optiques d'une cellule solaire conventionnelle avec un matériau substrat GaAs.

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

Le **deuxième chapitre** porte sur l'état de l'art des nanostructures de basse dimensionnalité, on se concentre plus sur les boîtes quantiques BQs pour applications photovoltaïques. Les propriétés de BQs ainsi que le mode de croissance ont été détaillés. Les différents matériaux semi-conducteurs III-V susceptibles d'être employés pour la conception des cellules solaires à boîtes quantique ont été présentés.

Le **troisième et le quatrième chapitre** sont consacrés aux résultats de simulation qui ont été menées dans ce travail. Plusieurs structures de cellules solaires de nanostructures de basse dimensionnalité ont été étudiées. L'influence de plusieurs paramètres comme exemple le nombre de boîtes, la température, la composition d'alliage des matériaux ternaires et quaternaires sur les paramètres électriques, la caractéristique courant-tension J-V, l'efficacité quantique externe EQE, et le coefficient d'absorption a été montrée.

Une conclusion générale et perspectives terminent cette thèse en suggérant l'insertion de ces types des cellules dans des cellules multi-jonctions dans le but d'atteindre des rendements de conversion plus élevés.

CHAPITRE 1

LA PHYSIQUE DE LA CELLULE SOLAIRE

1.1 Introduction :

L'Effet photovoltaïque est un processus dans lequel deux matériaux différents en contact étroit produisent une tension électrique lorsqu'ils sont excités par la lumière du soleil grâce au processus d'absorption de la lumière par la matière semiconductrice. L'objectif de ce chapitre est d'introduire les concepts généraux liés à la physique de cellule photovoltaïque pour comprendre son fonctionnement. Nous abordons en premier lieu quelques dates historiques sur le photovoltaïque. Ensuite, nous décrivons le principe de fonctionnement, le schéma équivalent d'une cellule solaire idéal et réel et ses caractéristiques principales ainsi que les pertes physiques et technologiques qui limitent le rendement de la cellule solaire.

1.2 L'effet photovoltaïque

Depuis la découverte de l'effet photovoltaïque en 1839 par Edmund Becquerel, l'idée de l'énergie électrique à partir de la lumière du soleil s'est avérée fascinante pour les chercheurs. Cependant, ce n'est que dans les années 1950 que le photovoltaïque au silicium a pu produire des quantités utiles d'énergie. La première cellule solaire en silicium avait un rendement de 6% [7]. Dans les années 1960, des cellules solaires en silicium ont été développées pour des applications spatiales. La crise pétrolière des années 1970 a attiré l'attention sur le besoin de sources d'énergie alternatives, ce qui a conduit à envisager sérieusement les cellules solaires pour les applications terrestres. Les investissements en recherche et développement réalisés depuis lors, ont conduit à l'exploration d'une pléthore de matériaux de cellules solaires à la recherche d'une voie vers le photovoltaïque à faible coût et à haut rendement. Ces matériaux comprennent le silicium amorphe (a-Si), le silicium cristallin (c-Si), les composés III-V tels que l'arséniure de gallium (GaAs) et les composés II-VI tels que le tellure de cadmium (CdTe) et le séléniure de cuivre-indium-gallium (CIGS). Les cellules solaires à colorant et organiques ont également suscité un intérêt pour la recherche ces dernières années [8]. Cependant, le silicium reste le matériau de premier plan pour les cellules solaires, en raison de son coût relativement faible et de l'avancement de la technologie du silicium dans l'industrie de la microélectronique. Mais il y a de grands défis à relever pour améliorer encore l'efficacité des cellules solaires à base de silicium.

Le photovoltaïque terrestre a trouvé des applications dans des endroits où l'alimentation électrique conventionnelle sera trop chère ou peu pratique, par exemple, les équipements de télécommunications à distance, l'électrification rurale et les applications électroniques grand public de faible puissance. Les systèmes photovoltaïques connectés au réseau ont également connu une augmentation spectaculaire au cours de la dernière décennie. Aujourd'hui, le photovoltaïque se trouve à la fois en milieu rural et urbain. En raison de leur qualité esthétique, les cellules solaires ont également trouvé une application dans la conception architecturale, où en plus de produire de l'électricité pour un bâtiment, elles jouent également le rôle d'élément de construction. Celles-ci sont appelées photovoltaïques intégrés au bâtiment (PVIB).

1.2.1 Générations de photovoltaïque

Le but principal de la recherche en photovoltaïque est de réduire le coût de production par unité de watt, afin d'atteindre la parité réseau. La parité du réseau, définie comme le point où l'électricité photovoltaïque devient compétitive par rapport à l'électricité produite à partir de sources d'énergie plus conventionnelles telles que le charbon, le gaz naturel et les réacteurs nucléaires, se situe généralement à 1 USD / W. Les technologies photovoltaïques peuvent être globalement classées en trois groupes en fonction de leurs caractéristiques de fonctionnement, de leur coût et de leur rendement de la conversion.

La première génération de cellules solaires se caractérise par son coût élevé et son rendement relativement élevé (jusqu'à 20%). Ce sont des cellules solaires en silicium cristallin. La meilleure efficacité de laboratoire obtenue pour une cellule solaire c-Si est de 25% [9]. La majeure partie de la capacité photovoltaïque installée appartient aujourd'hui à ce groupe. Le photovoltaïque de deuxième génération fait référence aux technologies à couches minces où le matériau semi-conducteur est déposé sur du verre ou une feuille métallique. Cela garantit que seule une petite quantité de matériau est utilisée, ce qui entraîne un coût inférieur. Les cellules solaires à couches minces actuellement sur le marché sont généralement fabriquées en a-Si, CdTe et CIGS avec les meilleurs rendements de laboratoire à respectivement 10,1%, 16,7% et 19,4% [10].

La recherche s'est tournée vers une nouvelle génération de cellules solaires avec la possibilité de fournir des rendements élevés à moindre coût. Les voies de mise en œuvre possibles pour ces cellules comprennent les cellules solaires multi-jonctions (SC-MJ) [11], les cellules solaires porteuses chaudes [12] et les cellules solaires à bande intermédiaire (SC-

BI) [13]. La cellule solaire multi-jonction est peut-être la plus courante des cellules de troisième génération, dans laquelle deux cellules ou plus sont empilées et connectées les unes aux autres afin d'absorber davantage le spectre solaire. Une cellule solaire à triple jonction GaInP /GaInAs / Ge a été démontrée avec un rendement de 41,1%, mais les coûts de fabrication restent encore élevés [14].

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

- Les cellules pérovskites qui sont des cellules composées d'un élément hybride organique-inorganique ayant une structure de pérovskite. Depuis 2016 le rendement de ces configurations est passé à 22.1 % ce qui les rend comme des alternatives attirantes.
- Dans une simple jonction PN, les photons qui présentent des énergies inférieures au gap du matériau semiconducteur, ne sont pas absorbés et par conséquent ne peuvent pas créer des paires électron-trou, la réponse spectrale de la cellule est ainsi limitée. Seule la portion du spectre solaire dont l'énergie des photons est supérieure au gap est utile. Une première réponse à ce problème est d'utiliser des systèmes à plusieurs niveaux constitués de simples jonctions possédant des gaps décroissants. Ainsi, il est possible d'exploiter la quasi-totalité du spectre solaire avec des hauts rendements de conversion.
- Les cellules solaires à nanostructures permettent d'exploiter les photons moins énergétiques qui ne sont habituellement pas absorbés par la cellule.

1.3 Rayonnement solaire

Le soleil constitue la plus importante source d'énergie dans le monde. Dans l'espace, hors de l'atmosphère terrestre, l'énergie totale transportée par le rayonnement solaire sur une distance soleil-terre est de l'ordre de 1350 W/m^2 (AM0) (voir figure 1.1). Cette énergie s'étale de l'ultraviolet ($0.2 \mu\text{m}$) à l'infrarouge lointain ($2.5 \mu\text{m}$). À la surface de la terre, le spectre solaire subit une atténuation et n'est plus alors le même que dans l'espace. Ce changement de spectre solaire est dû aux phénomènes d'absorption et de diffusion dans les gaz, l'eau et la poussière de l'atmosphère. En effet, des gaz tels que l'ozone (O_3), la vapeur d'eau (H_2O) et le dioxyde de carbone (CO_2) absorbent certaines bandes spécifiques de fréquence (notamment dans l'IR). La diffusion par molécules et les poussières contenues dans l'atmosphère conduit à une absorption relativement répartie sur tout le spectre solaire

visible. D'autre part, les conditions climatiques et la latitude du lieu d'observation influencent aussi le spectre solaire transmis à travers cette atmosphère.

La notion d'Air-Masse (AM) a été créée afin de comparer les performances de cellules solaires universellement et de caractériser le spectre solaire en termes d'énergie émise (Figure 1.1). L'air Masse mesure la puissance absorbée par l'atmosphère en fonction de l'angle θ du soleil par rapport au zénith on note par :

- AM_0 : L'irradiance hors atmosphère. Elle permet la prédiction de comportement des cellules pour des applications spatiales, $P \approx 1350\text{W/m}^2$.
- AM_1 : L'irradiance directe reçue sur le sol à $\theta = 0^\circ$ ($AM=1$). Dans ce cas le soleil est au zénith du lieu d'observation, $P \approx 1000\text{W/m}^2$.
- $AM_{1.5}$: C'est le spectre le plus étudié où l'irradiance reçue sur le sol est à 45° . Deux spectres peuvent être distingués : $AM_{1.5D}$ désigne le rayonnement direct reçu sur le sol avec $P \approx 833\text{W/m}^2$. $AM_{1.5G}$ représente le rayonnement global reçu sur la terre avec $P \approx 1000\text{W/m}^2$, il tient compte du rayonnement direct et diffus.

La figure 1.2 montre les spectres solaires dans ces trois cas.

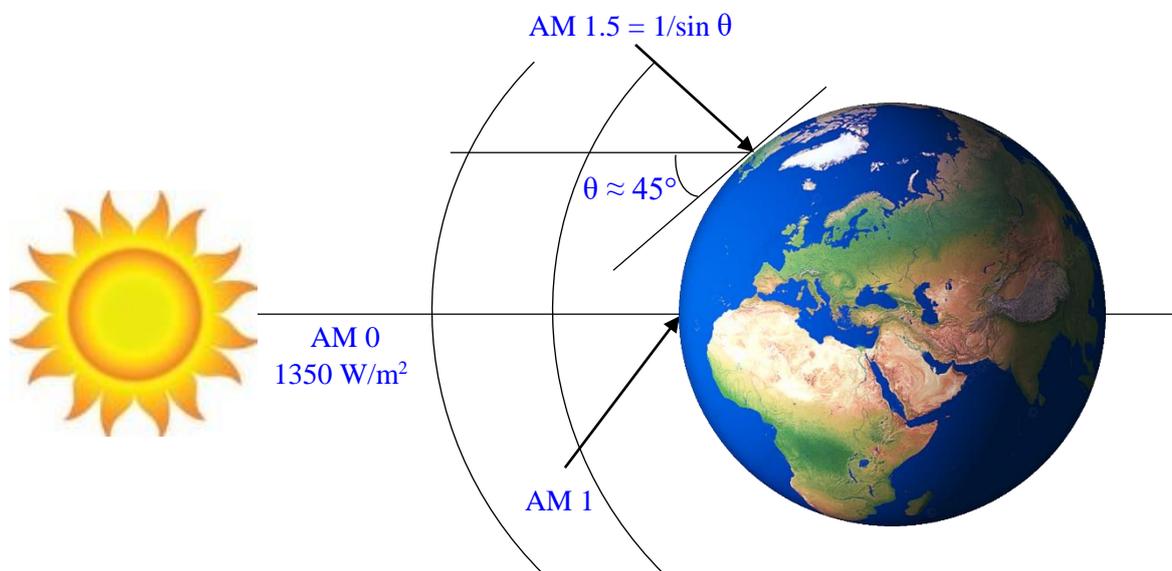


Figure 1.1 : Normes de mesures du spectre d'énergie lumineuse émis par le soleil, notion de la convention AM [15].

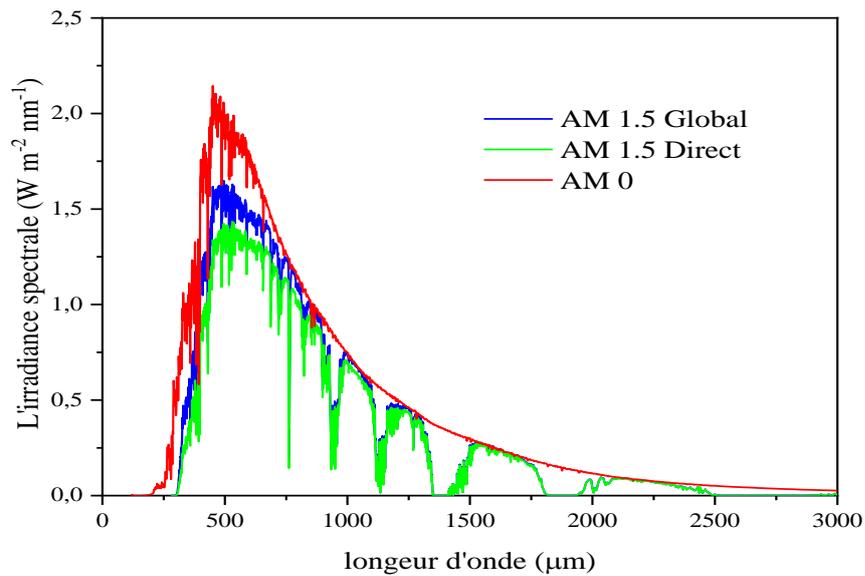


Figure 1.2 : L'irradiance spectrale selon la convention AM.

1.4 Bases des semi-conducteurs

Lorsqu'un matériau semi-conducteur est exposé à la lumière, des photons d'énergie (E_{ph}) supérieure ou égale à la bande interdite (E_g) du matériau seront absorbés. L'énergie absorbée rompt les liaisons covalentes et dans le processus crée des paires électron-trou (E-H). La création de ces paires E-H est à la base de la production d'énergie photovoltaïque. Les photons avec une énergie inférieure à la bande interdite traversent le semi-conducteur comme s'il était transparent.

Les photons dont l'énergie est supérieure à la bande interdite dissiperont l'excès d'énergie sous forme de chaleur dans la structure du réseau. L'absorption est essentiellement le mouvement des électrons de la bande de valence (BV) vers la bande de conduction (BC). Si les électrons et les trous créés par le processus d'absorption restent suffisamment longtemps dans le matériau semi-conducteur, ils se recombineront à nouveau en liaisons. Ce processus de recombinaison est renforcé par des défauts et des impuretés à l'intérieur ou à la surface du semi-conducteur.

Les photons à haute énergie sont absorbés à des faibles profondeurs des semi-conducteurs et les photons à plus faible énergie sont absorbés à des profondeurs plus profondes d'un matériau semi-conducteur. Le taux de génération (G) est le nombre de paires E-H créées par unité de volume et il est donné par :

$$G(x) = \alpha N e^{-\alpha x} \quad (1.1)$$

Où N est le flux de photons (photons par unité de surface par seconde) à la surface, α est le coefficient d'absorption et x est la distance pénétration dans le matériau semi-conducteur. Le coefficient d'absorption est une mesure de la profondeur à laquelle les photons d'une énergie particulière sont absorbés dans un matériau semi-conducteur.

Le matériau semi-conducteur le plus utiliser est le Si, mais les cellules solaires sont également fabriquées à partir de composés II-VI tels que les composés CdTe et III-V tels que GaAs et GaAsP. Le choix du matériau est fondé sur ses caractéristiques optiques, sa compatibilité avec le spectre solaire et son coût de fabrication. Le tableau 1.1 montre certains éléments utilisés pour produire les matériaux des cellules solaires. Le choix des matériaux utilisés sera détaillé dans le prochain chapitre.

Tableau 1.1 : Groupes II - VI du tableau périodique des éléments

II	III	IV	V	VI
	B	C	N	O
	Al	Si	P	S
Zn	Ga	Ge	As	Se
Cd	In	Sn	Sb	Te

La figure 1.3 montre le coefficient d'absorption en fonction de l'énergie des photons pour Si et GaAs. Puisque le Si est un matériau à bande interdite indirecte, une particule supplémentaire (phonon) est impliquée dans le processus d'absorption. En conséquence, la probabilité d'absorption de la lumière est inférieure à celle des matériaux à bande interdite directe. Par conséquent, le Si a un coefficient d'absorption inférieur par rapport au GaAs qui est un matériau à bande interdite directe. Cela rend le GaAs et d'autres matériaux à bande interdite directe attractifs pour les dispositifs optiques tels que les cellules solaires, les photodiodes et les lasers.

1.5 La jonction P-N

La jonction p-n forme la base de la plupart des cellules solaires et fait également partie intégrante des dispositifs électroniques tels que les lasers, les diodes électroluminescentes (LED), les photodiodes et les transistors. Une jonction p-n est formée par la jonction de deux matériaux semi-conducteurs cristallins de type n et de type p. Une région de déplétion, aussi

appelée zone de charge d'espace (ZCE), est formée à la frontière par la diffusion d'électrons du type n dans le type p et des trous du type p vers le type n. Par conséquent, un champ électrique s'accumule à travers la jonction qui empêche toute diffusion ultérieure à travers la jonction.

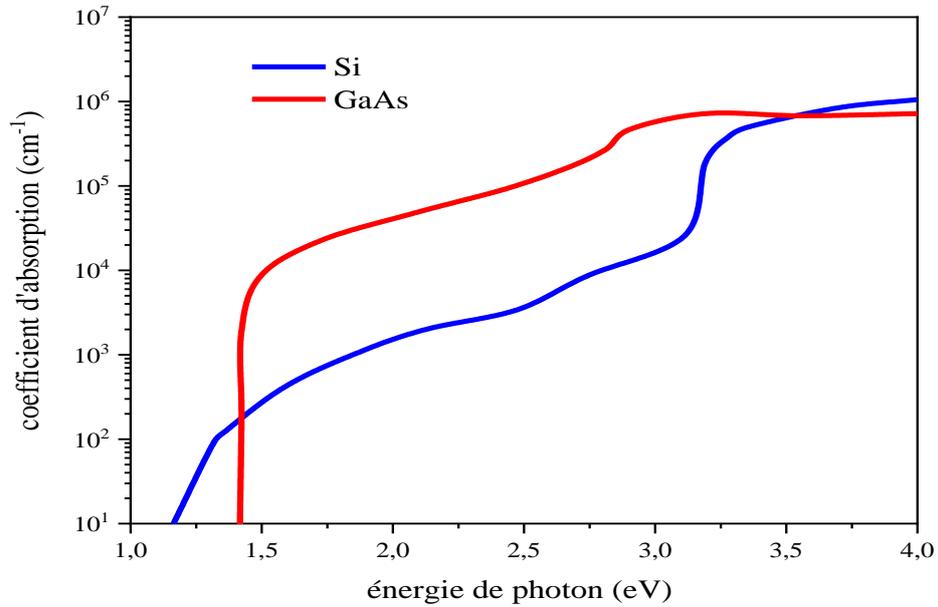


Figure. 1.3 : Coefficient d'absorption en fonction de l'énergie des photons pour Si et GaAs à 300K [17]

La tension appliquée à la jonction peut soit réduire le champ électrique favorisant un flux de courant de diffusion (polarisation directe), soit augmenter le champ électrique conduisant à une plus grande barrière au flux de courant (polarisation inverse). L'équation de diode décrivant le flux de courant à travers une jonction p-n en fonction de la tension a été dérivée par Shockley [16]. En dérivant cette équation, on a supposé que la jonction fût abrupte et qu'il n'y avait pas de génération ou de recombinaison dans la région de charge d'espace.

L'équation 1.2 donne le courant de Shockley qui, par rapport aux cellules solaires, est appelé densité de courant d'obscurité J_{obs} :

$$J_{obs} = J_0 \left(e^{\frac{qV}{nkT}} - 1 \right) \quad (1.2)$$

Où J_0 est la densité du courant de saturation inverse de la diode (densité du courant de fuite en l'absence de lumière), V est la tension appliquée aux bornes de la jonction ($q = 1.6 \times 10^{-19}$ C), q est la charge d'un électron, k est la constante de Boltzmann ($k = 1.38 \times 10^{-23}$ J.K⁻¹), T est la température en Kelvin (K) et n est le facteur d'idéalité. Pour une diode idéale le facteur d'idéalité est égal à 1 ($n = 1$). Ce facteur d'idéalité est basé sur l'hypothèse que toute recombinaison est radiative et se produit dans la masse de dispositif. En pratique, la recombinaison se produit dans d'autres parties du dispositif et cette recombinaison pourrait être non radiative. Dans ce cas, le facteur d'idéalité se situe généralement entre 1 et 2. La figure 1.4 récapitule les mécanismes d'absorption et de pertes dans une jonction p-n.

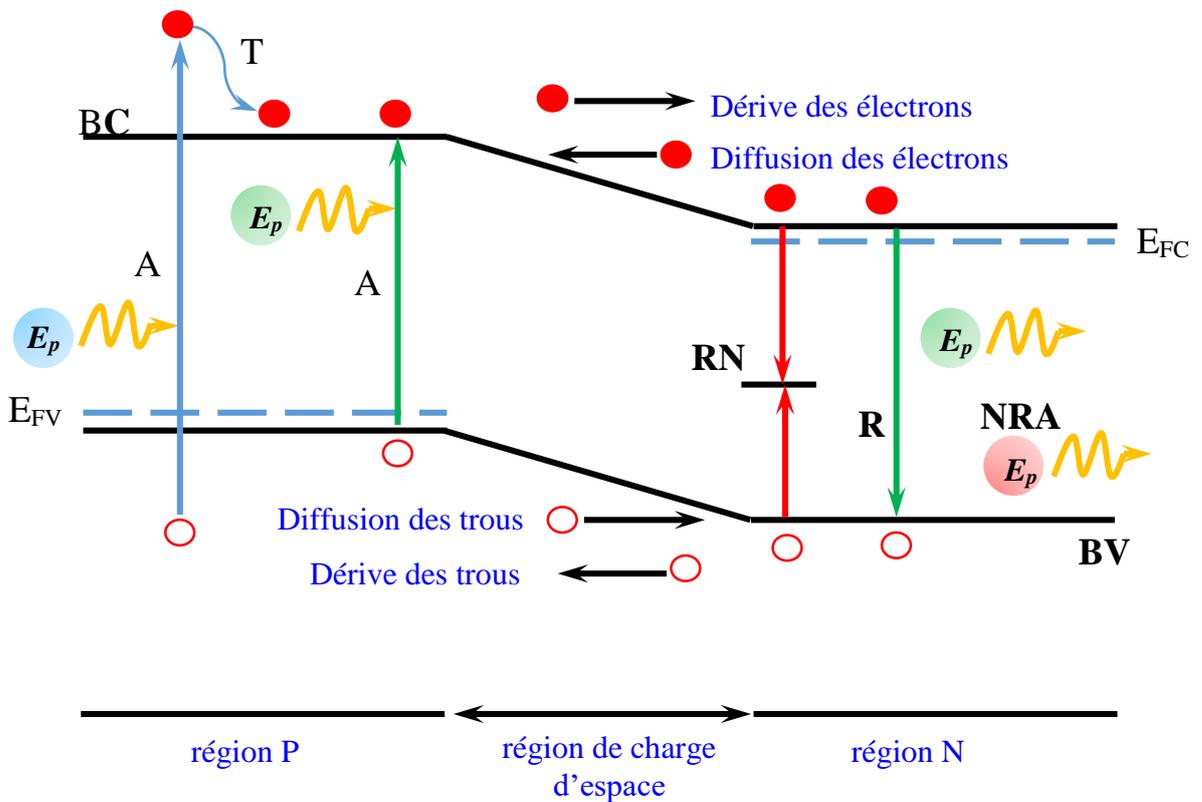


Figure 1.4 : La jonction P-N, l'Absorption est représentée par la lettre (A), la Thermalisation par la lettre (T), les recombinaisons non radiatives par (RN), les recombinaisons radiatives par (R), rayonnement non absorbé (RNA). Les niveaux de fermi sont désignés par (E_F).

Jonction P-I-N : La différence entre la jonction P-I-N et la jonction P-N est l'ajout d'un matériau intrinsèque entre le côté dopé P et le côté dopé N. Cette jonction possède une zone de déplétion plus large ce qui permet l'absorption d'un plus grand nombre de photons.

Toutefois le champ électrique y régnant est plus faible (sans polarisation) que celui présent dans la région de déplétion d'une jonction P-N.

1.6 Fonctionnement des cellules solaires

1.6.1 Cellules solaires idéales

Dans une cellule solaire à jonction P-N, les étapes de base du fonctionnement peuvent être identifiées comme suit :

- La génération de porteurs de charge (paires ET).
- La collection des porteurs entraînés par le champ électrique intégré dans la région d'appauvrissement.
- la génération de tension à travers la cellule solaire
- la dissipation de puissance dans une charge externe.

Le photocourant est produit par la génération et la collecte de porteurs générés par la lumière. La probabilité de collecte est améliorée si des porteurs de charge sont générés dans une longueur de diffusion de la jonction P-N. L'équation 1.3 donne le photocourant.

$$J_{ph} = q \int_0^W G(x)P_c(x)dx \quad (1.3)$$

Où J_{ph} est la densité de photocourant, w est l'épaisseur du dispositif et $P_c(x)$ est la probabilité de collecte à une profondeur de x dans le matériau.

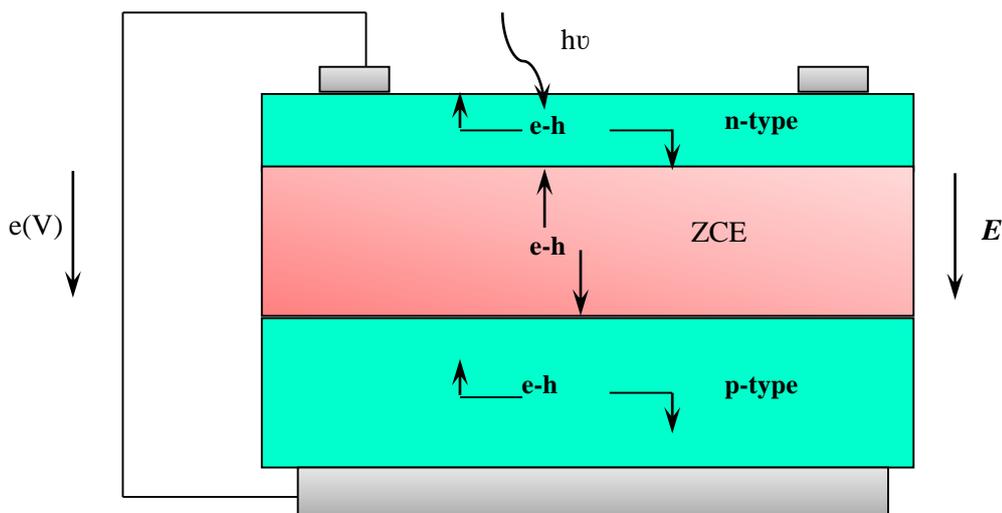


Figure 1.5 : Structure d'une simple cellule solaire [18].

Afin de produire de l'énergie, une cellule solaire doit générer à la fois une tension et un courant. L'effet photovoltaïque est le processus par lequel une tension est créée dans la cellule solaire. La collecte des porteurs générés par la lumière amène les électrons à se déplacer vers le type **n** et les trous à se déplacer vers le type **p**. Cette densité du courant de dérive est le photocourant J_{ph} , il circule dans le sens opposé du courant de la diode de diffusion. Dans des conditions de densité du courant de court-circuit ; la tension aux bornes de la cellule solaire est nulle car il n'y a pas d'accumulation de charge due aux porteurs sortant du dispositif sous forme de photocourant. Si une charge est placée à travers la cellule solaire, il y a une accumulation d'électrons dans le type **n** et des trous dans le type **p**.

Cette séparation de charge provoque une diminution du champ électrique net à travers la jonction P-N résultant en une augmentation du courant de la diode de diffusion. Un nouvel équilibre est atteint dans lequel une tension existe à travers la jonction et un courant circule également à travers la cellule solaire. Ce densité du courant est égale à la différence entre le courant de la diode de diffusion (c'est-à-dire le courant d'obscurité) et le photocourant, et peut s'écrire comme suit :

$$J_T = J_0 \left(e^{\frac{qV}{nkT}} - 1 \right) - J_{ph} \quad (1.4)$$

La caractéristique densité du courant-tension d'une cellule solaire, comme le montre la figure 1.6 (a), est essentiellement la superposition de densité du courant d'obscurité de la cellule solaire avec le photocourant [19]. La courbe J-V est déplacée vers le bas dans le quatrième quadrant où la puissance peut être extraite. La figure 1.6 (b) montre le circuit équivalent d'une cellule solaire, qui est une source de courant en parallèle avec une diode de redressement.

La source de densité du courant représente la photo-génération de courant et la diode représente la recombinaison radiative au sein de la cellule. Le facteur d'idéalité et le courant de saturation d'obscurité peuvent être augmentés pour tenir compte de la recombinaison non radiative dans une cellule solaire non idéale. Le courant de la diode de diffusion et le photocourant s'annulent et donc aucun courant ne circule.

1.6.2. Cellules solaires réelles

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

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

$$J = J_{01} \left(\exp \left(q \frac{(V-R_s J)}{n_1 k_B T} \right) - 1 \right) + J_{02} \left(\exp \left(q \frac{(V-R_s J)}{n_2 k_B T} \right) - 1 \right) + \frac{(V-R_s J)}{R_p} - J_{ph} \quad (1.5)$$

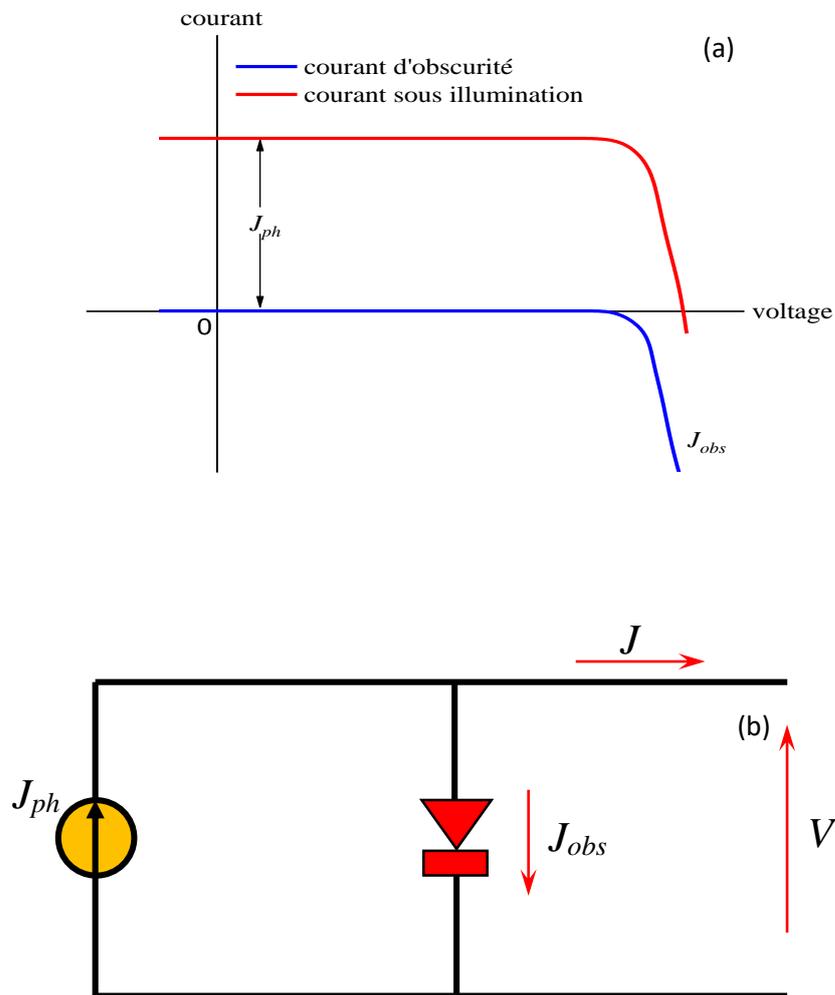


Figure 1.6 : (a) caractéristique J-V de la cellule solaire et (b) circuit équivalent de la cellule solaire

La Figure 1.7 représente le modèle électrique réel d'une cellule photovoltaïque (modèle à deux diodes)

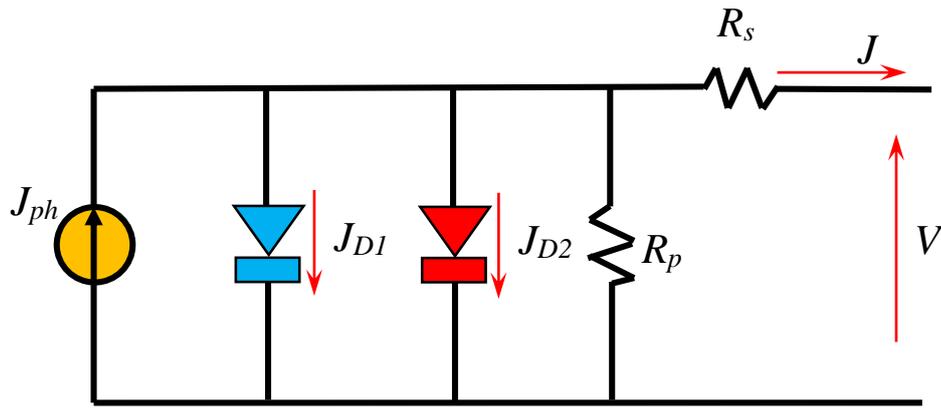


Figure 1.7 : Modèle électrique réel d'une cellule photovoltaïque [20].

Avec

R_s est la résistance en série de la cellule photovoltaïque en (ohm), qui modélise les pertes dues aux contacts ohmiques, R_p : est la Résistance de perte ou de shunt de la cellule photovoltaïque en (ohm), I_{01} et I_{02} sont les courant de saturation de la 1^{ère} diode D_1 et de la 2^{ème} diode D_2 en parallèle, n_1 et n_2 sont les facteur d'idéalité de la diode D_1 et D_2 , respectivement.

1.6.3 Pertes dans la cellule solaire

Les vraies cellules solaires ont des caractéristiques non idéales en raison des pertes qui se produisent dans la cellule solaire. La figure 1.8 montre un diagramme qui classe les pertes en composants optiques et électriques. Les pertes de sous-bande interdite entraînent une réduction de courant de sortie et la thermalisation du réseau entraîne une réduction de la tension de sortie. Ces deux pertes optiques représentent à elles seules plus de 50% des pertes dans une seule cellule solaire à bande interdite [21]. Les pertes de recombinaison entraînent également une réduction de la tension de sortie.

1.6.4 Paramètres caractéristiques d'une cellule photovoltaïque

1.6.4.1 Efficacité Quantique

L'efficacité quantique (EQ) est le rapport du nombre de porteurs collectés par une cellule solaire au nombre de photons incidents à une longueur d'onde donnée. Si tous les photons d'une longueur d'onde particulière sont absorbés et les porteurs collectés, alors l'EQ à cette longueur d'onde est de 1. Cela est vrai pour une cellule solaire idéale à toutes les longueurs d'onde. L'EQ dépend des propriétés d'absorption du matériau de la cellule solaire et des processus de transport des porteurs. Pour les structures de cellules solaires réelles,

l'EQ pourrait être réduit par une recombinaison de surface à de courtes longueurs d'onde et une recombinaison en masse à de longues longueurs d'onde. L'EQ pour une cellule solaire idéale et pratique est illustré à la figure 1.9.

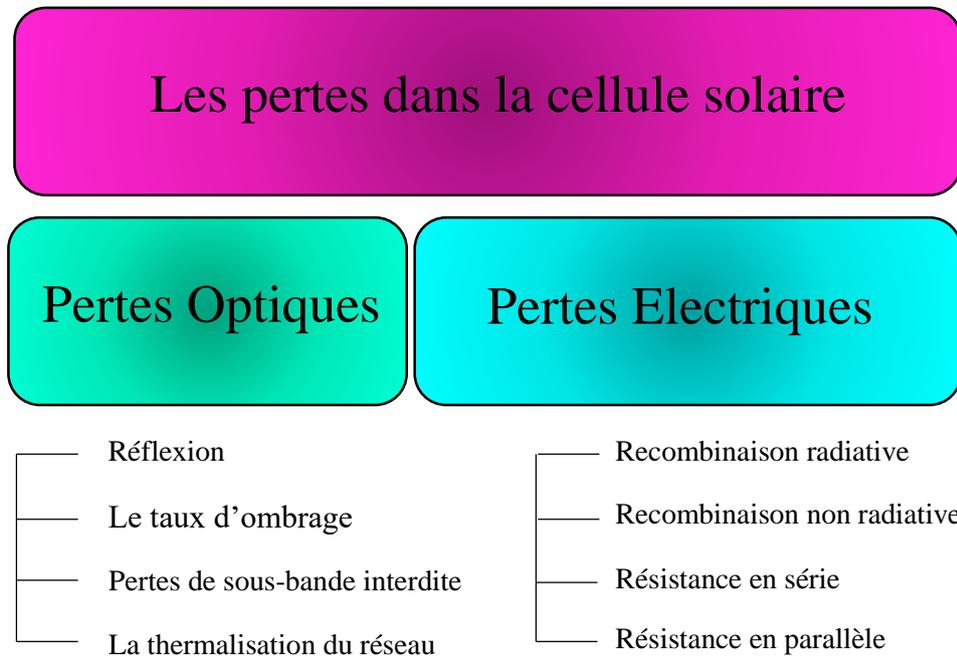


Figure 1.8 : Pertes dans une cellule solaire

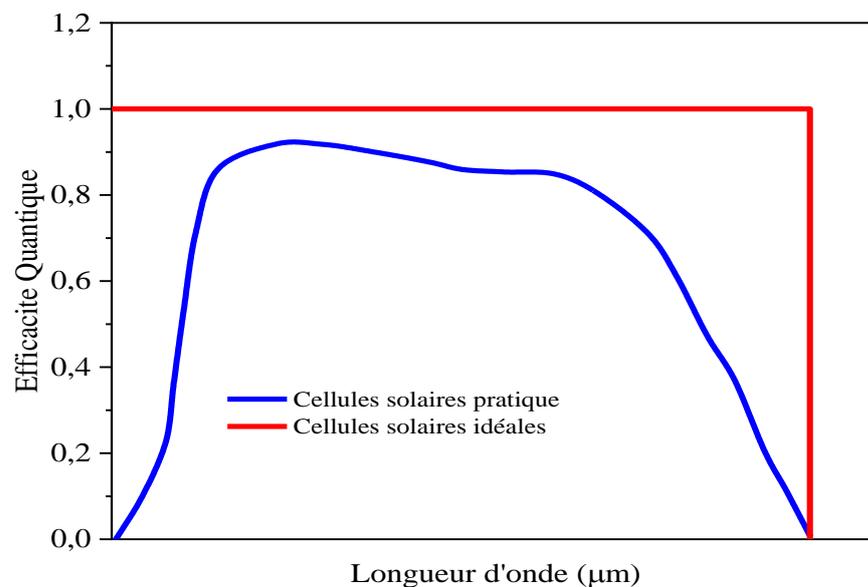


Figure 1.9 : Efficacité quantique de deux cellules solaires idéale et pratique.

L'efficacité quantique externe (EQE) d'une cellule solaire comprend les effets de transmission et de réflexion. L'efficacité quantique interne (IQE) peut être déterminée à partir de l'efficacité quantique externe en mesurant la transmission et la réflexion. Les équations respectives de l'efficacité quantique interne et externe sont :

$$EQE = \frac{J_{cc}}{q \phi_0 (1-R)} \quad (1.6)$$

$$EQI = \frac{J_{cc}}{q \phi_0} \quad (1.7)$$

Avec

J_{cc} est la densité du courant de court-circuit (mA/cm^2)

ϕ_0 est le flux de photons incidents transmis ou absorbés.

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

1.6.4.2 caractéristique J-V

La caractéristique J-V d'une cellule solaire est peut-être l'élément d'information le plus important dans la caractérisation des cellules solaires. La densité du courant de court-circuit (J_{cc}), la tension en circuit ouvert (V_{co}), le facteur de forme (FF) et le rendement (η) peuvent être déterminés à partir de J-V comme le montre la figure 1.10.

1.6.4.3 Courant de court-circuit

La densité de courant de court-circuit J_{cc} est le courant maximum qui peut être tiré d'une cellule solaire et il est atteint à une tension nulle. Pour une cellule solaire idéale, $J_{cc} = J_{ph}$. La densité de courant de court-circuit J_{cc} dépend de l'EQ, de l'intensité et du spectre de la lumière incidente. Cette dépendance est représentée par l'équation suivante

$$J_{cc} = q \int_0^{\infty} F(\lambda) QE(\lambda) d\lambda \quad (1.8)$$

Ou $F(\lambda)$ représente le flux des photons ($\text{m}^{-2}\text{s}^{-1}\text{nm}^{-1}$).

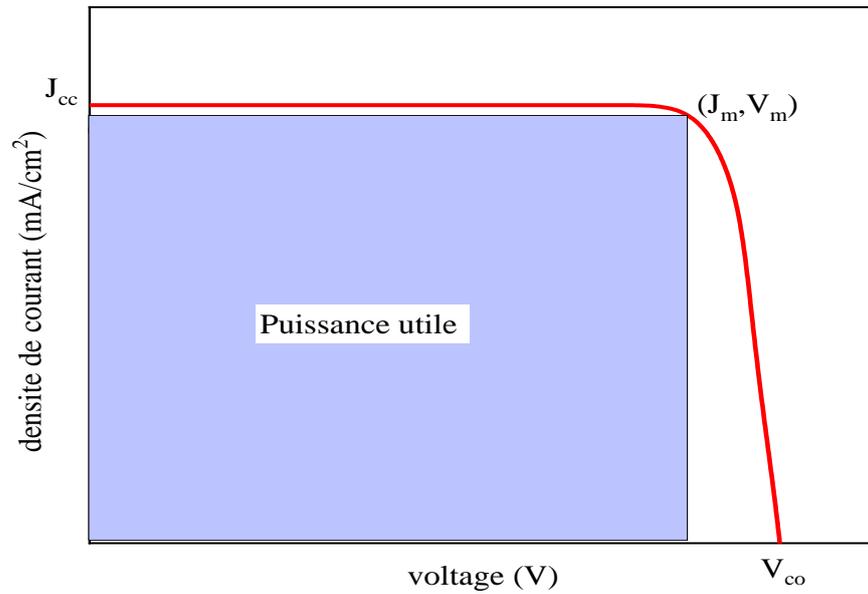


Figure 1.10 : Caractéristique J(V) d'une cellule photovoltaïque [22].

1.6.4.4 Tension de circuit ouvert

La tension en circuit ouvert (V_{co}) est la tension maximale disponible à partir d'une cellule solaire, elle est obtenue à un courant nul. Le V_{co} dépend de J_{cc} et J_0 . J_{cc} a généralement une petite variation alors que J_0 peut varier par ordres de grandeur. Puisque J_0 dépend de la recombinaison, le V_{co} peut être considéré comme une mesure de la recombinaison dans la cellule solaire. Le V_{co} est donné par :

$$V_{co} = \frac{nk_B T}{q} \ln\left(\frac{J_{cc}}{J_0} + 1\right) \quad (1.9)$$

1.6.4.5 Facteur de Forme (FF)

Le facteur de forme (FF) est le rapport de la puissance maximale qui peut être extraite d'une cellule solaire au produit du J_{cc} et du V_{co} comme indiqué par la relation suivante

$$FF = \frac{J_m V_m}{J_{cc} V_{co}} \quad (1.10)$$

Où J_m et V_m font référence à la densité de courant et à la tension au point de puissance maximale.

Le facteur de forme est une mesure de la qualité de la jonction p-n et de la résistance série d'une cellule solaire. Le point de puissance maximale est également un paramètre

important. La densité de puissance maximale (P_m) qui peut être extraite d'une cellule solaire peut alors être calculée par :

$$P_m = J_{cc} V_{co} FF \quad (1.11)$$

1.6.4.6 Rendement de conversion

Le rendement (η) est défini comme le rapport de la production d'énergie d'une cellule solaire à l'énergie solaire incidente d'entrée. C'est peut-être le paramètre le plus couramment utilisé pour une cellule solaire. Les mesures d'efficacité pour les cellules terrestres sont généralement effectuées avec le spectre solaire AM1.5 Global à 25° C. L'efficacité peut être décrite par le rapport de produit scalaire $J_{cc} \times V_{co}$, et la puissance incidente comme suit :

$$\eta = \frac{J_{cc} V_{co} FF}{P_{in}} \quad (1.12)$$

Où P_{in} est la densité de puissance d'entrée qui est de 1000 Wm^{-2} pour le spectre AM1.5 Global.

1.7 Conclusion :

Dans ce chapitre nous avons présenté les points importants de la physique d'une cellule photovoltaïque. Nous avons rappelé les types actuels de ces derniers, ainsi que leur principe de fonctionnement, aussi nous avons calculé le photocourant fournis par la cellule en premier temps, ensuite nous avons montré les modèles électriques idéals et réels de la photopile, ainsi que leurs paramètres caractéristiques principaux.

CHAPITRE 2

GENERALITES SUR LES NANOSTRUCTURES DE BASSE DIMENSIONALITÉ

2.1 Introduction

Dans ce chapitre nous allons présenter la technologie des cellules solaire a bande intermédiaire, plus précisément les cellules solaire a bande intermédiaire à base de boîte quantique tout en détaillant l'intérêt des boîtes quantiques pour surmonter les limites d'une cellule solaire conventionnelle. En outre nous allons présenter des généralités sur les nanostructures de basse dimensionnalité, on s'intéresse particulièrement aux propriétés et méthodes de fabrication des boîtes quantiques. Pour cela dans la première partie, nous allons présenter les propriétés électroniques et optiques des différentes nanostructures de basse dimensionnalité (puits quantiques PQs, boîtes quantiques BQs, et les fils quantiques FQs). Ensuite les matériaux semiconducteurs éligibles d'être boîtes quantiques seront exposés. Finalement, la méthode et les techniques expérimentales de la fabrication des BQs seront présentées.

2.2 Les cellules solaires multi jonction

Les cellules solaires multi-jonctions (CS-MJ), également appelées cellules tandem, sont actuellement les plus efficaces de toutes les cellules solaires. Développés à l'origine pour les applications spatiales, les CS-MJ ont maintenant trouvé leur acceptation pour des applications terrestres lorsqu'ils sont utilisés avec des concentrateurs pour les rendre rentables [23]. Ils doivent leur haut rendement à une conception qui permet à la cellule solaire d'absorber sélectivement dans différentes parties du spectre solaire. Un CS-MJ se compose de cellules solaires à jonction p-n connectées en série, la plus grande cellule solaire à bande interdite étant placée en haut et la plus petite en bas. Comme le montre la figure 2.1 (b), les cellules individuelles sont reliées par une jonction tunnel.

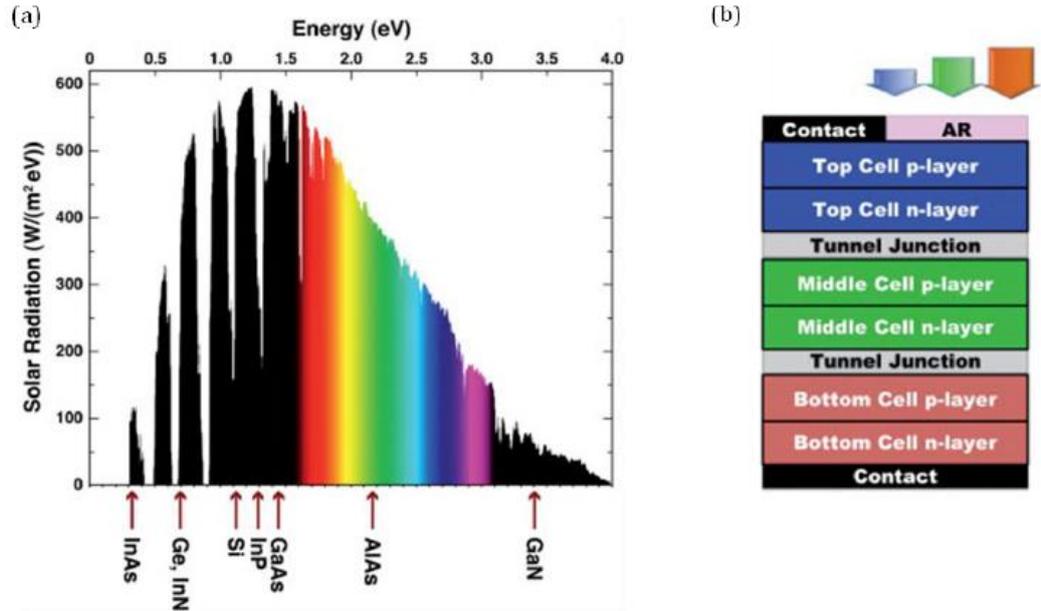


Figure 2.1 : Energie de bande interdite des semi-conducteurs représentés sur le spectre AM1.5 (a) et la structure des cellules solaires multi-jonctions(b) [24]

L'attribution et la distribution efficaces des bandes interdites dans le CS-MJ sont essentielles pour atteindre des rendements élevés. Une large gamme de bandes interdites est disponible en faisant des alliages composés par des semiconducteurs III.V (illustrés sur la figure 2.1 (a)). Étant donné que la cellule produisant le courant le plus bas du SC-MJ définira le courant pour toute la cellule, il est important de s'assurer que le courant excessif n'est pas gaspillé. La course est lancée pour trouver un matériau à bande interdite de 1,0 eV qui peut être placé dans la région de limitation de courant d'un CS-MJ tel que InGaP / GaAs / Ge pour améliorer le courant de court-circuit et l'efficacité. Des calculs d'équilibrage détaillés ont montré que l'accord spectral du CS-MJ par des boîtes quantiques pouvait conduire à une augmentation de l'efficacité [25].

2.3 Les cellules solaires à bande intermédiaire

La cellule solaire à bande intermédiaire (CS-BI) peut dépasser la limite d'efficacité Shockley-Quiesser de 30% [26] pour une cellule solaire à jonction unique grâce à une utilisation plus efficace du spectre solaire. Comme déjà mentionné, l'une des pertes majeures dans les cellules solaires à bande interdite unique sont les pertes de photons sous-bande interdite. Étant donné qu'une quantité considérable du spectre solaire se trouve dans la région infrarouge de basse énergie, il est nécessaire d'exploiter ces photons de basse énergie si l'on veut améliorer l'efficacité des cellules solaires. La figure 2.2 illustre le concept CS-BI. La

bande intermédiaire (BI) dans la bande interdite du semi-conducteur permet l'absorption des photons sous-bande interdite. En plus de l'absorption habituelle des photons par les transitions électroniques entre la bande de valence (BV) et la bande de conduction (BC), il existe un processus d'absorption à deux photons avec des transitions entre la BV et la BI, puis entre la BI et la BC. Un niveau quasi de Fermi sera associé à chaque bande (E_{FV} , E_{FC} , E_{FI}) du fait que la relaxation des porteuses entre bandes est plus lente qu'à l'intérieur des bandes [27].

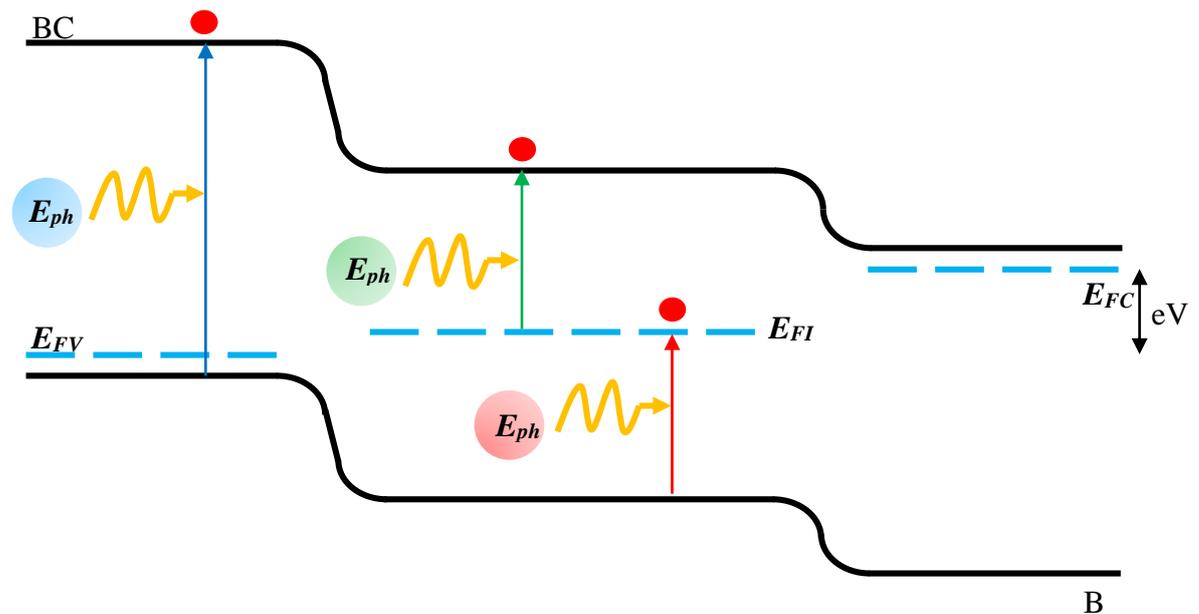


Figure 2.2 : phénomène d'absorption des photons a faible énergie dans des cellules solaire à bande intermédiaire

Afin d'atteindre une augmentation de l'efficacité par concept SC-BI, le photocourant doit être augmenté par absorptions de photons supplémentaires, sans réduction de la tension de sortie. Les niveaux individuels de quasi-Fermi pour les bandes d'énergie sont essentiels pour que cela se produise. La tension extraite de la SC-BI est la différence entre les niveaux quasi-fermis pour les électrons (E_{FC}) dans la BC et les trous (E_{FV}) dans la BV, divisée par la charge électronique.

Le circuit équivalent pour une cellule solaire à bande intermédiaire est illustré par la figure 2.3. Les deux sources de courant supplémentaires représentent l'absorption des photons sous-bande interdite et les deux diodes supplémentaires représentent les nouvelles voies de recombinaison des porteurs. La modélisation suggère qu'à des concentrations d'illumination élevées, les CS-BI auront une efficacité plus élevée que les cellules à bande

interdite simple car à des densités de courant élevées, la recombinaison de la BC vers la BV (J_{CV}) est plus dominante que la recombinaison par BI (J_{CI} et J_{IV}). [28].

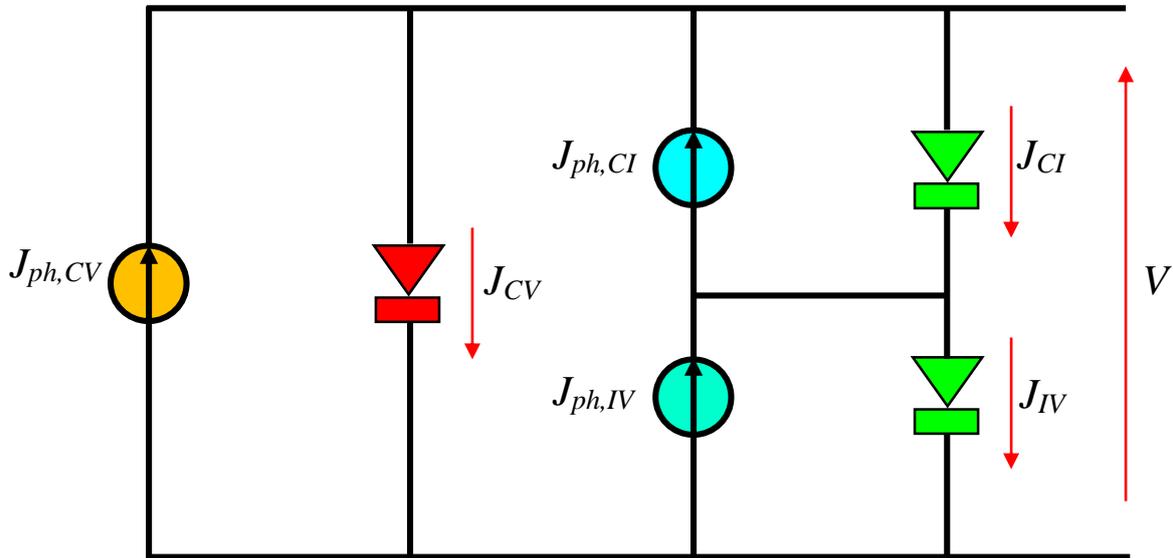


Figure 2.3 : Circuit équivalente d'une cellule solaire à bande intermédiaire

Comme déjà mentionné, les SCMJ et les SCBI sont des approches de troisième génération qui visent à augmenter l'efficacité en absorbant davantage le spectre solaire. Le circuit équivalent du SCMJ sera constitué de cellules individuelles (source de courant et diode) connectées en série. Il est intéressant de noter que le circuit équivalent de la SCBI est également constitué de cellules individuelles ; deux connectés en série puis connectés en parallèle avec un troisième.

2.4 Les cellules solaires à bande intermédiaire à base de boîte quantique

Un certain nombre de matériaux ont été proposés pour la mise en œuvre des SC-BI. Parmi ceux-ci, citons le $Ti_xGa_{1-x}P$ [29], les semi-conducteurs de type chalcopyrite dopés au métal de transition [30] et les composés II-VI dopés au Cr [31]. Cependant, à ce jour, la voie la plus prometteuse vers la mise en œuvre de l'SC-BI a été l'utilisation des nanostructures, plus précisément les boîtes quantiques BQs.

Pour bien comprendre le principe de fonctionnement des cellules solaires à bande intermédiaire à base de boîte quantique, il est indispensable de définir d'abord les

nanostructures de basse dimensionnalité, on s'intéresse particulièrement sur les propriétés et les méthodes de fabrication des boites quantiques.

2.5 Propriétés des nanostructures de basse dimensionnalité

2.5.1 Propriétés électroniques

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

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

Avec \hbar est la constante de Planck, m^* la masse effective de l'électron (trou) dans le matériau semiconducteur, E l'énergie de l'électron (trou). Pour que le confinement quantique y aura lieu, il faut que l'énergie de l'électron (trou) E , soit supérieur à l'énergie thermique k_{BT} dont la longueur d'onde associée s'appelle la longueur d'onde de de Broglie thermique [32] :

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

La densité d'états qui est définit comme étant le nombre des états disponibles pour un électron (trou) dans une gamme d'énergie, elle dépend du degré de confinement des porteurs de charge dans le système donné [33]. Dans un semi-conducteur massif 3D où il n'y a pas de confinement des porteurs, on voit clairement que la densité d'états prend une forme continue comme le montre la figure (2.4.b) [34] :

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

On peut former un puits quantique PQ en insérant un matériau semiconducteur "A" de petit gap E_{gA} entre deux matériaux semi-conducteurs "B" de grand gap E_{gB} , à condition que le matériau "A" soit suffisamment mince comme le montre la figure (2.5.a).

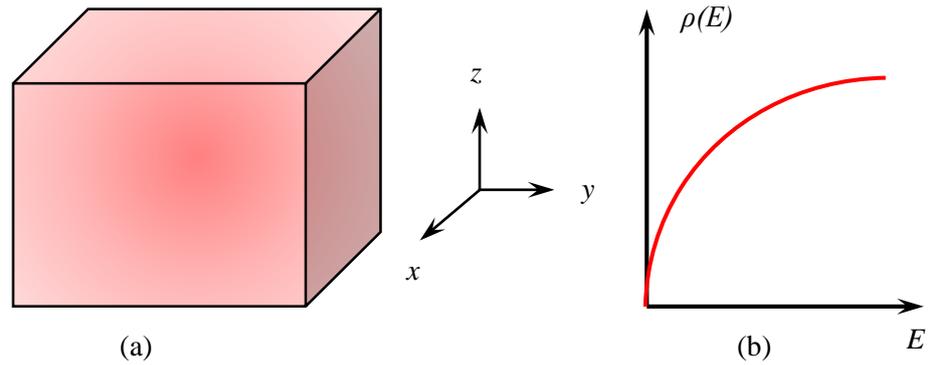


Figure 2.4 : (a) structure d'un semiconducteur massif, (b) évolution de la densité d'états en fonction d'énergie dans un semiconducteur massif [35][36].

Dans un puits quantique 2D, les porteurs de charges peuvent se déplacer en deux dimensions et par conséquent ils seront confinés dans une couche 2D. L'énergie sera quantifiée selon la direction de confinement (disons la direction y). La densité d'états est montrée dans la figure (2.5.c) et elle prend la forme d'escalier [34] :

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

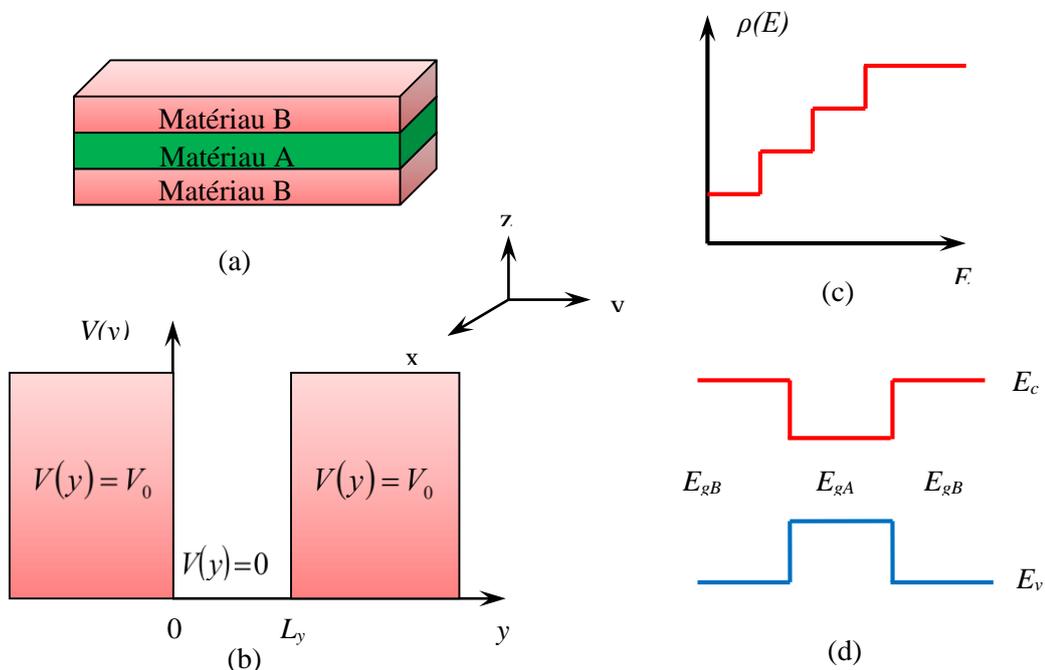


Figure 2.5 : (a) structure d'un puits quantique, (b) potentiel fini dans la structure à puits quantique, (c) évolution de la densité d'états en fonction de l'énergie dans un puits quantique. (d) diagramme d'énergie d'une structure à puits quantique [35].

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

La structure de puits quantique peut être gravée par photolithographie, par lithographie par un faisceau électronique ou bien par un faisceau d'ions concentré selon l'axe de la croissance qui est dans ce cas l'axe z , pour laisser une partie de puits quantique libre. La structure obtenue est appelée le fil quantique FQ. Dans un fil quantique 1D, les porteurs de charges peuvent se déplacer en une direction et ils seront confinés selon les deux directions de l'espace. L'énergie sera quantifiée selon les deux directions de confinement (disons la direction y et z). La densité d'états est représentée dans la figure (2.6.b), elle prend dans ce cas la forme suivante [34] :

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

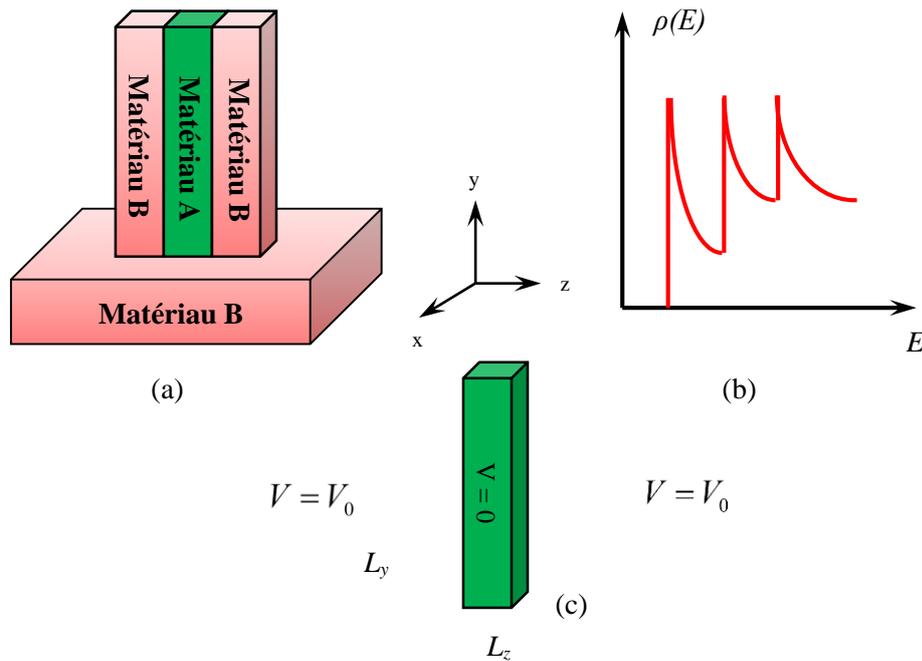


Figure 2.6 : (a) structure d'un fil quantique, (b) évolution de la densité d'états en fonction d'énergie dans un fil quantique, (c) potentiel fini dans la structure à fil quantique [35][36].

La même structure de puits quantique peut être gravée pour former cette fois des piliers et comme le montre la figure (2.7.a). La nouvelle structure formée est appelée une boîte quantique BQ. Dans une boîte quantique 0D, les porteurs sont confinés dans les trois directions de l'espace. Cela conduit à des niveaux d'énergie discrets similaires aux orbitales

atomiques dans un cristal. La densité d'états pour une BQ carrée est montrée dans la figure (2.7.b) et elle correspond à une série de fonctions de Dirac [34] :

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

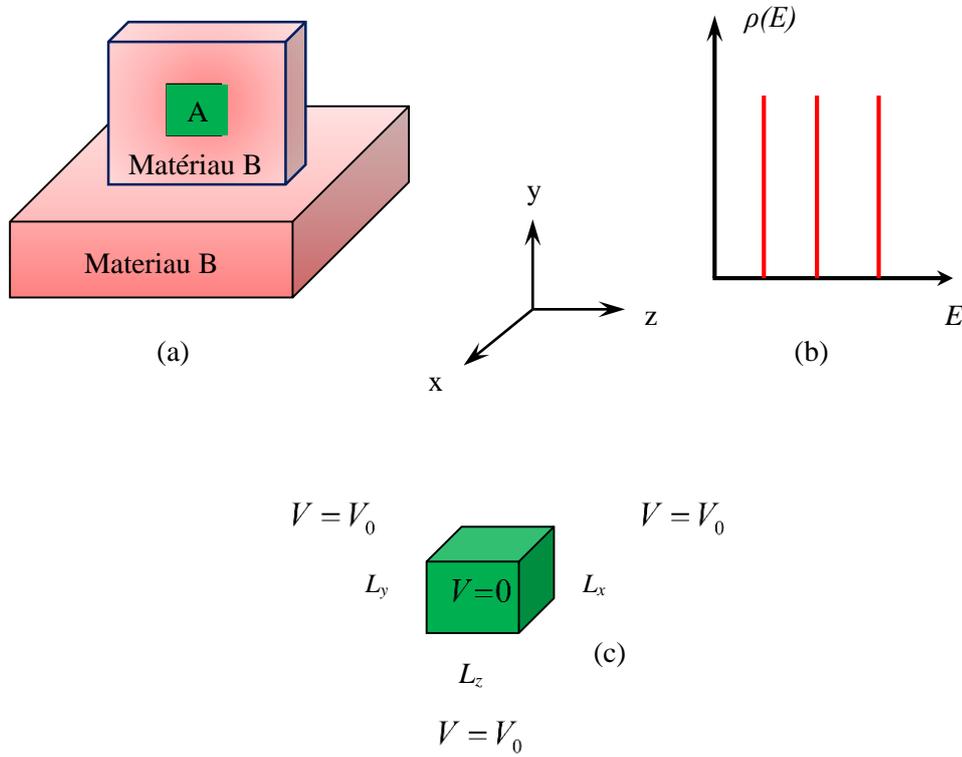


Figure 2.7 : (a) structure d'une boîte quantique, (b) évolution de la densité d'états en fonction de l'énergie dans une boîte quantique, (c) potentiel fini dans la structure à boîte quantique [35-36].

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

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

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

Dans un puits quantique (structure 2D), les porteurs sont confinés dans une plaque ultra mince d'une épaisseur L_y le long de l'axe y par une barrière de potentiel ou V_0 représente la discontinuité de la bande de conduction comme le montre la figure (2.5.b).

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

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

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

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

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

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

La solution possible de l'équation de Schrödinger dans ce cas est [36 ,37]:

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

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

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

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

En dehors de puits quantique, la solution de l'équation de Schrödinger s'écrit [37] :

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

avec :

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

Dans un fil quantique (structure 1D), le potentiel $V(r)$ est la somme du potentiel de confinement dans le plan (yz) et du potentiel dans l'axe de mouvement des porteurs x [37].

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

La fonction d'onde est le produit des deux composants qui est donnée comme suit [37] :

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

La fonction d'onde dans cette équation peut être découpée sous la forme suivante [36] :

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

Par la méthode de séparation de variables, l'énergie superposée devient [36] :

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

avec

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

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

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

et :

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

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

2.5.2 Propriétés optiques

La photoluminescence (PL) est un phénomène selon lequel un matériau absorbe des photons à haute énergie et génère des photos porteuses ; ces photoporteurs se relâchent dans des états de basse énergie, en particulier l'état fondamental du matériau, et émettent des photons par la transition de ces états. Par spectroscopie de la luminescence, les états énergétiques du matériau sont informés. Par exemple, la position des raies d'émission de la PL nous permet de calculer l'énergie de la bande interdite du semiconducteur analysé (BQ) et leurs dimensions. La largeur de ces raies dépend de la composition et distribution en taille

des BQs. Les intensités de ces raies dépendent de la température, et les paramètres de transport des BQs. Par ailleurs, l'observation des bandes d'émission dans le spectre de PL nous permet d'estimer les séparations inter-niveaux (ΔE_i^e , ΔE_i^h) entre les différents états excités d'une BQ [38][39].

La figure 2.8 représente le spectre de photoluminescence des BQs de InAs insérés dans une matrice de GaAs. On distingue trois raies d'émissions correspondantes à la recombinaison des porteurs dans les BQs d'InAs, dans la couche de mouillage d'InAs (wetting layer WL) sur laquelle les boîtes quantiques d'InAs se forment, et dans le volume de GaAs. On voit clairement que la raie relative aux BQs est plus intense par rapport aux autres régions.

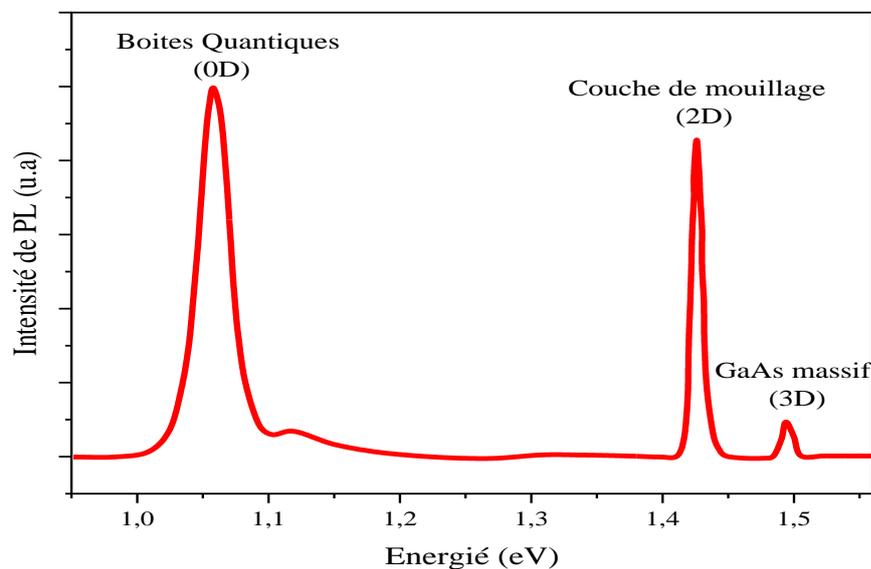


Figure. 2.8 : Spectre de photoluminescence d'une structure à boîte quantique InAs/GaAs à une température ambiante [40]

2.6 Croissance auto-organisée des BQs

2.6.1 Modes de croissance

La croissance cristalline a toujours été d'un grand intérêt fondamental et technologique. Elle a connu une impulsion forte grâce au développement de méthodes comme l'épitaxie par jets moléculaires qui permettent de réaliser le dépôt de couches très fines sur des substrats solides conduisant ainsi à l'élaboration de dispositifs très utiles en microélectronique, enregistrement magnétique, etc. Mieux on comprendra les processus

fondamentaux intervenant lors de la croissance, meilleures seront la qualité et les performances de ces dispositifs.

En distinguant, trois principaux modes de croissance hétéroépitaxiale des couches minces se dégagent comme indique la figure 2.9 :

- Le mode de croissance Volmer-Weber (VW)
- Le mode de croissance Frank-Van der Merwe (FM)
- Le mode de croissance Stransky-Krastanov (SK)
- Ce dernier est le mode le plus employé pour la croissance des boîtes quantiques, Il est proposé par I.N. STRANSKI et L. KRASTANOV [41] en 1939, et mis en application en 1985 [42].

Les trois modes de croissance ont le même principe qui consiste à croître une couche mince d'un matériau par épitaxie sur un substrat. Cette croissance par épitaxie dépend essentiellement de l'interaction entre les atomes et la surface du substrat. Dans le mode de croissance VW, les interactions adatoms-adatoms (Un adatome est un atome isolé au contact de la surface d'un cristal) sont forts que ceux de adatoms et la surface, ce qui provoque la formation des îlots tridimensionnelle 3D [43]. Le grossissement de ces îlots entraîne la croissance de multicouches rugueuses sur la surface du substrat. Cependant, dans le mode de croissance FM, les adatoms s'attachent aux sites de la surface, ce qui entraîne la croissance des couches complètes et lisses [43-44].

Le mode SK est le cas intermédiaire caractérisé par la croissance d'une couche 2D et des îlots 3D. C'est un mode d'évolution de la morphologie de la surface des couches contraintes intéressante. Cette méthode consiste à faire croître une couche épitaxiale mince d'un matériau en désaccord de maille par rapport au substrat. Au début de processus, les atomes de la couche épitaxiale s'adaptent au paramètre de maille de substrat ce qui entraîne une contrainte élastique et le résultat est qu'une couche 2D que l'on appelle couche de mouillage (CM) commence à apparaître. Après certaine épaisseur appelée épaisseur critique, l'énergie élastique accumulée devient suffisante pour l'apparition de petits îlots tridimensionnels 3D dans la couche CM.

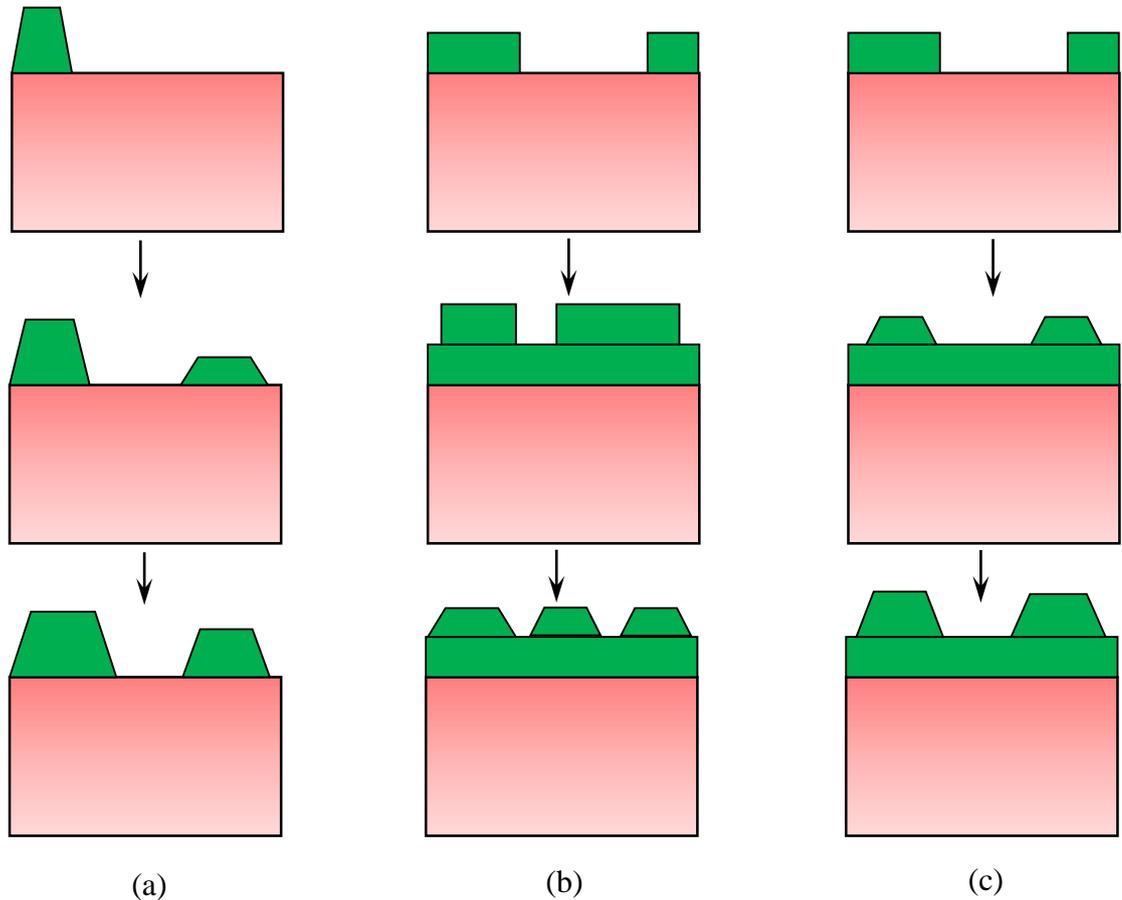
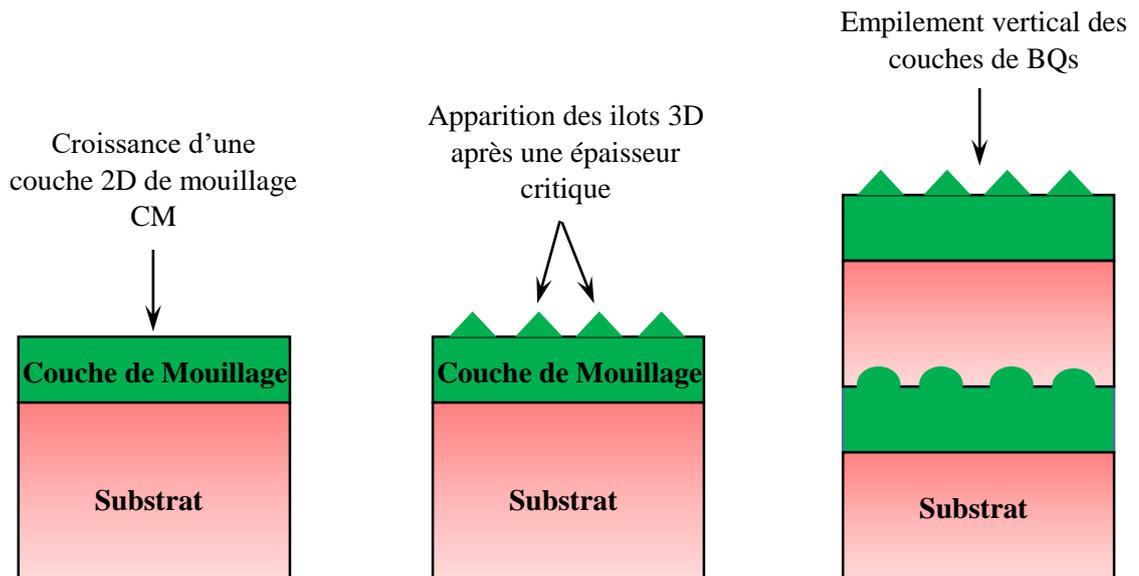


Figure 2.9 : (a) mode de croissance Volmer-Weber (VW : formation des ilots), (b) mode de croissance Frank-van der Merwe (FM : couche par couche), (c) mode de croissance Stranski-Krastanov (SK : couche+ilots).

Par exemple, après la déposition de 3 monocouches MC de Ge sur Si (001), des ilots quantiques 3D commencent à se former comme le montre la figure (2.9.a). Pour le système d'InAs/GaAs l'apparition des ilots 3D s'effectue après le dépôt de 1.5-1.7 MC d'InAs [34]. Ces ilots sont ensuite recouverts par un matériau barrière, cette étape est appelée l'encapsulation, elle joue a un rôle privilégié pour l'obtention d'une véritable boîte quantique dans le coté de la forme et de la composition [42].

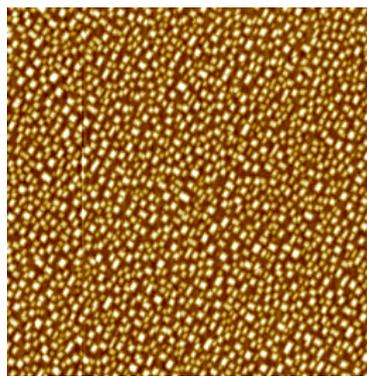
Dans le cas où les couches barrières sont plus minces, on aura un couplage de la contrainte par la formation d'un empilement vertical des couches de BQs comme la figure (2.10.a) montre. Généralement, les ilots formés sont caractérisés par une hauteur de 2 à 5 nm et un diamètre de quelques dizaines de nanomètres. La densité, la taille et la forme de ces ilots dépendent du paramètre de maille, la quantité de matière déposée, et de la longueur de

diffusion des adatoms. Les systèmes les plus étudiés et réalisés sont In(Ga)As/GaAs et Ge/Si sous épitaxie par jets moléculaire (MBE molecular beam epitaxy) et épitaxie en phase vapeur aux organométalliques (MOCVD metalorganic vapor phase epitaxy)- qui utilisent le mode de croissance SK. Des images prises par microscopie à force atomique (AFM atomic force microscopy) des structures à boîtes quantiques Ge/Si et InGaAs/GaAs, sont présentées dans les figures (2.10.b) et (2.10.c) respectivement.

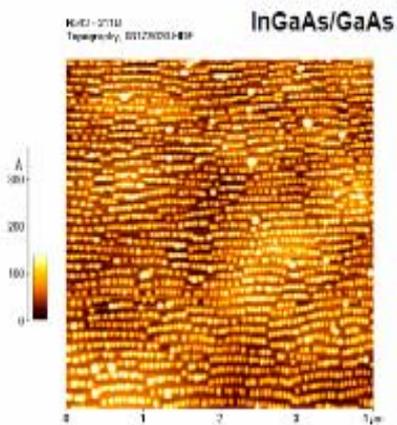


$$a_{\text{couche épitaxiale}} \neq a_{\text{substrat}}$$

(a)



(b)



(c)

Figure 2.10 : (a) étapes de la méthode de croissance Stranski-Krastanov, (b) image AFM d'une structure à boîtes quantiques de Ge/Si, (c) image AFM d'une structure à boîtes quantiques d'InGaAs/GaAs [45].

2.6.2 Contrainte dans les boites quantiques

Comme nous avons mentionnés précédemment, l'empilement vertical des plans de BQs provoque l'accumulation de la contrainte à l'intérieur de la structure, et après un certain nombre de ces plans de BQs, cette contrainte relaxe plastiquement ce qui crée des dislocations et des défauts. Afin d'éviter ce phénomène, la densité d'énergie élastique totale dans la structure ne doit pas dépasser une certaine valeur critique. Cette dernière est donnée par la relation suivante [46] :

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

Avec $N_{empilement}$ est le nombre d'empilement, $\langle \varepsilon_{\perp} \rangle$ est la contrainte moyenne perpendiculaire aux couches de BQs, e est l'épaisseur des couches d'espacement entre les différents plans de BQs, et A est une fonction de constants élastiques de chaque couche, elle est donnée par [46]

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

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

Citant qu'il existe deux types de contrainte : contrainte compressive et contrainte extensive, ces deux contraintes ont une relation directe avec le signe de la différence entre le paramètre de maille de la couche épitaxiale et celui du substrat comme il est indiqué dans la figure (2.11).

La contrainte de l' $i^{\text{ème}}$ couche dans un empilement des plans de BQs est formée par deux composantes qui sont la contrainte parallèle $\varepsilon_{//i}$ et la contrainte perpendiculaire $\varepsilon_{\perp i}$ et sont donnés par les relations suivantes, respectivement [47] :

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

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

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

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

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

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

Parmi les techniques utilisées à l'heure actuelle pour réduire l'accumulation de la contrainte dans les structures à boîtes quantiques est l'utilisation des couches de compensation de contrainte. Cette technique consiste à introduire des couches d'espacement entre les différents plans de BQs ayant un paramètre de maille adapté par rapport à celui du substrat. Par exemple dans le système InAs/GaAs où la contrainte est compressive, l'insertion des couches de compensation de la contrainte de GaNAs ou GaP dans les couches d'espacement de GaAs [48-49] peut réduire la contrainte accumulée dans un tel système comme le montre la figure (2.12).

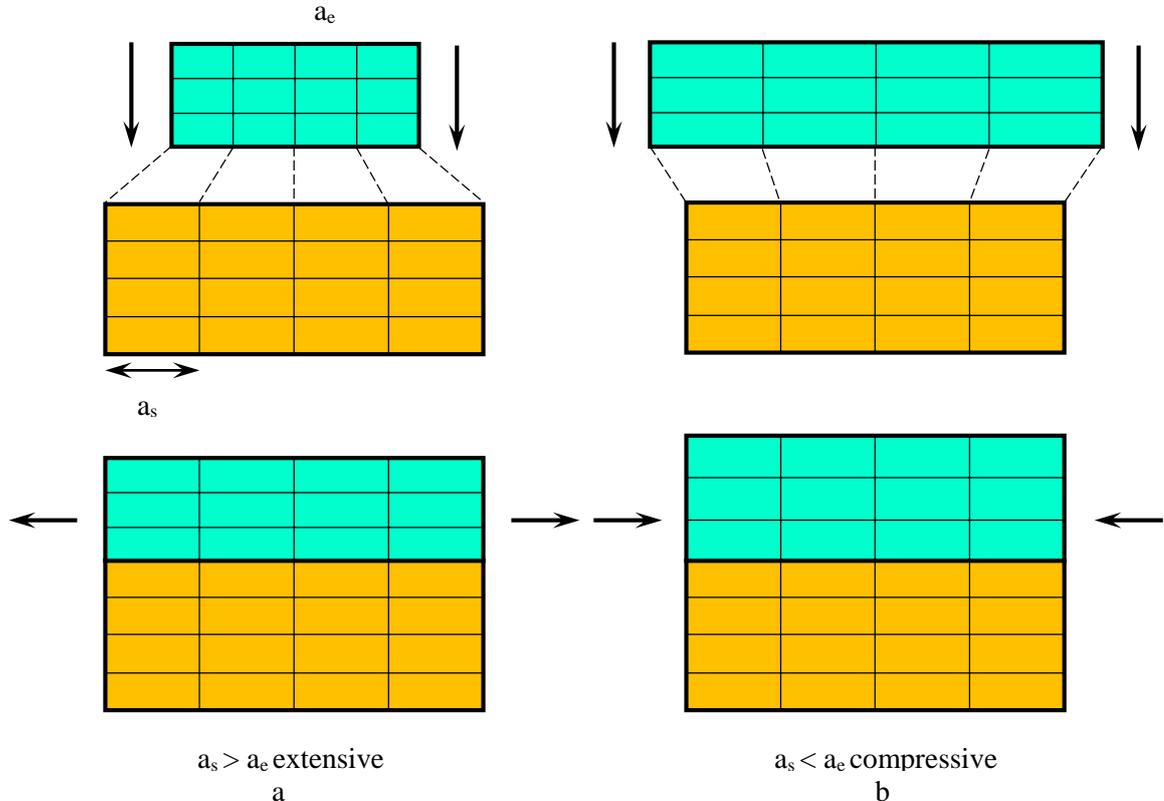


Figure 2.11 : Types de contrainte : (a) contrainte extensive, (b) contrainte compressive

[47].

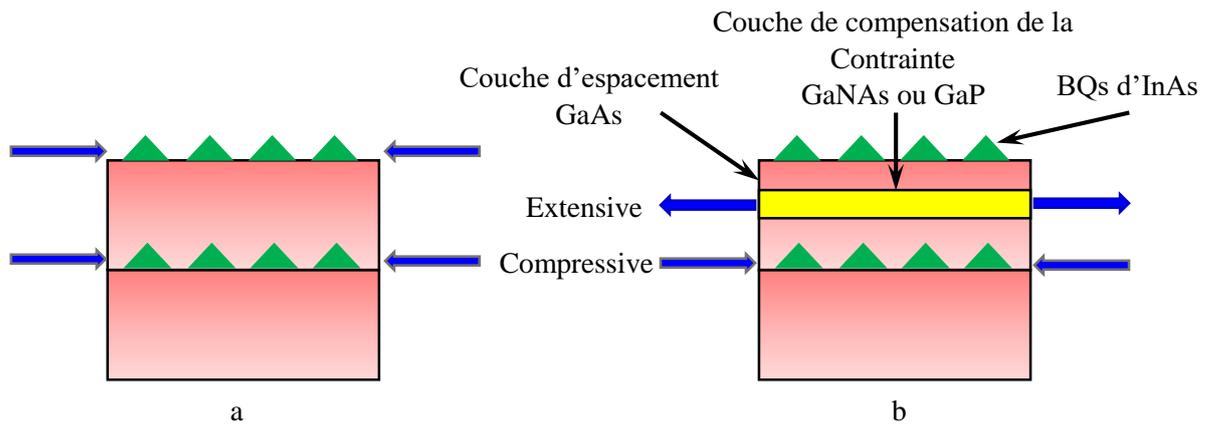


Figure 2.12 : Technique de compensation de la contrainte : (a) structure InAs/GaAs sans couches de compensation, (b) structure InAs/GaAs avec les couches de compensation [48].

La figure (2.13) montre une image prise par microscope électronique par effet tunnel TEM d'une structure qui contient 10 empilements de boîtes quantiques d'InAs/GaAs sans et avec couche de compensation de la contrainte GaP. On voit clairement que la contrainte interne compressive augmente avec l'insertion des plans de boîtes quantiques, ce qui produit les défauts et les contraintes dans la structure. En plus, cette accumulation de la contrainte influe négativement sur la densité et la taille de BQs comme le montre la figure (2.13.a). L'introduction des couches de compensation de la contrainte GaP qui possède un paramètre de maille (5.450 \AA) inférieur à ce de GaAs (5.653 \AA), crée une compensation extensive ce qui compense la contrainte compressive accumulée et améliore la qualité des BQs d'InAs comme il est clair dans la figure (2.13.b).

2.7 Techniques de fabrication et de croissance des BQs

Des progrès spectaculaires réalisés dans le domaine de la physique des semiconducteurs et de ses possibles applications ont été rendus possibles grâce à une bonne maîtrise des méthodes de croissance. La fabrication des structures à BQs commence par la croissance d'une hétérostructure. Il existe des différentes techniques de conception et d'analyse des structures à BQs employés dans les laboratoires [48][50]. Parmi toutes les techniques de croissance, nous allons détailler le principe de la technique d'Épitaxie par Jet Moléculaire (EJM) ou MBE. Un avantage majeur de MBE par rapport aux autres modes d'épitaxie par exemple l'épitaxie en phase vapeur aux organométalliques (EPVOM)), ou MOCVD, est le fait que la croissance peut être suivie par la diffraction d'électrons de haute

énergie en incidence rasante (RHEED), d'où une topographie en temps réel de la surface de l'échantillon en croissance.

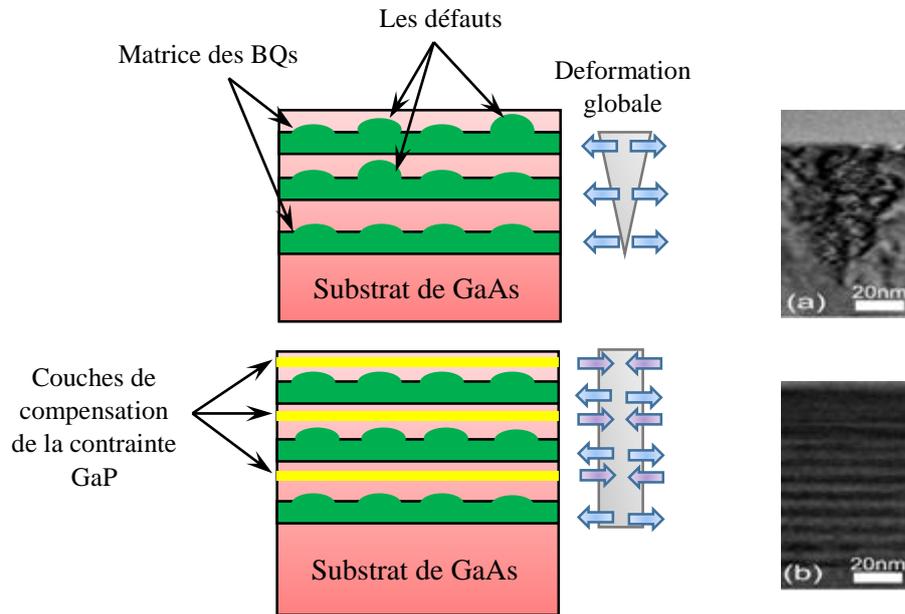


Figure 2.13 : Image de TEM de 10 empilements de boîtes quantiques d'InAs/GaAs : (a) sans et (b) avec couche de compensation de la contrainte GaP [50].

2.7.1 Epitaxie par jets moléculaire MBE

L'épitaxie par jets moléculaires (EJM) appelée aussi MBE (pour Molecular Beam Epitaxy) est une technique de dépôt et de croissance développée dans les laboratoires Bell à la fin des années 1960 [51] pour la croissance contrôlée des semi-conducteurs. C'est un procédé qui permet de faire croître des couches minces (contrôle de l'épaisseur à la monocouche près) épitaxiales pour une large gamme de matériaux.

La MBE est une technique de dépôt des couches cristallines sur un substrat monocristallin porté à une température appropriée à la croissance épitaxiale. Ce dépôt est réalisé dans une enceinte de croissance sous un vide poussé, de l'ordre de 10^{-11} Torr par un système de pompage utilisant une pompe ionique et un pompage cryogénique. La croissance est effectuée en soumettant le substrat (dont la température peut être contrôlée) à des flux d'espèces atomiques ou moléculaires provenant de cellules à effusion. La composition et l'épaisseur de la couche est déterminée par les flux relatifs des différentes espèces qui sont contrôlés quasi-instantanément par des caches mécaniques.

La technique MBE est très utilisée pour la fabrication des BQs III-V, pour cela elle consiste à envoyer sur la surface d'un substrat chauffé des jets atomiques (Al, Ga, In.....) ou bien des jets moléculaires pour le cas d'arsenic et phosphore (As_4 , P_4) qui sont produites par les cellules de diffusion sous une température de 1000 °C à partir de sources solides comme montre la figure (2.14). Afin de contrôler en temps réel la croissance et la cristallinité des couches, un diffractomètre d'électrons rapides sous incidence rasante (RHEED) est mis en place (Figure 2.15).

La RHEED (figure 2.15) repose sur le principe de diffraction des électrons émises par un canal d'électrons et accélérés par une haute tension (25 kV) sous un angle de 3° . Ces électrons diffractés à partir de la surface de l'échantillon sont captés par un écran fluorescent formant ainsi une image de la couche crue par épitaxie. L'image formée (spot spéculaire) dans l'écran oscille en intensité, et chaque période d'oscillation correspond à une couche crue.

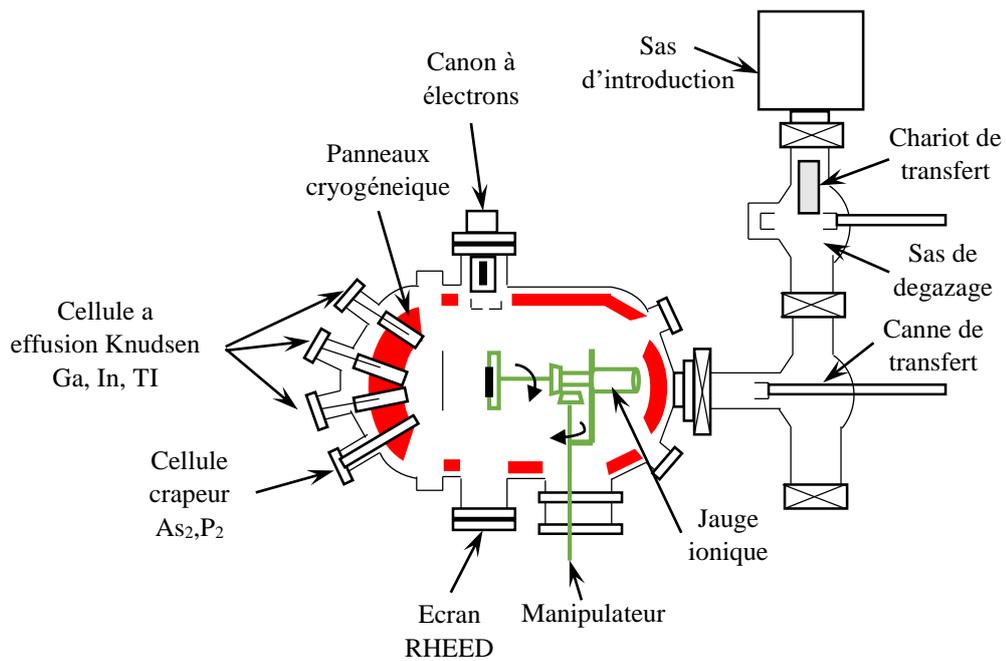


Figure 2.14 bâti MBE

La figure 2.15 représente la transition de l'image de RHEED pendant la croissance de boîtes quantique d'InAs sur un substrat de GaAs : (a) surface de GaAs, (b) après la déposition de la couche de mouillage 2D d'InAs sur GaAs et (c) après la formation des îlots 3D d'InAs. On voit nettement que l'intensité du spot varie d'une étape à l'autre.

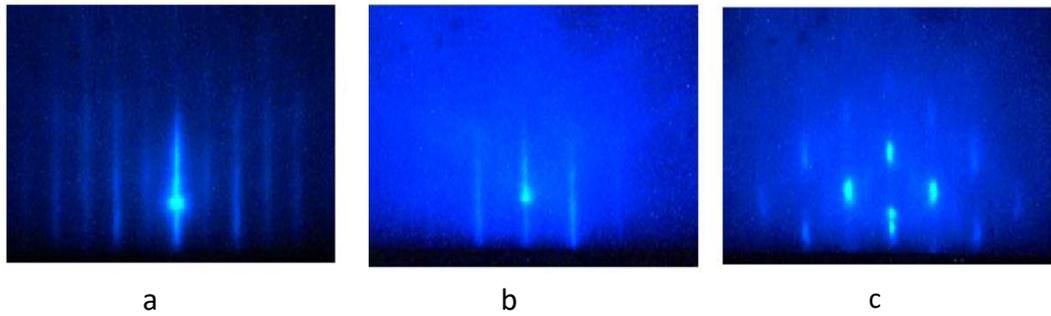


Figure 2.15 : Images de RHEED pendant la croissance des BQs d’InAs sur substrat GaAs [52].

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

2.7.2 Epitaxie en phase vapeur de composés organométalliques MOCVD

De même que le MBE, cette technique de croissance repose sur le mode SK. Elle utilise des sources de composés chimiques au lieu des sources solides comme dans le MBE. Le transport de ces composés chimiques vers un substrat chauffé à haute température de 600 °C se fait à l’aide d’un gaz porteur sous un vide qui varie entre 100 et 760 Torr [53].

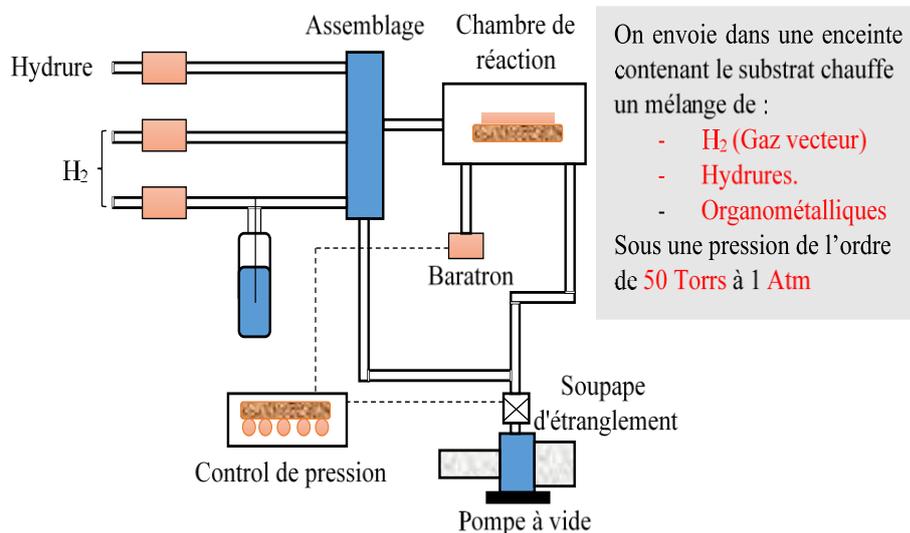


Figure 2.16 : Montage expérimental du système de croissance MOCVD [54].

Elle permet d’effectuer des croissances en moins de temps par rapport au MBE et sur des grandes surfaces (comme les cellules solaires multijonctions), et par conséquent ce type de technique est moins couteux par rapport au MBE. Les désavantages de MOCVD sont : la

grande partie perdue des molécules à la surface du substrat ce qui entraîne l'augmentation du cout, le problème de sécurité lié à l'utilisation des gaz.

2.8 Choix du matériau semiconducteur boîte quantique

Les semi-conducteurs composés III-V ont été largement utilisés dans les lasers, les photodétecteurs et les cellules solaires, etc. [55-59]. Parmi tous les types de cellules solaires et de modules dans les applications de recherche et industrielles, les semi-conducteurs composés III-V sont les matériaux de cellules solaires les plus efficaces [60] principalement en raison de leur bande interdite directe, de leur mobilité élevée des porteurs et de leur bonne stabilité en température. Les cellules solaires multi-jonctions III-V ont été initialement développées pour alimenter des satellites dans l'espace et commencent maintenant à être explorées pour des applications terrestres grâce à l'utilisation de systèmes de concentration. Cependant, les matériaux nanostructurés tels que ceux employant des structures épitaxiales de faible dimension ont offert de nouvelles opportunités pour concevoir des cellules solaires plus efficaces. Ces structures de faible dimension, y compris les puits quantiques (2 dimensions), les nanofils ou nanotubes (1 dimension) et les boîtes quantiques (0 dimension), présentent un grand potentiel pour améliorer l'efficacité des cellules solaires en facilitant l'absorption des photons et la collecte des porteurs [61-63].

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

- Les semiconducteurs III-V et leurs alliages : la combinaison des éléments du groupe III (B, Al, Ga, In....) avec du groupe V (N, P, As, Sb, Bi.....) de tableau périodique comme le montre le tableau (2.1), par exemples : GaAs, InAs, GaSb, InN, GaN, GaP.....etc. Cependant on distingue des alliages ternaires et quaternaires pour ce type de semi-conducteurs comme : InAsSb, GaAsN, GaAsP, InGaAs, InGaAsN, InGaAsSb.....etc.
- Les semiconducteurs II-VI et ses alliages : la combinaison des éléments de sous-groupe II (Zn, Cd.....) et les éléments du groupe VI (O, Se, Te.....), comme : CdTe, ZnO, CdSe. De même, pour ce type de semiconducteurs on distingue des alliages ternaires et quaternaires comme CdSeTe, CdZnTe, CdZnSeS, CdZnSeTe.
- Les composés IV : sont composés d'éléments de la colonne IV du tableau périodique comme $Si_{1-x}Ge_x$ pour améliorer la cellule solaire à base de Si.

Tableau 2.1 : Eléments du groupe III, IV et V du tableau périodique

III	IV	V
B ⁵ 0.85 2.0	C ⁶ 0.7 2.5	N ⁷ 0.65 3.0
Al ¹³ 1.25 1.5	Si ¹⁴ 1.1 1.8	P ¹⁵ 1 2.1
Ga ³¹ 1.3 1.6	Ge ³² 1.25 1.8	As ³³ 1.15 2.0
In ⁴⁹ 1.55 1.7	Sn ⁵⁰ 1.45 1.8	Sb ⁵¹ 1.45 1.9
Ti ⁸¹ 1.9 1.8	Pb ⁸² 1.8 1.9	Bi ⁸³ 1.6 1.9

Vue les caractéristiques importantes des matériaux III-V comme nous avons décrit précédemment, dans ce travail, on s'intéresse seulement aux nanostructures à base de semiconducteurs III-V. La majorité de semiconducteurs III-V se cristallisent sous la structure zinc-blende qui est représentée dans la figure (2.17). Comme on a vu précédemment, la structure à boîte quantique est une hétérostructure dont ses couches ont cru par épitaxie avec MBE ou bien MOCVD.

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

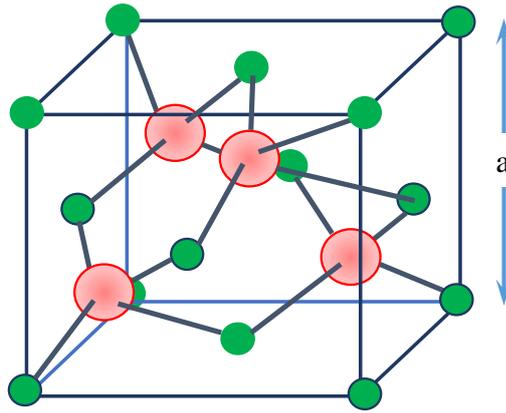


Figure 2.17 Structure zinc-blende [64].

Un autre paramètre important qui caractérise un matériau semiconducteur pour la conception des BQs est l'énergie de la bande interdite E_g qui définit la différence énergétique entre le minimum de la bande de conduction BC et le maximum de la bande de valence BV. Pour le système InAs/GaAs, ces extrêmes sont situés dans le même vecteur d'onde $k=0$ (Γ point) comme il est clair dans la figure (2.18), et comme on a déjà vu dans le chapitre (1), InAs et GaAs sont des semiconducteurs à bande directe. Ces types de semiconducteurs permettent une transition bande à bande des excitons (électrons et trous) ce qui améliore et facilite l'émission et l'absorption des photons. Dans les nanostructures quantiques, l'énergie de la bande interdite est calculée comme la différence entre la bande de conduction et la bande des trous lourds [65].

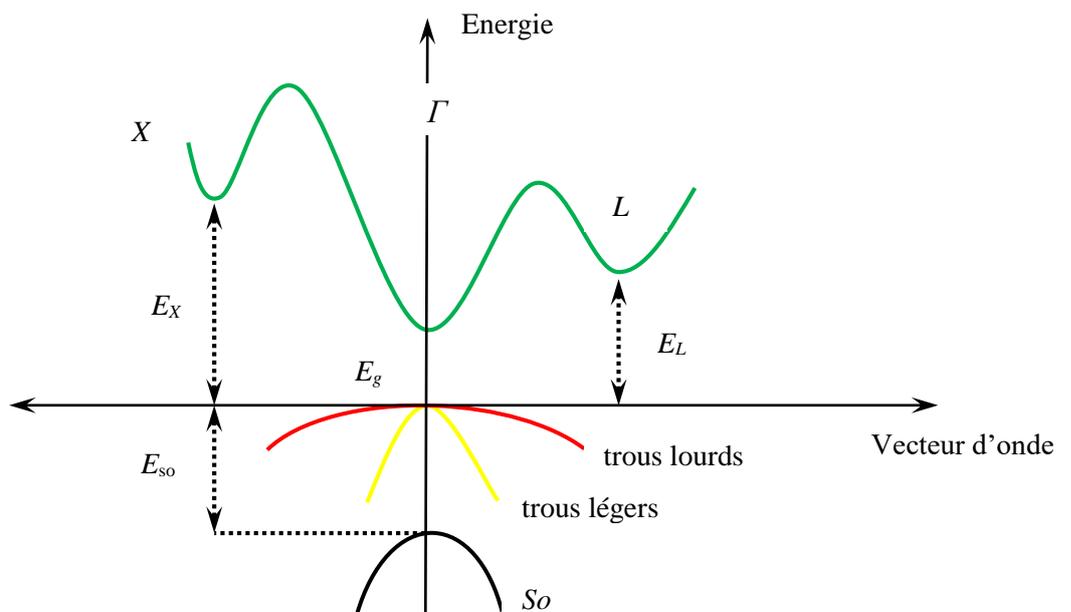


Figure.2.18 Structure de bande de GaAs et InAs. Pour le GaAs $E_g=1.42$ eV, $E_L=1.71$ eV et $E_x=1.9$ eV et $E_g=0.35$ eV, $E_L=1.08$ eV et $E_x=1.37$ eV pour le InAs à $T=300$ K [66].

La figure (2.19) montre l'évolution de l'énergie de la bande interdite en fonction du paramètre de maille à la température $T=0$ K des principaux semiconducteurs III-V et ses alliages possibles. A partir de cette figure, on observe que le paramètre de maille des semiconducteurs à bande interdite étroite est grand par rapport aux semiconducteurs à bande interdite large. Pour cela la majorité de BQs utilisés dans les expériences produisent une contrainte compressive. Le tableau (2.2) rassemble les propriétés des semiconducteurs III-V binaires sélectionnés pour ce travail.

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

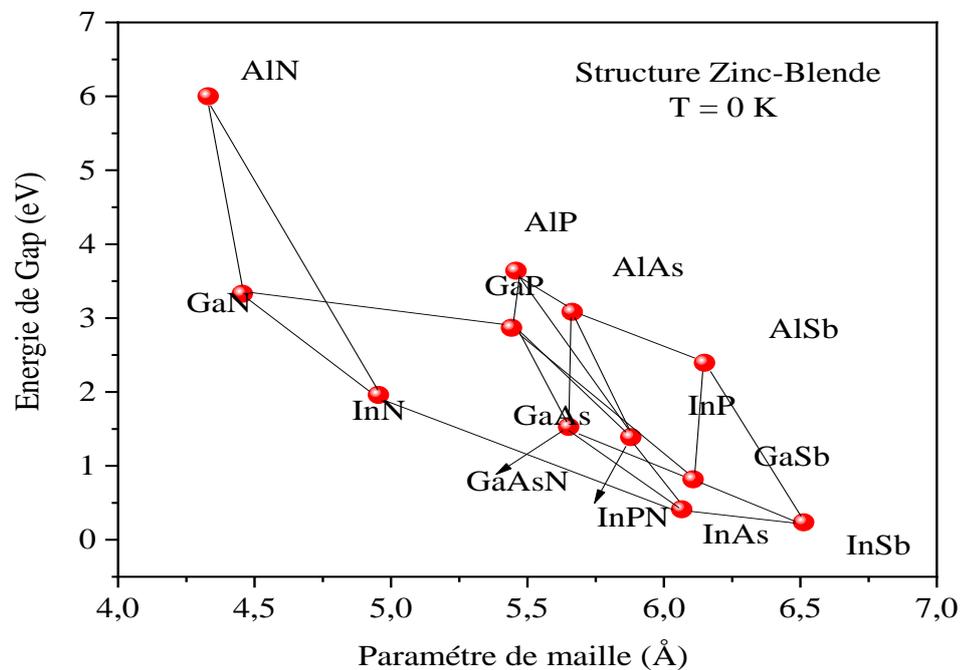


Figure 2.19 : Energie de bande interdite en fonction du paramètre de maille de plusieurs semiconducteurs III-V à $T=0$ K [57].

Tableau 2.2 : Propriétés de quelques semiconducteurs III-V utilisés dans ce travail à $T=300$ K [66, 68].

	GaAs	InAs	GaN	GaBi	InN	InP	GaP
a (Å)	5.65	6.06	3.19	6.32	3.54	5.87	5.45
E_g (eV)	1.42	0.35	3.42	1,45	1.89	1.34	2.26
ϵ_r	13.1	14.60	8.90	15.7	15.30	12.5	11.1
χ (eV)	4.07	4.03	4.10	4.06	4.70	4.38	4.4
m_e^*/m_0	0.07	0.03	0.20	-	0.12	0.08	1.12
m_h^*/m_0	0.16	0.03	1.00	-	0.17	0.6	0.22
C_{11} (GPa)	1221	832.9	296	884.2	223	1011	1405
C_{12} (GPa)	566	452.6	130	402.6	115	561	620.3

La figure (2.20) montre les discontinuités de bandes de quelques semiconducteurs binaires en fonction du paramètre de maille. Il est reporté qu'une grande discontinuité de la bande de valence ΔE_v entre le matériau barrière et BQ supporte plusieurs niveaux d'énergie, de fait il y a une possibilité qu'ils fusionnent avec la bande de valence de matériau barrière ce qui va décroître l'énergie de gap du matériau barrière, et donc diminution du rendement de la cellule solaire à boîte quantique [69]. Donc pour une BQ uniforme et efficace, cette discontinuité doit être négligeable. La bande d'énergie modifiée du matériau barrière est donné par l'équation suivante :

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

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

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

Généralement on peut faire varier la bande interdite des matériaux semiconducteurs ternaires et quaternaires par la variation de la fraction molaire x des éléments qui les constituent. Pour les BQs, la bande interdite peut être modifiée avec le changement de la taille de la boîte quantique par le control de la quantité des espèces qui la constituent expérimentalement. La bande interdite d'une BQ diminue avec l'augmentation de la taille de cette dernière comme le montre la figure (2.21) ce qui favorise l'absorption des photons moins énergétique du spectre solaire et donc l'optimisation du rendement de conversion des cellules solaires conventionnelles.

Théoriquement la bande interdite est calculée par la loi de Vegard pour les composés ternaires et quaternaires [70].

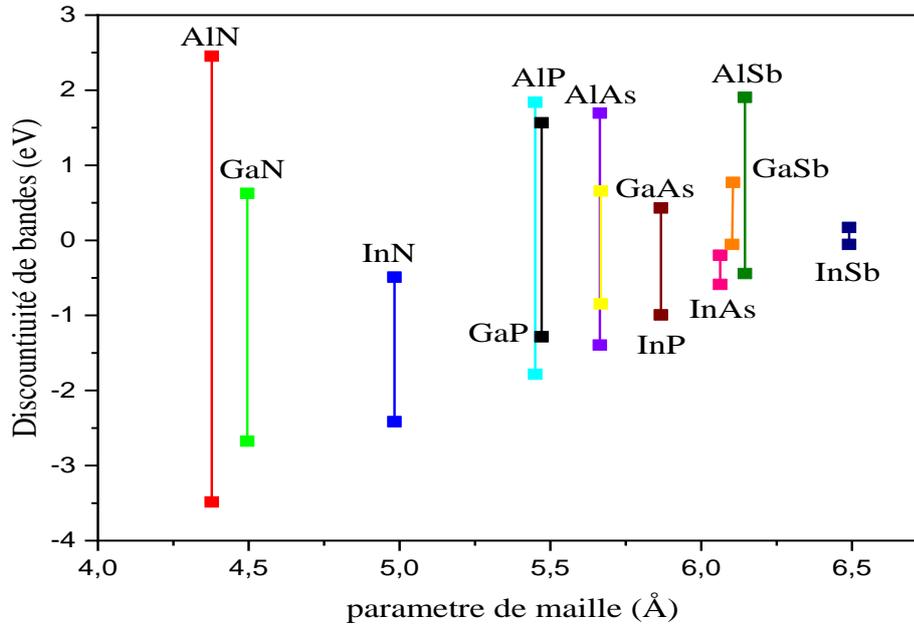


Figure 2.20 : Discontinuité de la bande de conduction et la bande de valence de quelques semiconducteurs III-V en fonction du paramètre de maille [67].

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

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

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

- Pour un composé quaternaire $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}$, l'énergie de gap est calculé en fonction des énergies de gap des composés ternaires qui le constituent [70]:

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

Nous notons que les mêmes relations sont utilisées pour le calcul du paramètre de maille des composés ternaires et quaternaires, sauf dans ce cas les paramètres de courbure ne rentre pas en considération (égale à 0).

D'autre part, les matériaux qui sont candidats pour être des matériaux de barrières sont : AlN, GaN, GaAs, AlP, AlAs, AlSb, GaP et ses alliages ternaires [69].

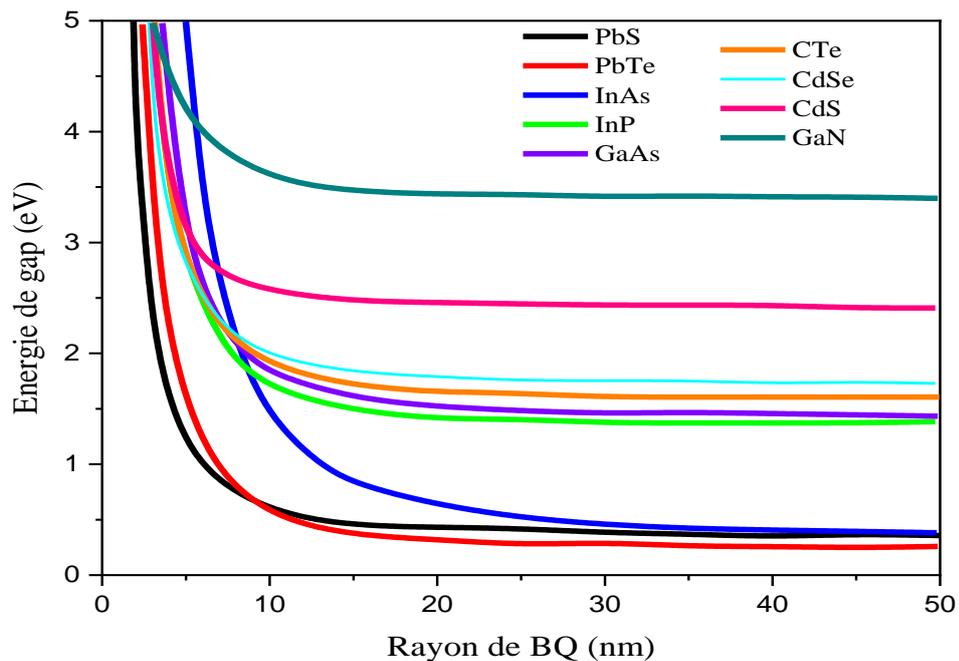


Figure 2.21 : Evolution de l'énergie de la bande interdite de quelques semiconducteurs III-V et II-VI en fonction de ses tailles [71].

2.9 L'intérêt des BQs dans le domaine de photovoltaïque :

Actuellement, le but de la recherche dans les cellules solaires de 3^{ème} génération c'est l'exploration des BQs qui absorbent le maximum du spectre solaire c.à.d. l'élargissement du spectre d'absorption vers les longueurs d'ondes plus longues. L'une des approches pour

atteindre ce but est l'utilisation des semiconducteurs BQs quaternaires. L'addition d'une petite quantité de l'azote $\leq 10\%$ dans GaAs réduit significativement l'énergie de bande interdite, ce qui fait étendre la longueur d'onde d'absorption de GaAs. Par exemple avec une fraction molaire $x=0.02$ d'azote dans $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ l'énergie de bande interdite diminue de 0.4 eV [72]. Par contre, si cette fraction molaire d'azote dépasse 0.1 ($0.1 < x < 0.995$), la qualité de $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ se dégrade à cause de grand désaccord de maille de GaAs et GaN ($\sim 20\%$) [73]. Pour réduire plus l'énergie de bande interdite, l'indium est incorporé dans le $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$, ce qui donne l'alliage quaternaire $\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}_{1-x}\text{N}_x$. D'ailleurs, ce matériau quaternaire est plus utilisé dans les cellules solaires triples jonctions InGaP/GaAs/Ge pour former une quatrième jonction entre le GaAs et Ge avec une énergie de bande interdite adapté de 1 eV. Un rendement de conversion théorique de 35 % à 39% a été obtenu grâce à l'addition de ce matériau quaternaire dans la structure triple jonctions [74].

Ces supériorités mentionnées au-dessus rendent l'InGaNAs de bon candidat pour améliorer les propriétés et les performances de BQs.

Dans notre travail nous nous sommes concentré sur les boîtes quantique à base de semiconducteurs III-V comme GaAs, GaBi, GaP, InP, InAs et ses alliages comme : GaAsP, GaAsBi. Concernant les substrats et les matériaux barrières utilisés il s'agit du GaAs grâce à ses propriétés optiques et électroniques impressionnantes avec une mobilité électronique élevé et une énergie de la bande interdite directe et aussi la facilité de la croissance des autres matériaux sur GaAs malgré le grand désaccord de maille. D'autre part le GaAsP a été utilisé précédemment dans une étude du BQs en tant que semi-conducteur barrière [75] (boîte d'InGaAs dans une matrice GaAsP). Aussi nous avons étudié un autre matériau quaternaire qui est le InGaNAs vue leur importance remarquable dans le domaine de photovoltaïque surtout pour les applications spatiales, et la structure à boîte quantique InGaNAs /GaAs est considérée comme un sujet de recherche récent dans le but d'améliorer leur rendement de conversion.

2.10. Energie de transition dans les boites quantiques :

Le calcul des énergies de quantification des particules (électrons, trous) est basé sur le modèle à deux bandes de zinc blende qui est dérivé du modèle k.p (4x4) en supposant des bandes paraboliques.

Dans le modèle à deux bandes de zinc blende, nous calculons d'abord P_ε et Q_ε comme donné par les équations 2.47 et 2.48 [76].

$$P_\varepsilon = -a_v(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) \quad (2.47)$$

$$Q_\varepsilon = -\frac{b}{2}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) \quad (2.48)$$

Ici, a_v et b sont les potentiels de déformation hydrostatique de la bande de valence et ε_{xx} , ε_{yy} et ε_{zz} sont le tenseur de déformation.

Ensuite, nous pouvons calculer les énergies de bord de bande de conduction, de trou lourd et de trou léger à partir des équations 2.49, 2.50 et 2.51.

$$E_c = E_v + E_g + a_c(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) \quad (2.49)$$

$$E_{hh} = E_v - P_\varepsilon - \text{sgn}(Q_\varepsilon)\sqrt{Q_\varepsilon^2} \quad (2.50)$$

$$E_{lh} = E_v - P_\varepsilon + \text{sgn}(Q_\varepsilon)\sqrt{Q_\varepsilon^2} \quad (2.51)$$

Ici, a_c est le potentiel de déformation hydrostatique de la bande de conduction, E_c , E_v et E_g sont l'énergie de bord de bande de conduction sans contrainte, l'énergie de bord de bande de valence et la bande interdite. Ceux-ci sont calculés à partir de l'affinité spécifique du matériau et de la bande interdite. La fonction $\text{sgn}(a)$ est la fonction « signe » (c'est-à-dire +1 pour les arguments positifs et -1 pour les arguments négatifs) [76].

Ensuite, nous calculons les masses effectives pour les différentes bandes en utilisant les équations 2.52 à 2.55.

$$m_{hh}^z = \frac{m_0}{\gamma_1 - 2\gamma_2} \quad (2.52)$$

$$m_{lh}^z = \frac{m_0}{\gamma_1 + 2\gamma_2} \quad (2.53)$$

$$m_{hh}^t = \frac{m_0}{\gamma_1 + \gamma_2} \quad (2.54)$$

$$m_{lh}^t = \frac{m_0}{\gamma_1 - \gamma_2} \quad (2.55)$$

Ici, m_0 est la masse effective de l'électron, et γ_1 et γ_2 sont les paramètres de Luttinger.

Pour obtenir les niveaux d'énergie dans la BQ, nous résolvons l'approximation de la masse effective de Schrödinger incluant l'effet de déformation comme suit [77] :

$$-\frac{\hbar^2}{2} \nabla \cdot \left(\frac{1}{m_{c/vb}^*} \nabla \psi \right) + V_{c/vb} \psi = E \psi \quad (2.56)$$

Ou, Pour la bande de conduction : $V_{c/vb} = V_c = E_c$

Pour les trous légers de la bande de valence : $V_{c/vb} = V_{lh} = E_{lh}$.

Pour les trous lourds de la bande de valence : $V_{c/vb} = V_{hh} = E_{hh}$

\hbar , $m_{c/vb}^*$, E et ψ désignent respectivement la constante de Planck réduite, la masse effective de l'électron dépendant du matériau, la valeur propre d'énergie et la fonction enveloppe de l'électron par rapport à un électron à la position.

L'expression de l'énergie de transition s'écrit comme suit (dans ce travail nous prônons que les trous lourds en considération) :

$$E_c = E_g + E_e + E_h \quad (2.57)$$

Où E_e est l'énergie de quantification des électrons, E_h est l'énergie de quantification des trous et E_g est la bande interdite.

Pour entamer la partie de simulation, nous commençons par l'étude de l'énergie de quantification et de transition où nous prenons comme titre d'exemple, la structure à BQs d'InAs/GaAs, ou nous allons déterminer l'énergie de transition de cette structure par calcul d'énergie de quantification des électrons et des trous lourd comme il a été déjà expliqué précédemment.

La figure 2.22 représente le diagramme de bande d'énergie de la cellule solaire incluant des BQs d'InAs / GaAs, pour cette structure nous avons un alignement de type I, dans ce type de structure les photoporteurs sont confinés dans le matériau de la boîte quantique.

La figure 2.23 illustre le diagramme d'énergie d'une seule boîte quantique d'InAs/GaAs, dans cette figure on peut clairement voir les états d'énergie créés par la BQ dans la bande de conduction et la bande de valence. Ce diagramme nous a permis de calculer les énergies de quantifications ainsi qu'aux énergies de transition entre ces états pour les différentes structures étudiées dans notre travail, cela est présenté et expliqué dans les sections suivantes.

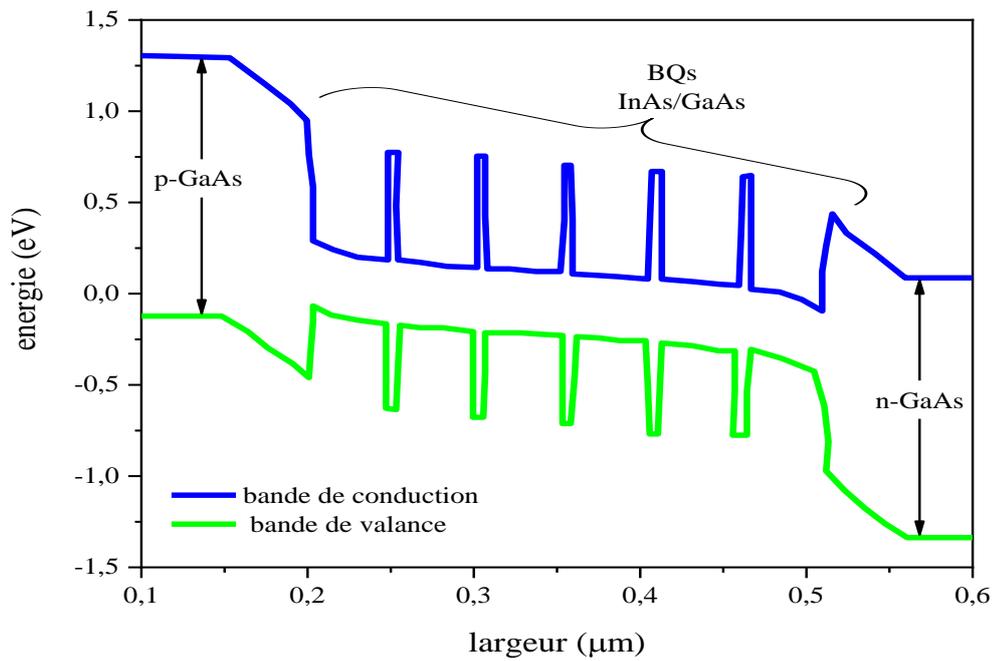


Figure.2.22 diagramme de bande d'énergie de la cellule solaire incluant des BQs d'InAs / GaAs en fonction de la largeur de la structure.

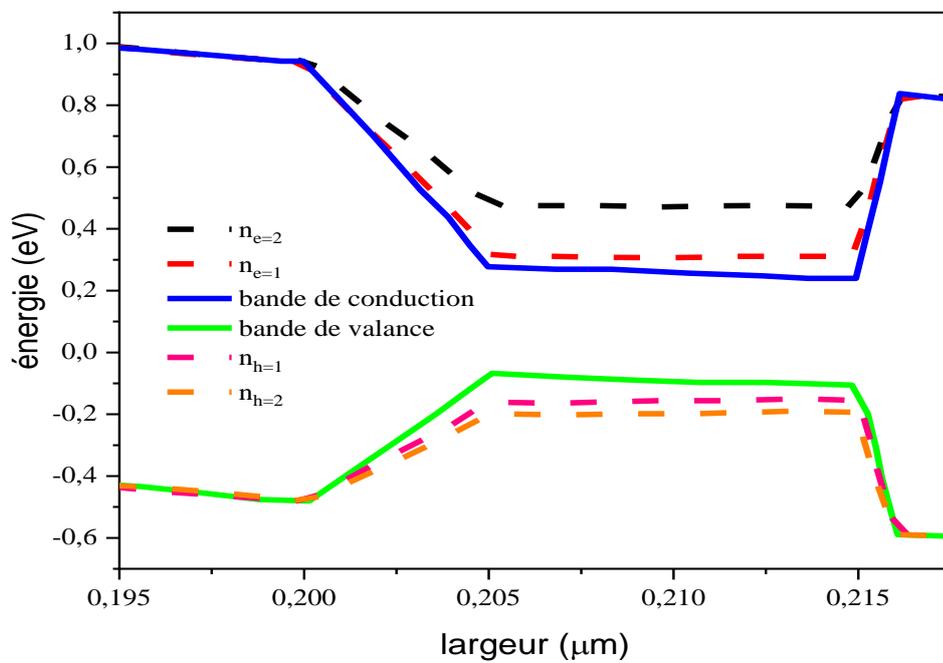


Figure.2.23 diagramme d'énergie d'une seule boîte quantique d'InAs/GaAs.

Les figures 2.24 et 2.25 illustrent la variation de l'énergie de quantification des électrons et des trous lourds en fonction de la largeur de la couche active de la boîte pour les deux niveaux 1 et 2 de la structure a BQs d'InAs/GaAs avec une hauteur de 5 nm de la boîte.

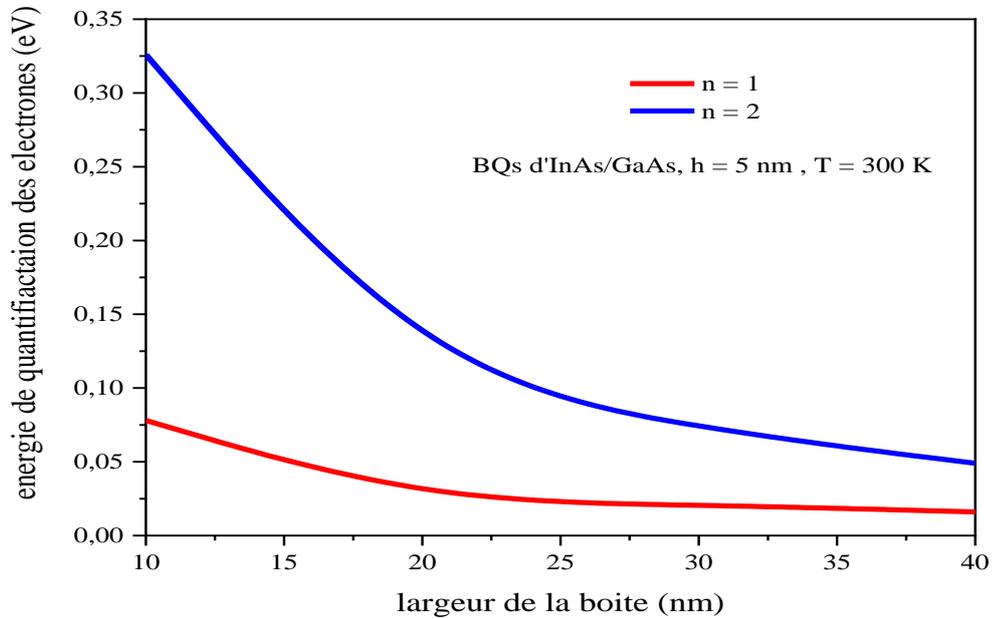


Figure 2.24 variation de l'énergie de quantification des électrons.

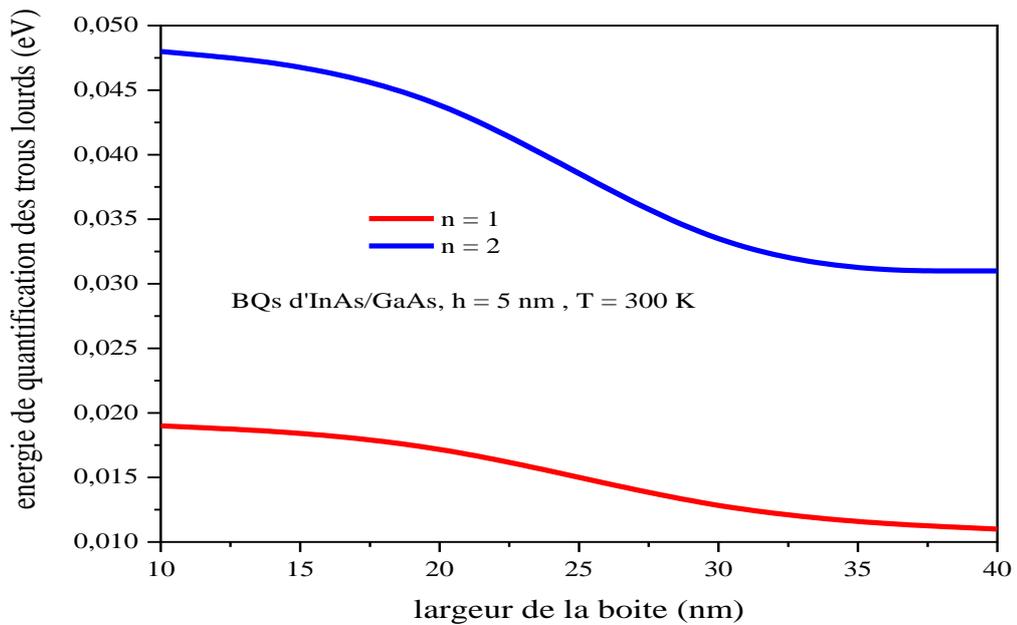


Figure 2.25 variation de l'énergie de quantification des trous lourds pour différentes largeurs de la boîte.

Comme montres les deux figures, l'énergie de quantification décroît d'une façon modérée, ou nous remarquons une baisse de 0.062 eV et de 0.008 pour une gamme de largeur de boîte varie de 10 nm à 40 nm pour le premier niveau des électrons et des trous respectivement. Cette baisse induit a une diminution dans l'énergie de transition de 0.07 eV pour le premier niveau toujours comme le montre la figure 2.26.

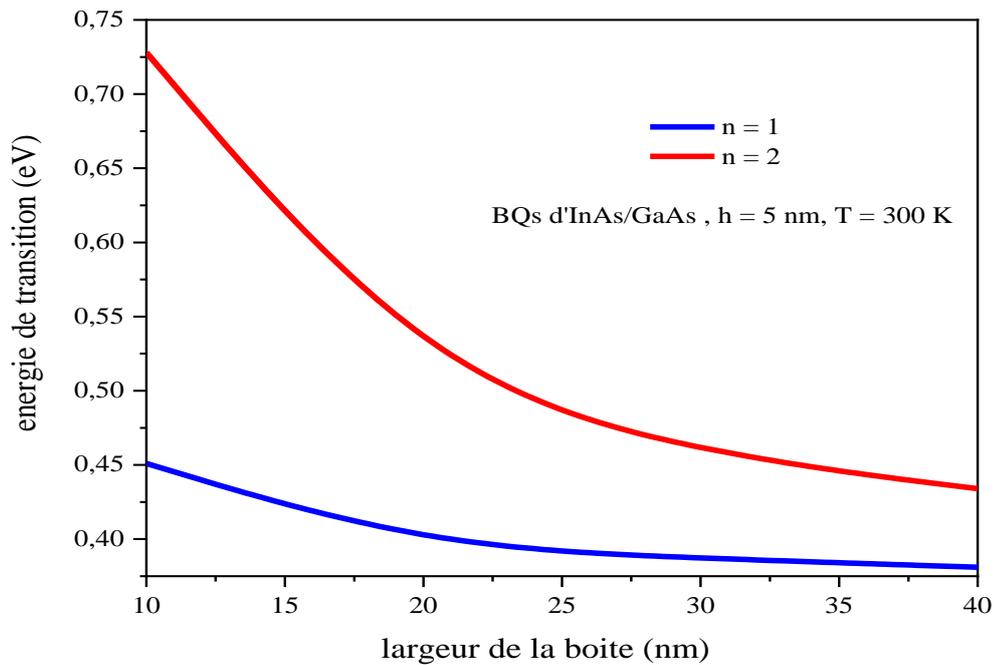


Figure 2.26 variation de l'énergie de transition de la structure a BQ d'InAs/GaAs pour différentes largeurs de la boîte.

L'analyse de ces figures montre que l'énergie de transition est fortement dépendante de la taille de la boîte quantique. Donc, Nous pouvons conclure que le potentiel de confinement électronique est plus important pour les petits BQ. Pour cela nous avons choisi une largeur de boîte de 10 nm pour le reste de notre travail.

2.11. Conclusion :

Dans ce chapitre nous nous sommes concentrés sur la technologie des cellules solaire à bande intermédiaire, plus précisément les cellules solaires à bande intermédiaire à base de boîte quantique qui sont l'objet principale de notre étude. Par la suite nous avons rappelé les propriétés physiques et optiques des nanostructures quantiques en général. Puis, nous nous sommes concentré plus sur les boîtes quantiques, le mode de croissance des BQs auto-assemblés Stranski-Krastanov SK a été présenté en détail, ainsi la méthode de compensation

de la contrainte a été décrite. Dans la partie suivante les techniques de la fabrication des BQs ont été décrites où nous avons montré les avantages et les intérêts des techniques MBE et MOCVD pour fabriquer des cellules solaires à haute efficacité et à bas cout. Dans la dernière partie nous avons exposé tout d'abord les types des BQs semiconducteurs existantes, ensuite nous avons présenté les critères de la sélection des matériaux III-V pour les employer comme des matériaux BQs dans des applications photovoltaïques tout en détaillant l'intérêt des boites quantiques pour surmonter les limites d'une cellule solaire conventionnelle.

CHAPITRE 3

MODELISATION ET SIMULATION DES CELLULES SOLAIRES À BOITES QUANTIQUES : BQs à base de GaAs

3.1. Introduction :

Dans ce chapitre nous allons faire une modélisation et simulation de différentes structures à nanostructures quantiques plus précisément à base de BQs pour les applications photovoltaïques dans le but de montrer l'avantage de l'insertion de ces nanostructures quantiques dans une cellule solaire conventionnelle sur l'amélioration de leurs performances optiques et électriques et d'autre part sélectionner les bons matériaux semiconducteurs nanostructures qui donnent de meilleurs résultats. Pour cela, nous entamons la simulation de cellules solaires à boîte quantiques III-V, par l'utilisation de GaAs comme matériaux barrière : GaAsBi/GaAs, InGaAs/GaAs, Pour chaque partie de simulation, la structure de la cellule solaire à nanostructure quantique et ses paramètres sont bien définis. L'objectif visé est d'améliorer les performances électriques : la caractéristique densité de courant-tension J-V, la puissance-tension P-V et l'efficacité quantique externe EQE, ainsi que les performances optiques comme le coefficient d'absorption α par l'étude de l'effet de certains paramètres comme le nombre de couches, la fraction molaire x des nanostructures quantiques. Finalement, nous allons étudier l'effet de l'insertion des deux couches d'InGaP (couche fenêtres et la couche BSF) sur l'efficacité de conversion de nos structures.

3.2 Cellules solaires à boîte quantiques simulées à base de GaAs :

Au cours de tous nos simulations, nous avons utilisé les conditions standards de qualification des cellules solaires : un spectre solaire AM1.5G et une température de 300K.

3.2.1 Cellule solaire à BQs de GaAsBi/GaAs :

Comme première structure étudié dans notre travail, nous nous sommes intéressés à la modélisation et la simulation d'une cellule solaire à BQs de GaAsBi/GaAs. Les BQs de GaAsBi sont insérés dans la région intrinsèque d'une cellule solaire p-i-n à base de GaAs (figure.3.1) tout en insérant des couches de BQs de GaAsBi dans une matrice de GaAs (barrière). La figure 3.2 montre la structure de la cellule solaire étudiée dans ce travail. Deux couches en rouge de GaAs type p et n représentent l'émetteur et la base avec des concentrations de dopants de $4 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ [78]. Une autre couche de GaAs au milieu

représente la région intrinsèque sur laquelle les BQs de GaAsBi en vert sont insérés. Nous remarquons que les BQs ont une forme rectangulaire avec une hauteur de 5 nm et une largeur de 10 nm.

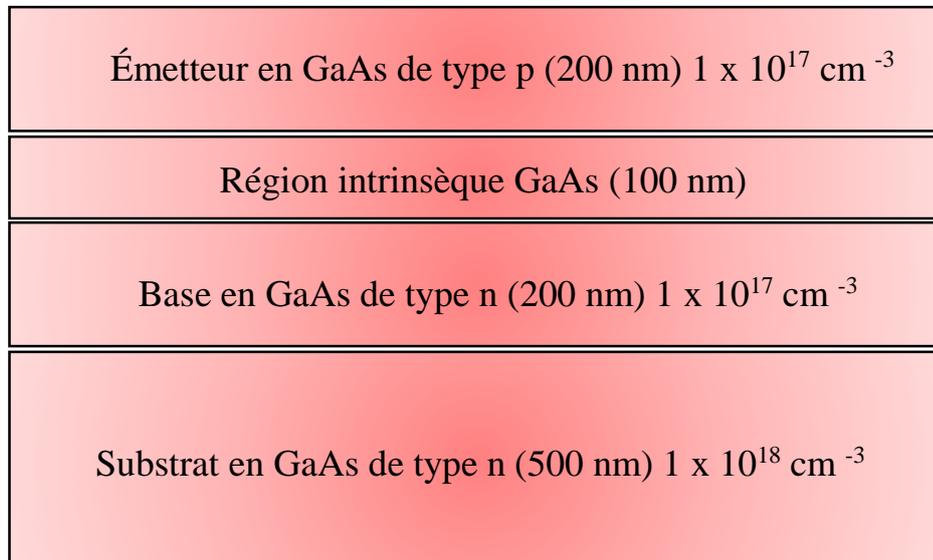


Figure 3.1 Structure de la cellule solaire p-i-n à base de GaAs [79].

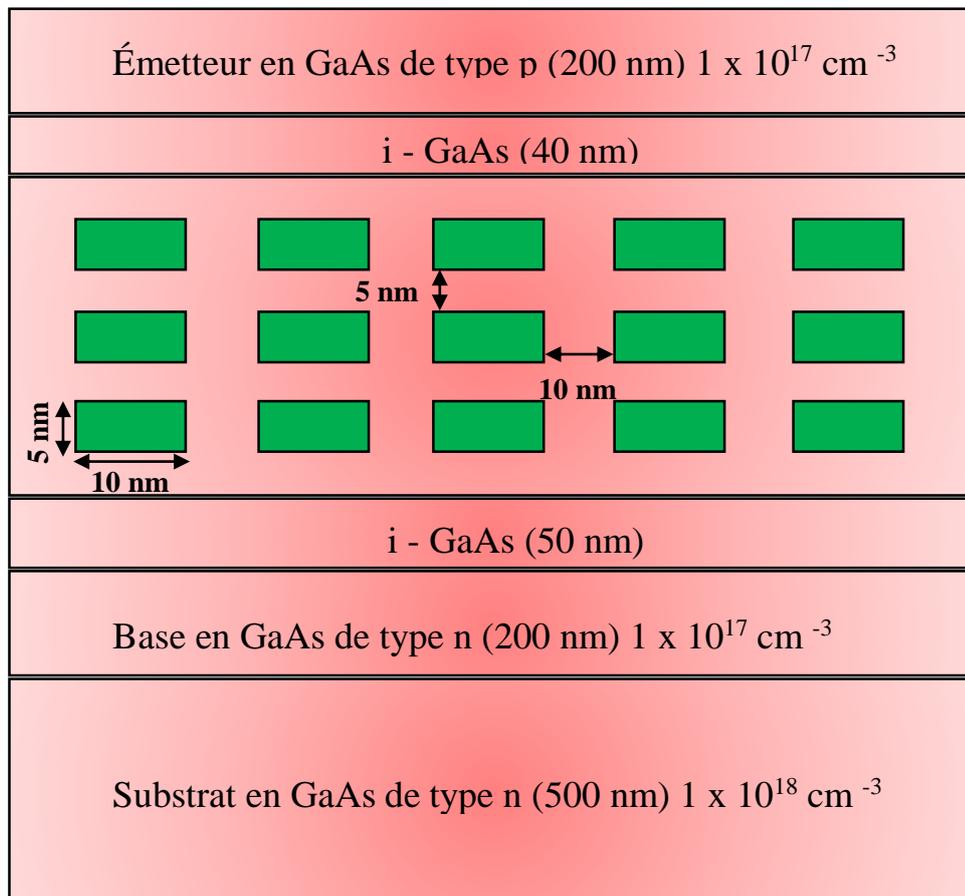


Figure 3.2 : Structure de la cellule à BQ de GaAsBi /GaAs [81].

3.2.1.1 Résultats et discussion :

Nous avons commencé la simulation de la cellule solaire p-i-n sans BQs. Par la suite, nous sommes passés à la simulation d'une cellule solaire à BQs GaAsBi/GaAs pour un nombre variable de couches de BQs : 10, 20 et 40, respectivement. Pour chaque simulation, la caractéristique J-V, la courbe d'EQE et les paramètres caractéristiques importants d'une cellule solaire sont présentés et discutés. Mais avant cela, la variation de l'énergie de la bande interdite ainsi que la contrainte ont été aussi étudié.

La figure 3.3 présente la variation de la bande interdite et la variation de la contrainte pour différentes concentrations de bismuth dans l'alliage ternaire GaAs_{1-x}Bi_x, nous notons une diminution de 10% de la bande interdite et nous pouvons voir que la plage optimale de concentration en bismuth est inférieure à 5%. On note également qu'il existe une seule contrainte (en tension) quelle que soit la concentration en bismuth. Selon cette simulation, nous avons choisi une concentration de 5% de bismuth qui nous donne un meilleur accord [80].

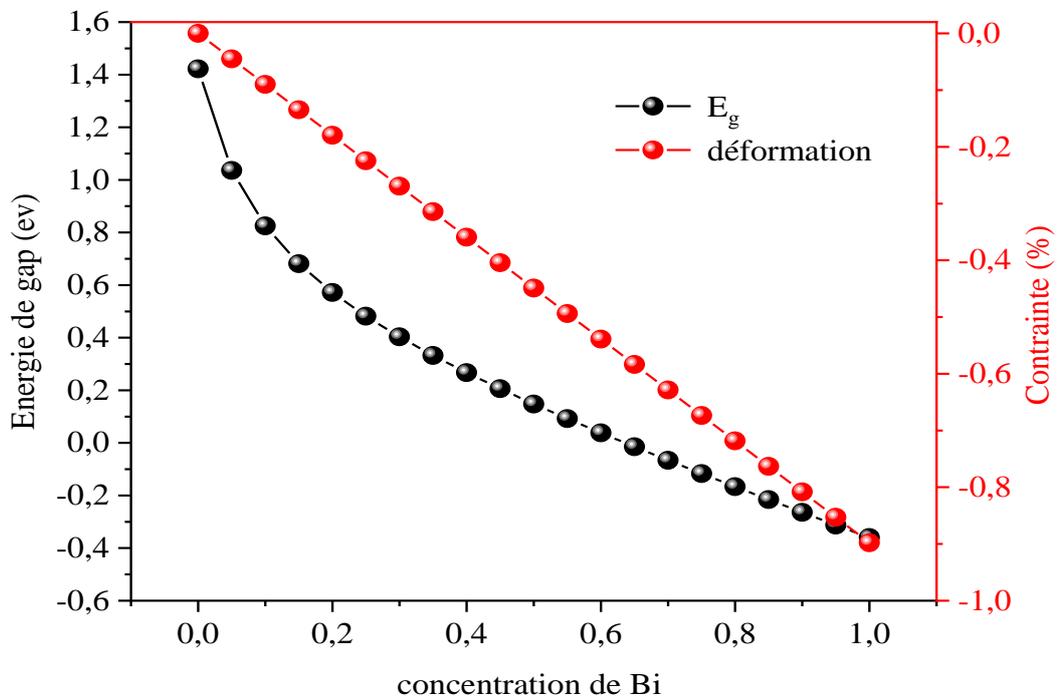


Figure 3.3 variation de l'énergie de la bande interdite et de la contrainte en fonction de la concentration de bismuth [81]

L'impact le plus important des BQs est d'aider les cellules solaires à absorber les photons avec une énergie plus faible, ce qui signifie également une longue longueur d'onde. La longueur d'onde maximale des photons pouvant être absorbée par une cellule solaire GaAs standard typique est d'environ 875 nm [82]. Après avoir inséré des BQs, les photons d'une longueur d'onde comprise entre 875 nm et 1200 nm peuvent également être absorbés.

La figure 3.4 représente l'efficacité quantique externe spectrale de la cellule solaire à BQs $\text{GaAs}_{0,95}\text{Bi}_{0,05}$ / GaAs. Il est clair sur cette figure que l'efficacité quantique externe de la cellule solaire standard p-i-n sans BQs passe effectivement à zéro autour de la longueur d'onde de 875 nm. Cette longueur d'onde s'étend jusqu'à 1200 nm en ajoutant des couches de BQs $\text{GaAs}_{0,95}\text{Bi}_{0,05}$ à l'intérieur de la région intrinsèque. Pour les cellules solaires avec 10, 20, 30, 40 et 45 couches de BQs, l'efficacité quantique externe de la longueur d'onde de 875 nm à 1200 nm variait de 5% à 16,30%. Toutes ne sont plus nulles, ce qui signifie des photons dans cette gamme de longueurs d'onde sont absorbés avec succès par la cellule solaire et créent un photocourant. De plus, il est clair que le maximum d'EQE se rapproche de la partie infrarouge, chaque fois que nous ajoutons d'autres couches de BQs.

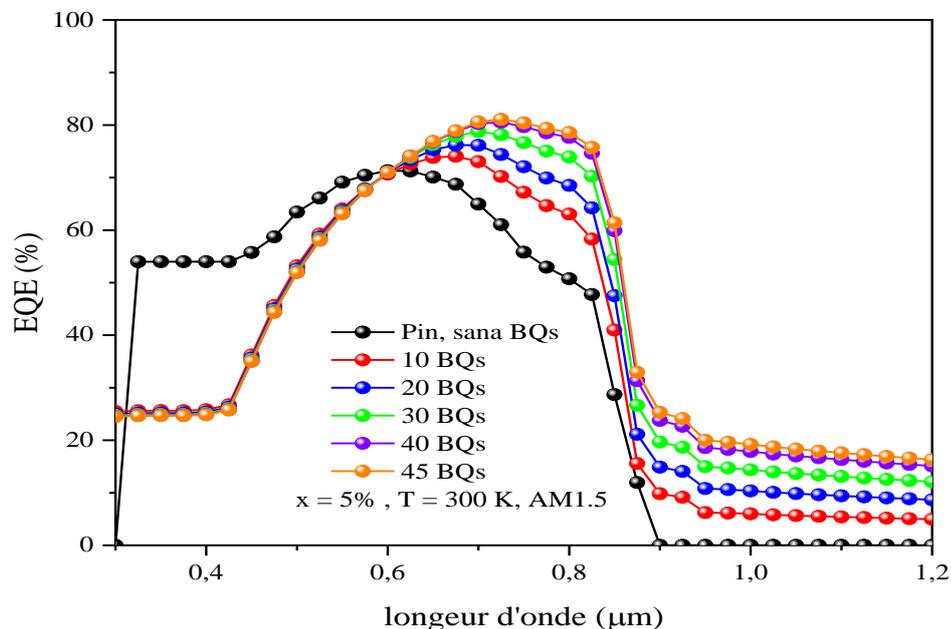


Figure 3.4 EQE de la cellule solaire sans et avec un nombre variable de couches de $\text{GaAs}_{0,95}\text{Bi}_{0,05}$ / GaAs

Sur la figure 3.5, nous avons montré la courbe simulée du coefficient d'absorption à la fois d'une cellule solaire GaAs standard et de la cellule solaire à BQs $\text{GaAs}_{0,95}\text{Bi}_{0,05}$ / GaAs

pour différents nombres de couches BQs incorporées dans la région intrinsèque. Le coefficient d'absorption de la cellule solaire à BQs peut être extrait des courbes EQE par la relation suivante [81] :

$$EQE(\lambda) = (1 - R(\lambda)) \cdot (\exp -(\alpha_p d_p + \alpha_n d_n + \alpha_{int} D)) \quad (3.1)$$

Où $R(\lambda)$ est la réflectivité de la surface, nous l'avons fixée à 0,1 ; α_p et α_n sont les coefficients d'absorption des régions n et p, ils sont donnés par l'équation (3.2) ; d_p et d_n sont leurs épaisseurs correspondantes, respectivement ; α_{int} est l'absorption totale de la région intrinsèque, elle est donnée par l'équation (3.3).

$$\alpha(\lambda) = \frac{4\pi K}{\lambda} \quad (3.2)$$

Où λ est la longueur d'onde et K est le coefficient d'extinction..

$$\alpha_{int} D = \alpha_b D_b + \alpha_{BQ} D_{BQ} \quad (3.3)$$

Où D est l'épaisseur totale de la région intrinsèque ; α_b et α_{BQ} sont les coefficients d'absorption des matériaux de barrière et de boîtes quantiques, D_b et D_{BQ} sont leurs épaisseurs, respectivement. Comme nous l'avons vu précédemment, la valeur de l'EQE augmente de 5% à 16,30 % dans la partie du spectre de longueurs d'onde entre 875 nm et 1200 nm. Il est donc évident que le coefficient d'absorption de la cellule solaire GaAs standard est toujours inférieur à celui de la cellule solaire à BQs $\text{GaAs}_{0,95}\text{Bi}_{0,05}$ / GaAs sur tout le spectre de longueurs d'onde, ce qui confirme nos résultats EQE. La figure 3.6 montre la caractéristique J-V à la fois d'une cellule solaire GaAs standard et de la cellule solaire à BQs $\text{GaAs}_{0,95}\text{Bi}_{0,05}$ / GaAs pour différents nombres de couches BQs incorporées dans la région intrinsèque. A partir de cette dernière, il est évident que le J_{sc} augmente lorsque plus de BQs sont insérés. L'amélioration de J_{sc} entraîne une amélioration de la puissance délivrée par cette structure (figure 3.7). En outre, le V_{oc} prend la même valeur lorsque plusieurs BQs sont ajoutés. Dans ce cas, l'efficacité de conversion augmente de 12,52 % à 21 % lorsque nous comparons notre cellule à 45 couches avec une cellule solaire GaAs standard, au-delà de ce nombre, nous remarquons une diminution soudaine de l'efficacité. Donc, à partir de ce nombre de couches BQs, notre structure a une saturation. Le tableau 3.1 illustre les principales caractéristiques obtenues dans cette simulation.

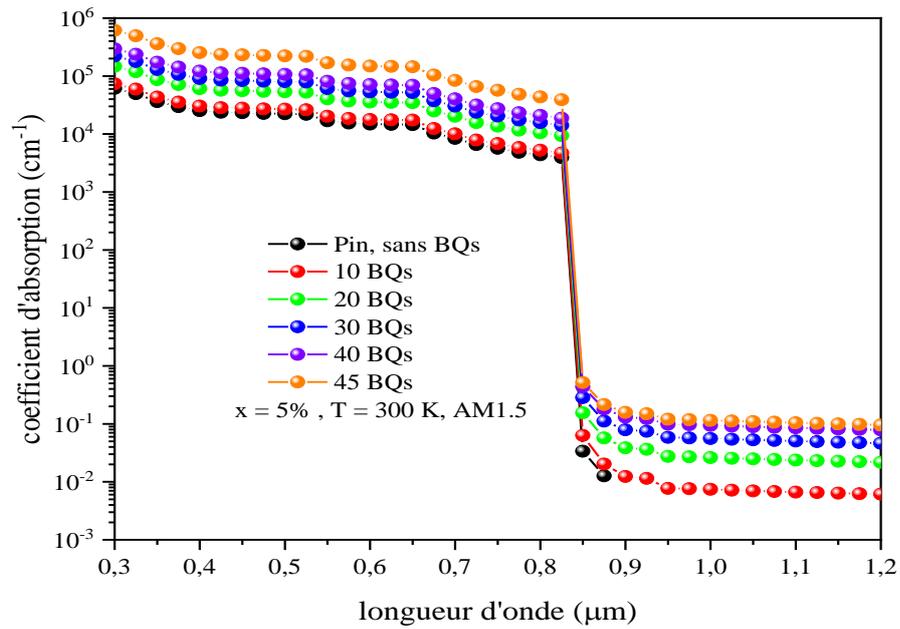


Figure 3.5 coefficient d'absorption de la cellule solaire sans et avec un nombre variable de couches de BQs $\text{GaAs}_{0.95}\text{Bi}_{0.05} / \text{GaAs}$

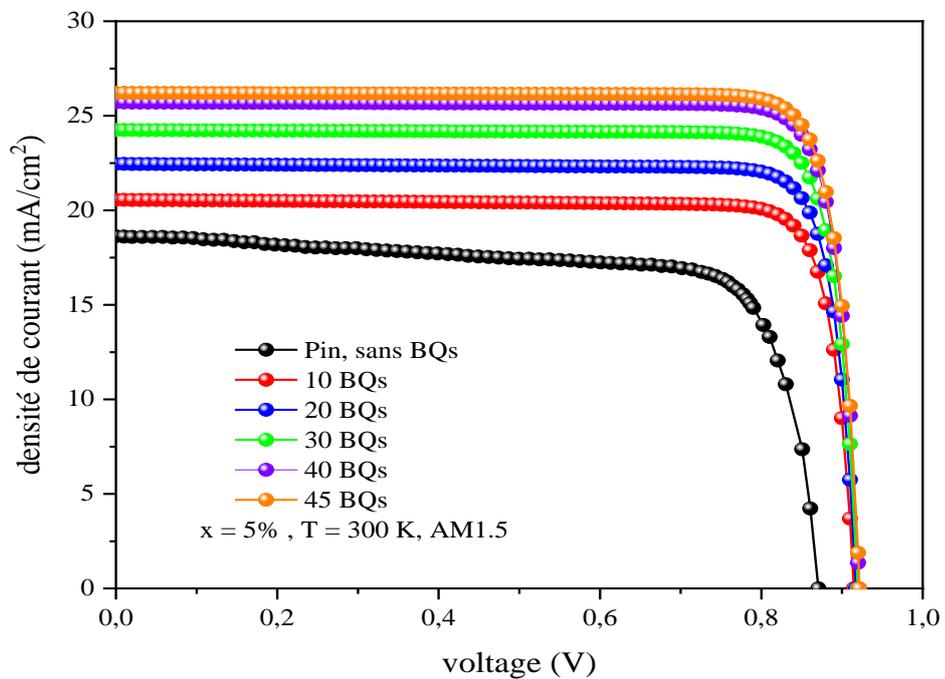


Figure 3.6 Caractéristique J-V de la cellule solaire sans et avec un nombre variable de couches de BQs $\text{GaAs}_{0.95}\text{Bi}_{0.05} / \text{GaAs}$.

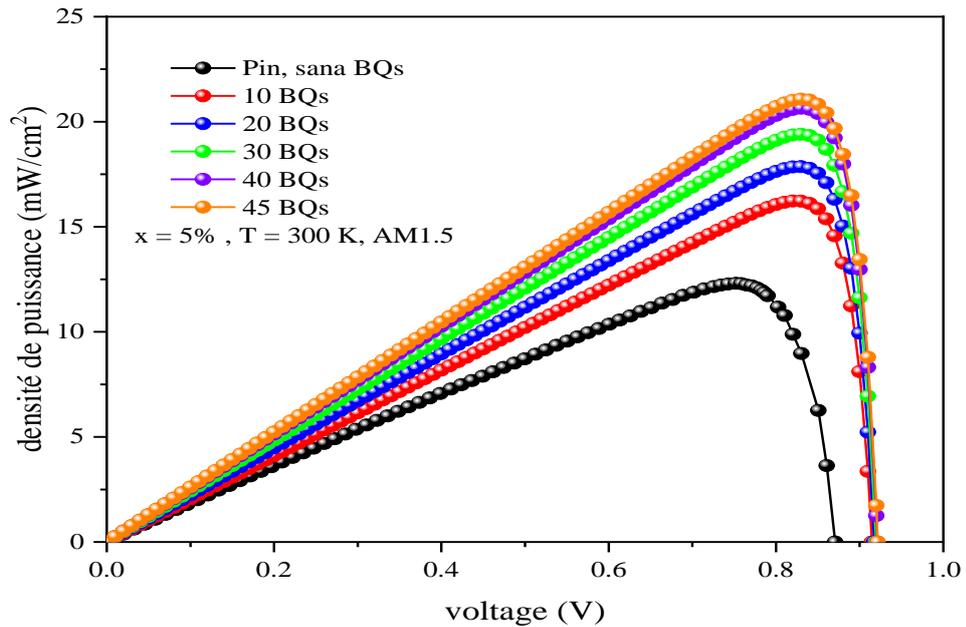


Figure 3.7 Caractéristique P-V de la cellule solaire sans et avec un nombre variable de couches de BQs GaAs_{0.95}Bi_{0.05} / GaAs.

Tableau 3.1 : Paramètres caractéristiques d'une cellule solaire p-i-n et à BQs GaAs_{0.95}Bi_{0.05} /GaAs pour un nombre variable de couches.

Nombre de couches de BQs	J_{cc} (mA/cm ²)	V_{co} (V)	FF (%)	η (%)
0	19.35	0.87	74.37	12.52
10	20.55	0.914	86.32	16.23
20	22.45	0.917	86.74	17.86
30	24.24	0.919	87.00	19.40
40	25.70	0.921	87.18	20.64
45	26.21	0.922	87.22	21.07

3.2.1.2 Effet de la couche d'InGaP sur l'efficacité de la structure a BQ de GaAsBi /GaAs

Dans cette partie nous allons voir l'effet d'insertion de deux couche d'InGaP ($E_g = 1.85$ pour In = 49%) (Deux couches en bleu en haut et en bas de type p et n) représentent la couche fenêtre et la couche de champ électrique en arrière (back surface field BSF) avec des épaisseurs de 50 nm et des concentrations de dopage de $2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ [78]. Ces deux couches sont utilisées afin de réduire la recombinaison en surface en avant et en arrière de la cellule solaire. La figure 3.8 représente la structure de la cellule solaire à BQs GaAs_{0.95}Bi_{0.05} /GaAs avec l'insertion de la couche fenêtre et de la couche BSF.

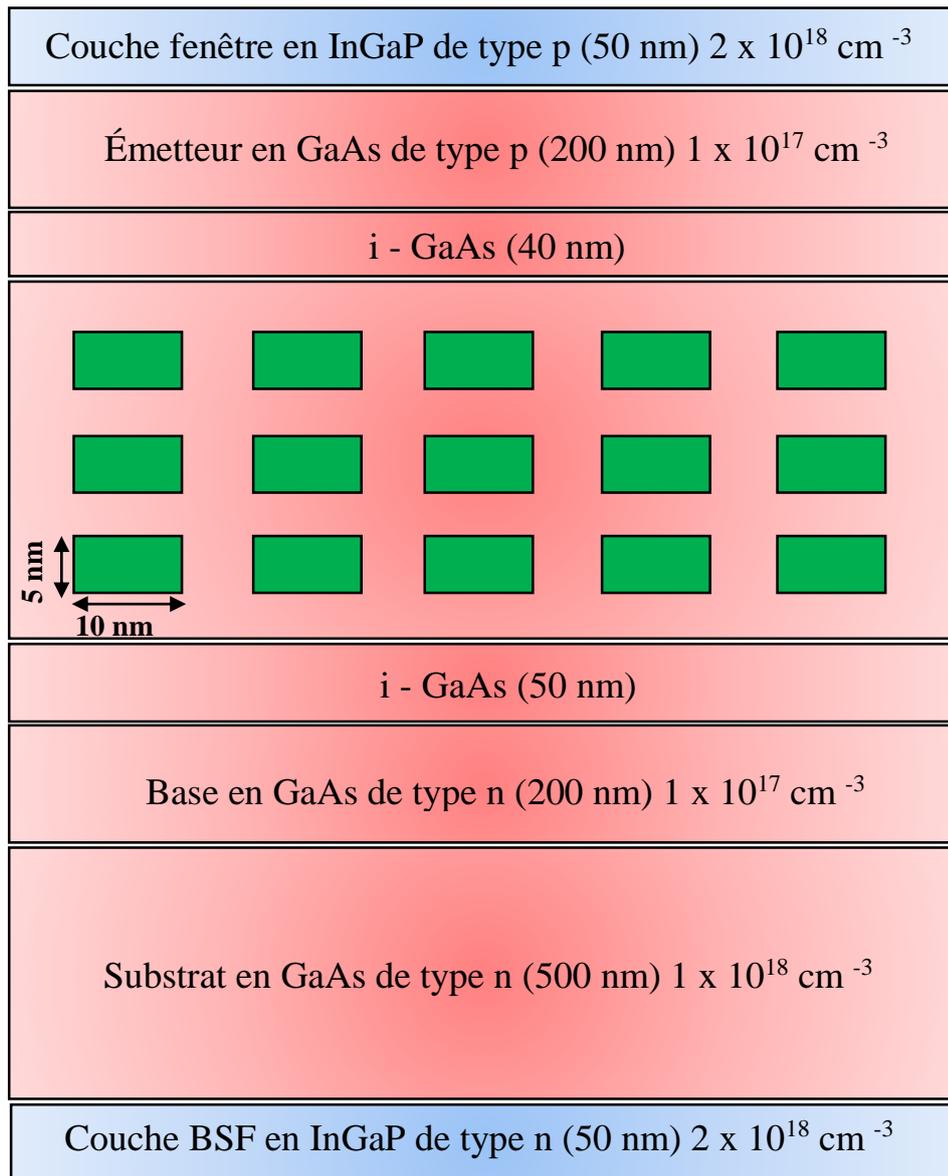


Figure 3.8 Structure de la cellule a BQ de GaAsBi /GaAs avec l’insertion de deux couches d’InGaP.

La figure 3.9 montre la caractéristique J-V pour notre structure de la cellule solaire à BQs GaAs_{0.95}Bi_{0.05} /GaAs sans et avec l’insertion des deux couches d’InGaP. Comme on peut le voir, le courant de court-circuit et la tension de circuit ouvert se développe avec l’insertion des deux couches d’InGaP, grâce à la minimisation des recombinaisons en surface en avant et en arrière de la cellule solaire. Pour cela, un développement relatif important de 21% et de 50% du courant de court-circuit et de tension de circuit ouvert, respectivement, est obtenu lors de la comparaison de nos structures avec et sans l’insertion des deux couches d’InGaP. Cette augmentation a induit à une augmentation dans l’efficacité de conversion

d'environ de 10% lorsque on compare les deux structures. Le tableau 3.2 illustre les principales caractéristiques obtenues dans cette simulation.

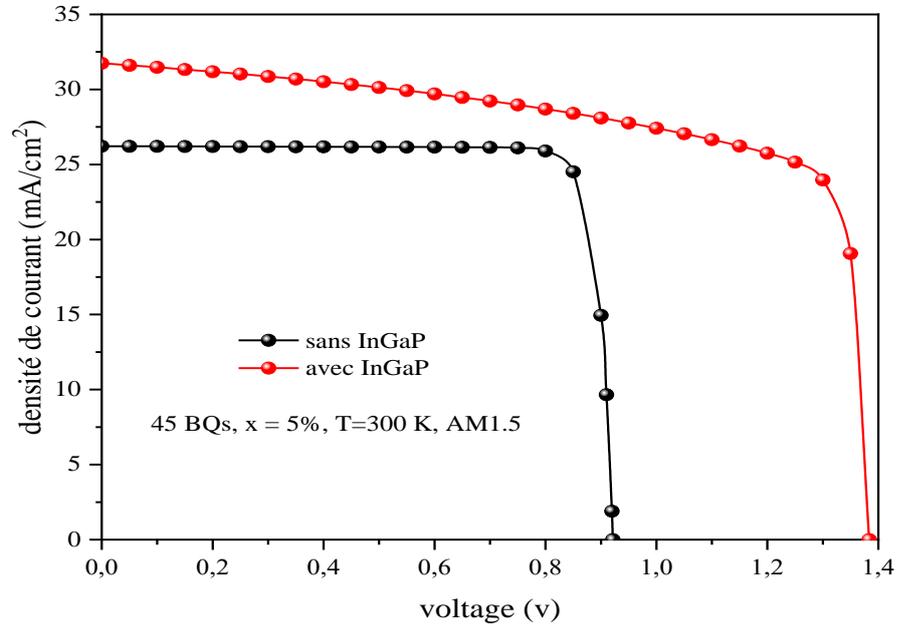


Figure 3.9 caractéristique J-V pour notre structure de la cellule solaire à BQs $\text{GaAs}_{0.95}\text{Bi}_{0.05}/\text{GaAs}$ sans et avec l'insertion des deux couches d'InGaP.

Tableau 3.2 : Paramètres caractéristiques d'une à BQs $\text{GaAs}_{0.95}\text{Bi}_{0.05}/\text{GaAs}$ avec l'insertion des deux couche d'InGaP pour un nombre variable de couches.

Nombre de couches de BQs	J_{cc} (mA/cm ²)	V_{co} (V)	FF (%)	η (%)
10	25.71	1,376	72.20	25.54
20	28.05	1.379	71.97	27.83
30	29.81	1.381	71.79	29.56
40	30.76	1.382	71.72	30.50
45	31.74	1.384	71.60	31.44

3.2.2 Cellule solaire à BQs d'InGaNaS/GaAs

Dans cette partie de travail nous nous sommes intéressés à la modélisation et à la simulation d'une cellule solaire à BQs d'InGaNaS/GaAs. Les BQs InGaNaS sont insérés dans la région intrinsèque d'une cellule solaire p-i-n à base de GaAs. La structure de la cellule p-i-n étudiée ici est la même montrée précédemment dans la figure (3.1). Trois

couches de GaAs en vert sont l'émetteur de type p avec une concentration de dopage de $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, la région intrinsèque et la base de type n avec la même concentration de dopage de l'émetteur. Sauf que dans cette simulation nous avons proposé d'utiliser les InGaNAs comme matériau de BQs afin de montrer l'effet de l'utilisation de ce dernier sur le paramètre caractéristique de la cellule solaire.

3.2.2.1 Résultats et discussion

La figure 3.10 montre la variation de la contrainte en fonction de la concentration d'indium et d'azote dans l'alliage InGaNAs. Comme nous pouvons le voir, nous avons deux types de contrainte (en tension et en compression), d'une part et pour In = 5% et N = 4% on observe une contrainte en tension, d'autre part et pour la même concentration en azote N = 4% et pour In = 40% nous avons une contrainte en compression. De plus, l'adaptation de réseau entre l'alliage GaAs et InGaNAs est obtenue pour $x = 2.9 y$, avec x et y étant respectivement la concentration d'indium et d'azote. On peut remarquer pour la contrainte en compression que l'augmentation de la concentration d'indium augmente rapidement la contrainte tandis que l'azote la diminue, au contraire dans la contrainte de tension l'augmentation de la concentration d'indium diminue la contrainte tandis que l'azote l'augmente.

La variation de l'énergie de la bande interdite en fonction de la concentration d'indium et d'azote est montrée sur la figure 3.11. Comme nous pouvons le voir, l'augmentation de la concentration d'indium et d'azote a conduit à la diminution de la bande interdite. Pour plus d'explications, nous prenons comme exemple une valeur de 10% et 1% de concentration en Indium et en azote, respectivement. Pour ces deux valeurs, la bande interdite est égale à 1.13 eV, en conservant la même valeur de concentration en azote ($y = 1\%$) et en augmentant la valeur d'indium à 40%, la bande interdite diminuant d'une valeur de 0.12 eV. D'autre part, en augmentant la concentration d'azote à une valeur de 4% et pour une même valeur d'indium 10%, on obtient une bande interdite de 0.90 eV, ce qui signifie que la concentration d'azote a un effet beaucoup plus important sur la bande interdite par rapport à l'indium.

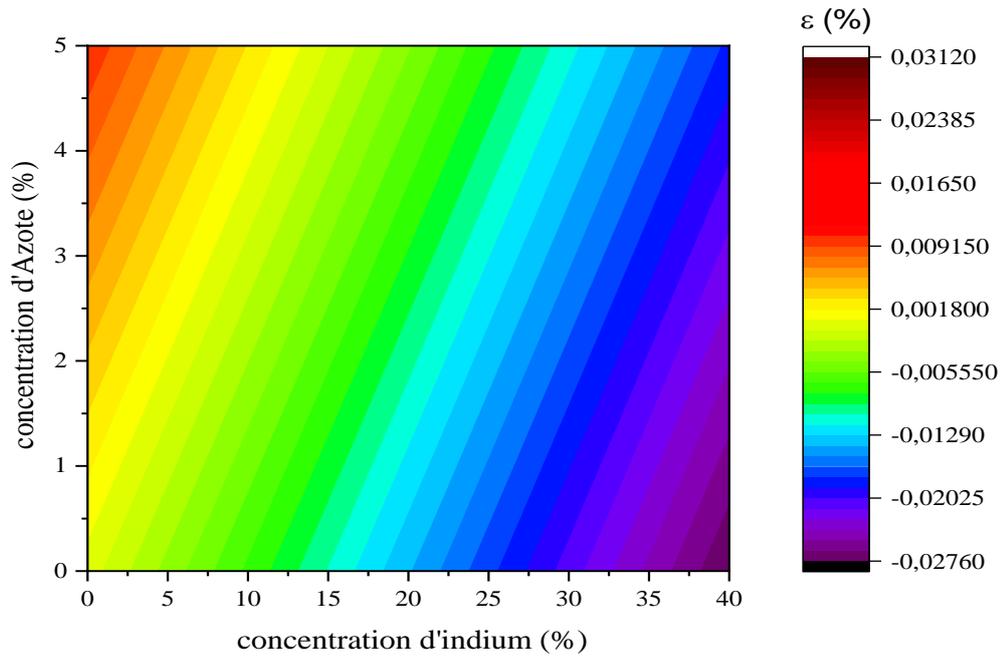


Figure 3.10 variation de la contrainte en fonction de la concentration d'indium et d'azote dans l'alliage InGaNAs.

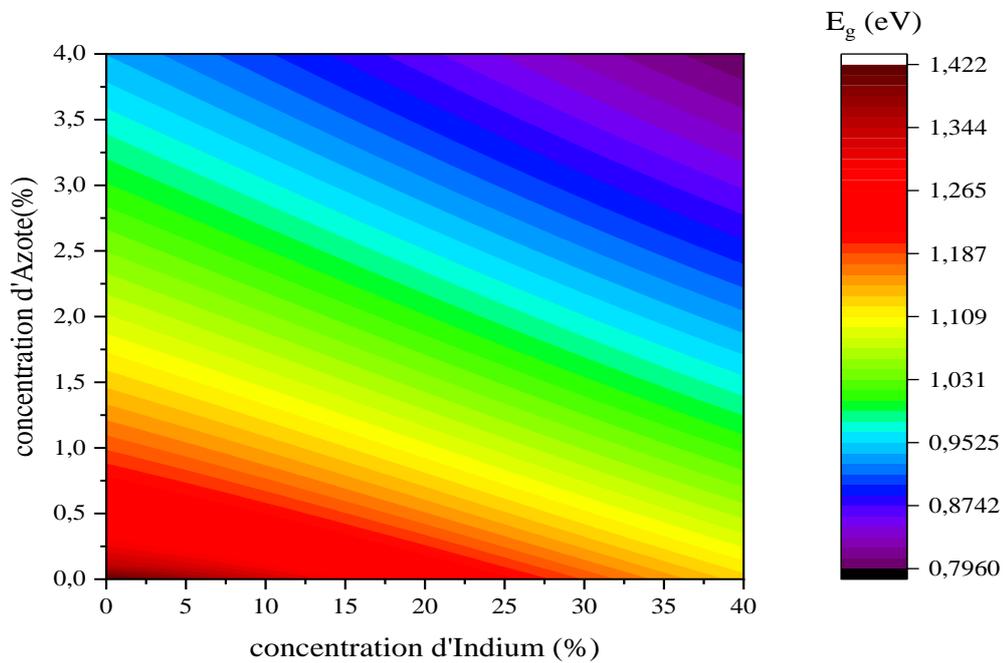
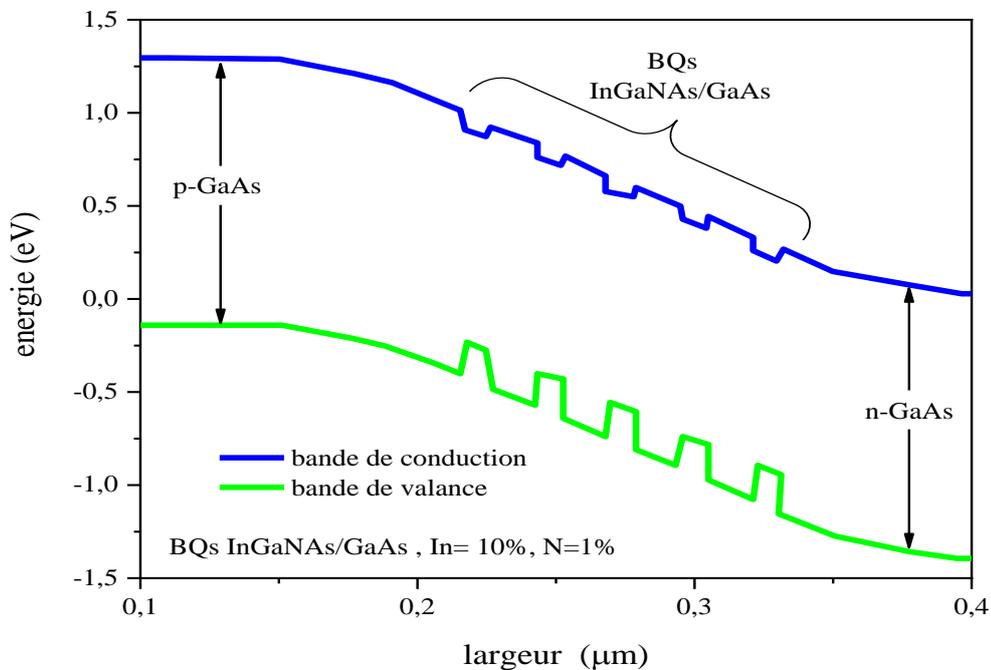


Figure 3.11 Variation de l'énergie la bande interdite en fonction de la concentration d'indium et d'azote

La Fig.3.12 représente le diagramme de bande d'énergie de la cellule solaire incluant les BQs InGaNaNs / GaAs, il est clair que la structure est en alignement de type I, dans une telle structure les photoporteurs sont confinés dans le matériau de la boîte quantique.

La figure 3.13 présente l'énergie de quantification des électrons et des trous lourds pour la structure a BQs d'InGaNaNs / GaAs pour des concentrations d'In et de N de 10 % et 1% respectivement, tout on prenant le premier niveau d'énergie. La courbe d'énergie de quantification pour les deux types de porteurs, montre une diminution de 0,38 eV et de 0,014 eV de ces deux énergies lorsque la largeur de la boîte varie de 10 à 40 nm. La diminution des énergies de quantification engendre une diminution dans l'énergie de transition comme montre les figures 3.14 et 3.15.



La Figure.3.12 diagramme de bande d'énergie de la cellule solaire incluant les BQs InGaNaNs / GaAs.

Les figures 3.14 et 3.15 représentent les énergies de transition entre le premier état d'énergie dans la bande de conduction et la bande de valence pour la structure à BQs de InGaNaNs / GaAs, pour des concentrations variable d'Indium et d'Azote, respectivement. Comme nous pouvons le voir dans ces deux figures, l'énergie de transition décroît avec l'augmentation de la largeur de la boîte. D'autre part, l'augmentation de la concentration d'indium a conduit à l'augmentation de l'énergie de transition, tandis que l'augmentation de

la concentration d'azote provoque la diminution de cette dernière. Pour plus de détail, nous prenons comme exemple une valeur de 10% et 1% de concentration en In et en N, respectivement. Pour ces deux valeurs, l'énergie de transition est égale à 1,204 eV, en conservant la même valeur de concentration en N ($y = 1\%$) et en augmentant la valeur d'In à 30%, l'énergie de transition augmente d'une valeur de 0.08 eV. D'autre part, en augmentant la concentration de N à une valeur de 3% et pour une même valeur d'In 10%, on obtient une énergie de transition de 1.194 eV, ce qui signifie que la concentration d'In a un effet beaucoup plus important sur l'énergie de transition par rapport à N. L'analyse de ces deux figures montre que l'énergie de transition est fortement dépendante de la taille de la boîte quantique. En effet, ces énergies sont inversement proportionnelles aux dimensions de la boîte.

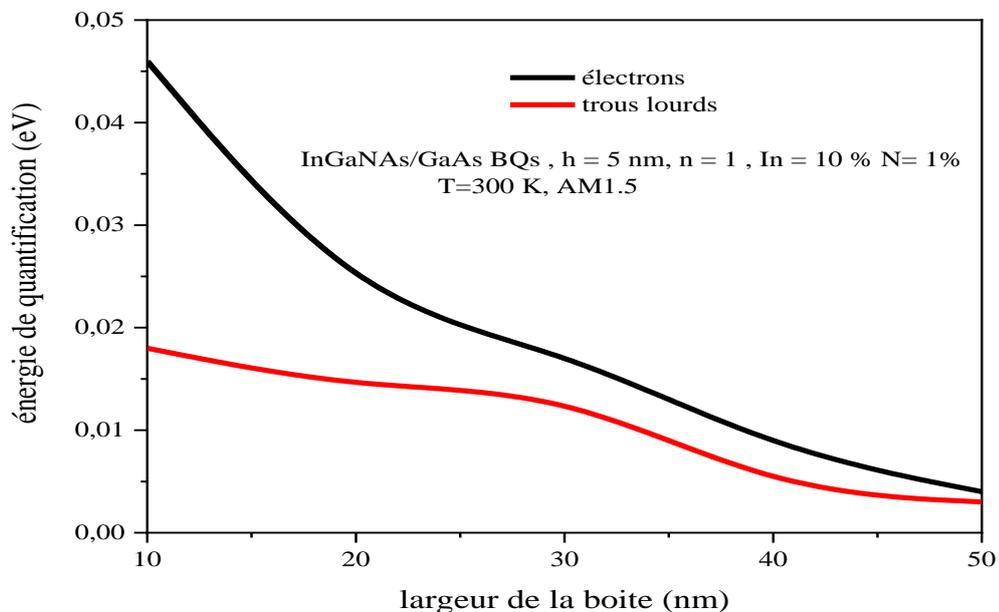


Figure 3.13 l'énergie de quantification des électrons et des trous lourds pour la structure à BQs d'InGaNaNs / GaAs

La figure 3.16 représente la variation du coefficient de réflexion en fonction de la concentration d'indium et d'azote dans l'alliage InGaNaNs. Comme nous pouvons le voir dans cette figure, le coefficient de réflexion augmente avec l'augmentation des concentrations d'indium et d'azote respectivement, et prend des valeurs minimal pour des faibles concentrations d'indium et d'azote, par exemple pour une concentration de 10% d'indium et de 1% d'azote, la valeur du coefficient de réflexion est de 0.26, lorsque nous augmentons les valeurs d'indium et de l'azote vers 40% et 4 % respectivement, le coefficient

de réflexion augment par un facteur de 1.15. D'après cette figure nous allons fixer les valeurs de la concentration d'indium et d'azote à 10% et 1%, respectivement, pour le reste de cette simulation.

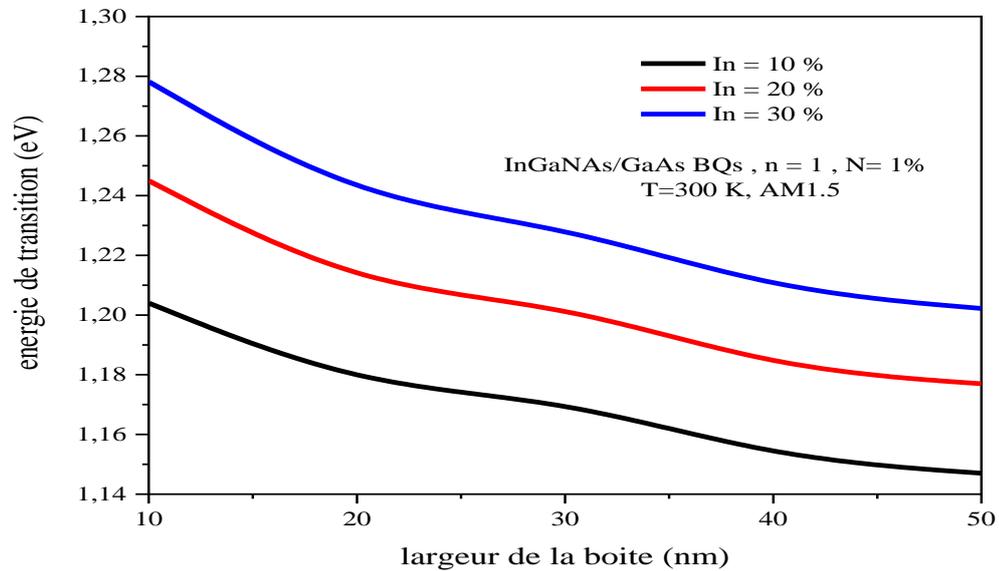


Figure 3.14 énergies de transition de la structure a BQs de InGaNaNs / GaAs, pour différentes concentrations d'Indium

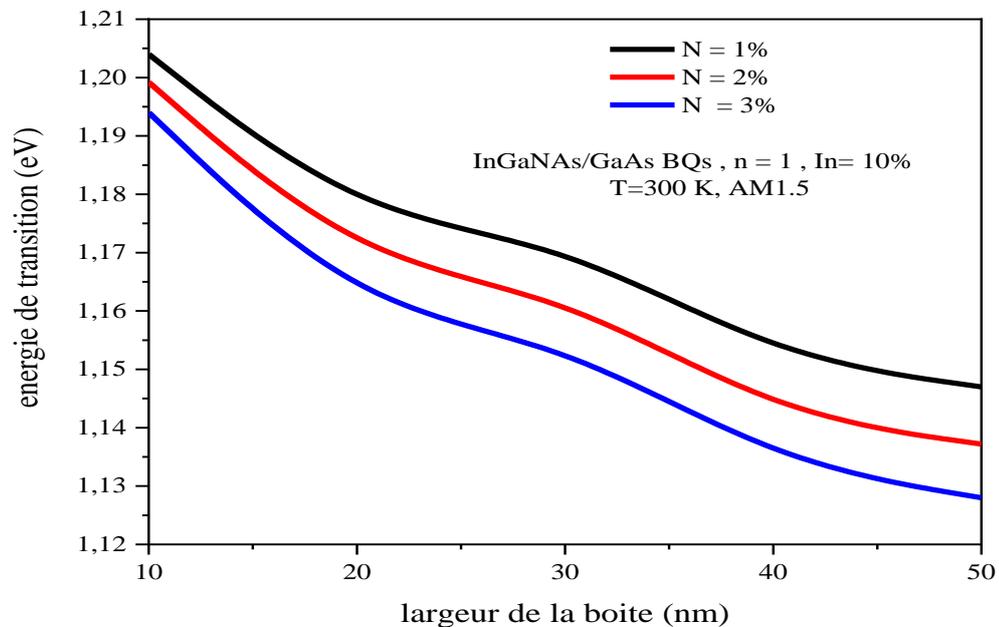


Figure 3.15 énergies de transition de la structure a BQs de InGaNaNs / GaAs, pour différentes concentrations d'Azote

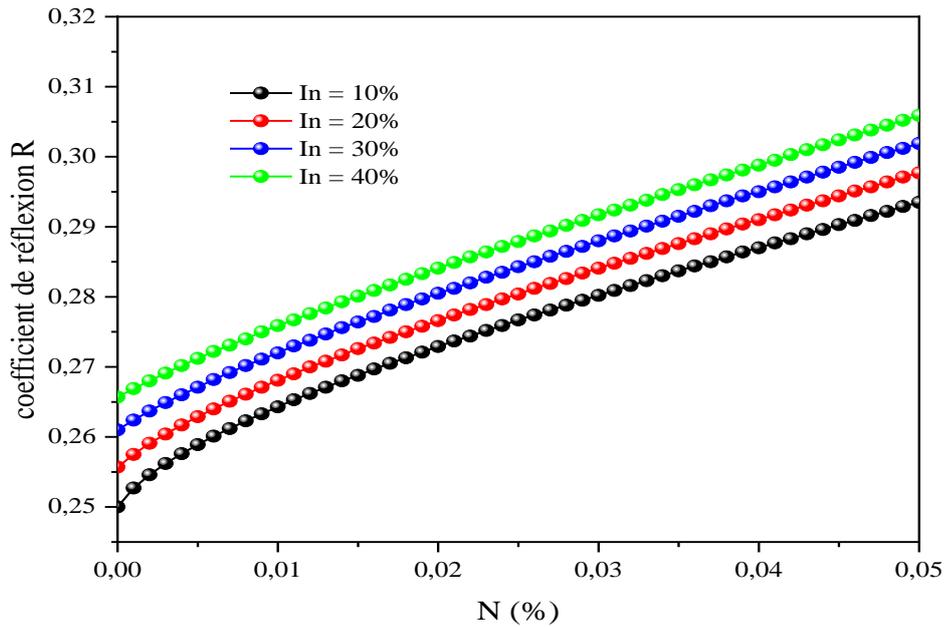


Figure 3.16 variation du coefficient de réflexion en fonction de la concentration d'indium et d'azote dans l'alliage InGaAs.

La figure 3.17 rapporte la variation de l'EQE en fonction du nombre des couches de BQs InGaAs insérées dans la région intrinsèque de la cellule solaire GaAs p-i-n. Il est clair que l'augmentation des couches de BQs insérées augmente l'EQE de la cellule et étend la réponse spectrale de la cellule par rapport à celle du p-i-n qui s'annule effectivement à zéro autour d'une longueur d'onde de 875 nm [82]. Pour plus d'explication, nous prenons par exemple une longueur d'onde de 1200 nm, la valeur de l'EQE augmente d'un facteur de 4.93 lorsque le nombre des couches de BQs augmente de 5 à 25, ce qui signifie que les photons à faible énergie sont bien absorbés dans cette plage de longueur d'onde et contribuent à la création de courant supplémentaire. Ce résultat a des implications importantes pour le développement du coefficient d'absorption de la cellule comme le montre la figure 3.18. Comme le montre cette figure, il existe une différence significative entre le coefficient d'absorption de notre cellule à BQs $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}_{0.01}\text{As}_{0.99}$ / GaAs pour différents nombres de couches BQs avec celui de la cellule standard. Par exemple à une valeur d'intensité maximale du spectre solaire (600 nm) [83], la différence entre les deux structures avec 25 BQs insérés et sans BQs (p-i-n) est égale à $\Delta\alpha = 4.46 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$.

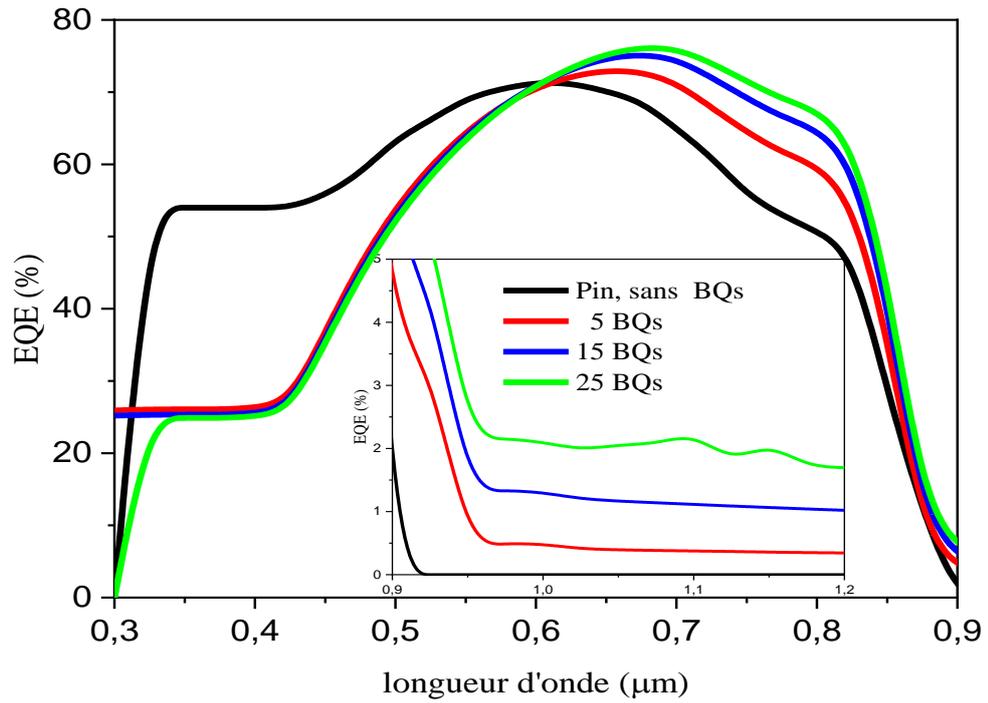


Figure 3.17 variation de l'EQE en fonction du nombre de couches de BQs
 $\text{In}_{0,1}\text{Ga}_{0,9}\text{N}_{0,01}\text{As}_{0,99} / \text{GaAs}$.

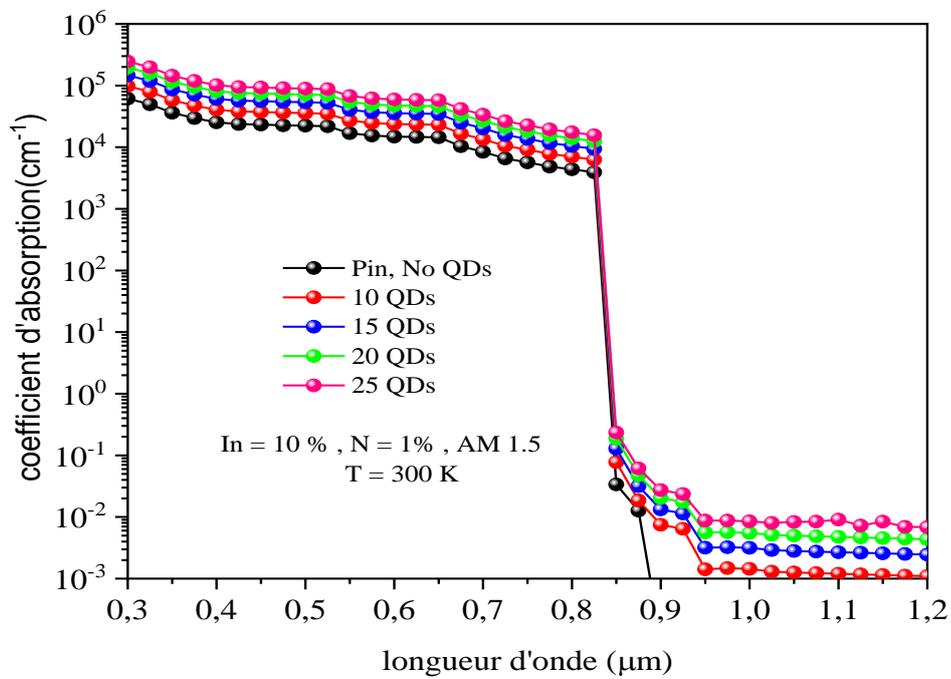


Figure 3.18 variation du coefficient d'absorption en fonction du nombre couches de BQs
 $\text{In}_{0,1}\text{Ga}_{0,9}\text{N}_{0,01}\text{As}_{0,99} / \text{GaAs}$.

La figure 3.19 illustrent la caractéristique J-V en fonction du nombre de couches de BQs $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}_{0.01}\text{As}_{0.99}$ / GaAs. Comme la figure présente, la densité de courant augmente et la tension en circuit ouvert reste la même en augmentant le nombre des BQs insérées, par exemple, lorsque le nombre des BQs insérées augmente de 5 à 25, la densité de courant augmente d'un facteur de 1.09. Cette augmentation de densité de courant a un impact sur l'amélioration de la puissance délivrée par la cellule, qui augmente de $\Delta P = 1,5 \text{ mW} / \text{cm}^2$ lorsque le nombre des BQs insérées augmente de 5 à 25 comme on peut le voir sur la figure 3.20. Au-delà de ce nombre de BQs insérées nous avons une diminution brusque dans la tension de circuit ouvert et de puissance comme montre les figures 3.19 et 3.20, ce qui signifie que c'est le nombre de BQs où nous avons une saturation. Le tableau 3.3 illustre les principales caractéristiques obtenues dans cette simulation.

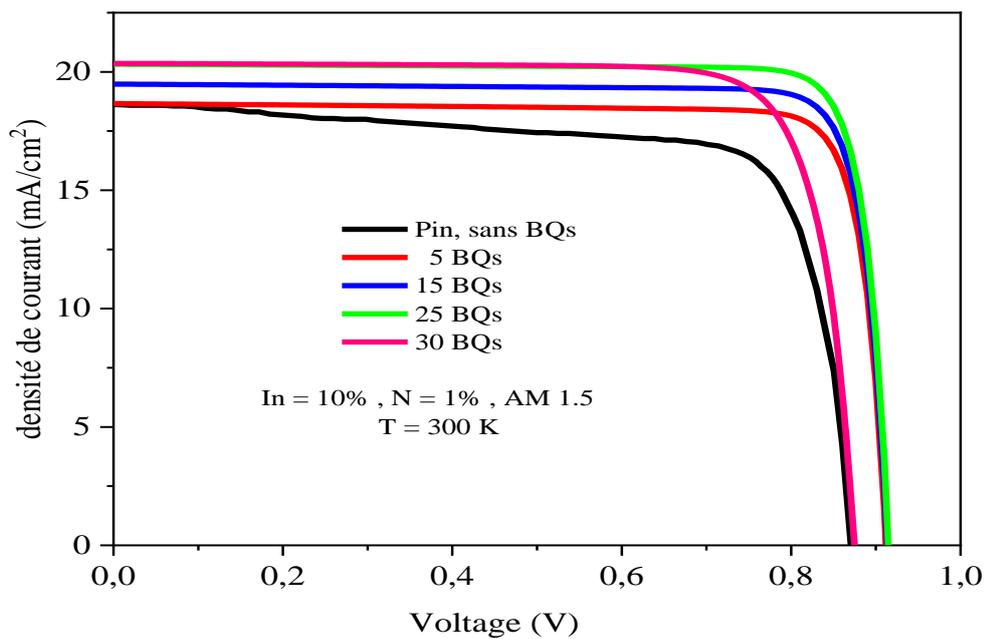


Figure 3.19 Caractéristique J-V de la cellule solaire sans et avec un nombre variable de couches de BQs $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}_{0.01}\text{As}_{0.99}$ / GaAs.

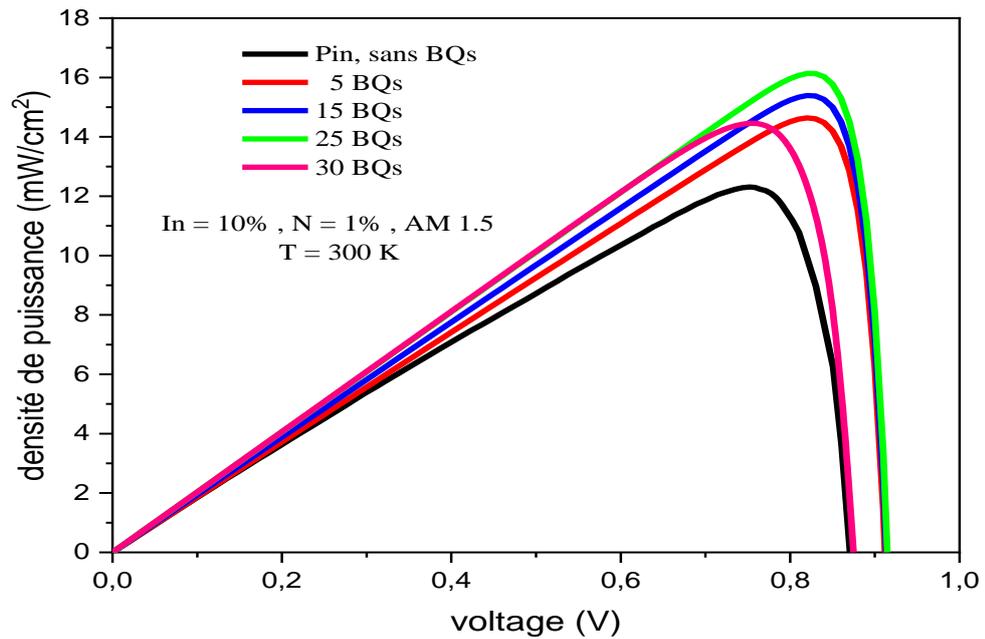


Figure 3.20 Caractéristique P-V de la cellule solaire sans et avec un nombre variable de couches de BQs $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}_{0.01}\text{As}_{0.99} / \text{GaAs}$.

Tableau 3.3 : Paramètres caractéristiques d'une cellule solaire p-i-n et à BQs $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}_{0.01}\text{As}_{0.99} / \text{GaAs}$ pour un nombre variable de couches.

Nombre de couches de BQs	J_{cc} (mA/cm ²)	V_{co} (V)	FF (%)	η (%)
0	19.35	0.87	74.37	12.52
5	18,66	0.912	85.99	14.64
10	19,00	0.912	86.24	14.96
15	19.48	0.913	86.47	15.39
20	19.92	0.914	86.66	15.78
25	20,32	0.914	86.99	16.14
30	20,35	0.875	76.53	14.61

La figure 3.21 compare notre résultat J-V obtenu pour 25 couches de BQs $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}_{0.01}\text{As}_{0.99}$ avec celui de $\text{In}_{0.167}\text{Ga}_{0.833}\text{As} / \text{GaAs}$ SCBQ [84], $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As} / \text{GaAs}$ SC-BQ [85] et la cellule GaAs référence [84]. Comme on peut le voir sur cette figure, notre structure avec 25 couches de BQs $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}_{0.01}\text{As}_{0.99}$ insérées dans la région intrinsèque de la cellule solaire GaAs a rapporté beaucoup plus de J_{sc} (20.32 mA / cm²) que les autres structures, 17.7 mA / cm², 18.7 mA / cm² et 18.2 mA / cm², respectivement pour les deux

cellules a BQs $\text{In}_{0.167}\text{Ga}_{0.833}\text{As} / \text{GaAs}$ et $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As} / \text{GaAs}$ et la cellule GaAs référence. De plus, il y a une différence non négligeable dans le V_{oc} entre notre structure et les autres structures. Cependant, cette différence est égale à 0.22 V, 0.13 V et 0.03 V en comparant notre structure avec celle des deux cellules a BQs $\text{In}_{0.167}\text{Ga}_{0.833}\text{As} / \text{GaAs}$ et $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As} / \text{GaAs}$ et la cellule GaAs référence, respectivement. L'augmentation observée de J_{sc} et V_{oc} pourrait être attribuée à l'augmentation de l'EQE dans la région de longueur d'onde plus longue, comme le montre la figure 3.22.

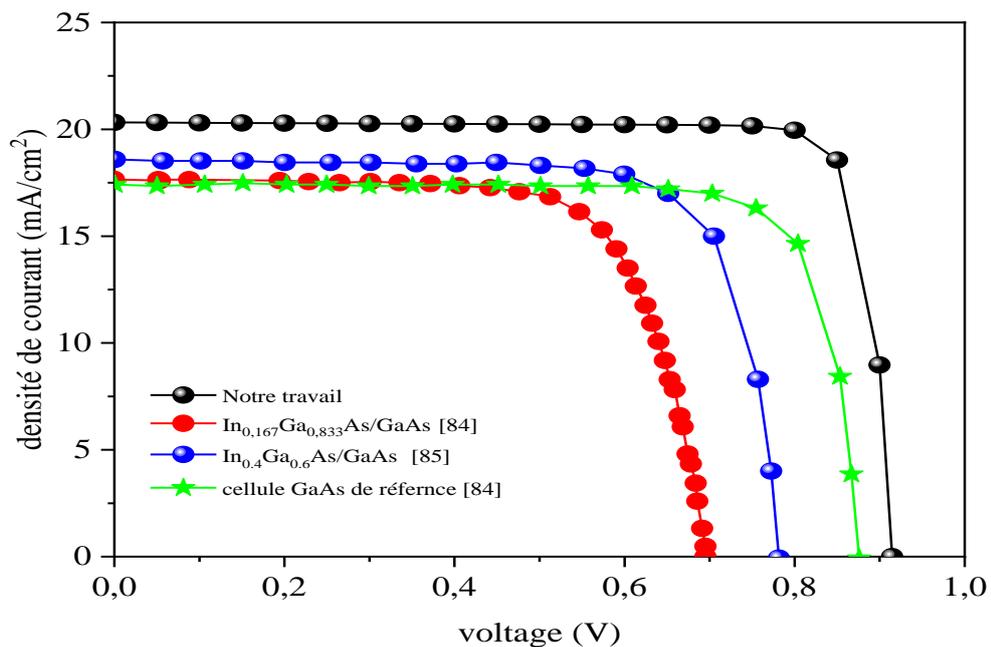


Figure 3.21 comparaison de la caractéristique J-V de notre structure a 25 couches de BQs $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}_{0.01}\text{As}_{0.99}$ avec celle des deux cellules à BQs $\text{In}_{0.167}\text{Ga}_{0.833}\text{As} / \text{GaAs}$ et $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As} / \text{GaAs}$ et la cellule GaAs de référence.

D'après les données de la figure 3.22, il est évident que l'EQE de notre structure a un long bord d'absorption comparé à celui de celle des deux cellules a BQs $\text{In}_{0.167}\text{Ga}_{0.833}\text{As} / \text{GaAs}$ et $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As} / \text{GaAs}$ et la cellule GaAs référence. Pour une longueur d'onde supérieure à 950 nm, notre structure présente une valeur d'EQE la plus élevée (égale à 2% à une longueur d'onde de 1200 nm) par rapport à celle des autres structures, qui tendent à zéro autour de la longueur d'onde de 900 nm, 980 nm et 1075 nm pour la cellule GaAs de référence [84], des deux cellules a BQs $\text{In}_{0.167}\text{Ga}_{0.833}\text{As} / \text{GaAs}$ [85] et $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As} / \text{GaAs}$ [84], respectivement. Ce résultat peut s'expliquer par le fait que notre structure présente une légère contrainte par rapport à celui des autres structures [86]. Cependant, l'amélioration de

la valeur EQE signifie que les photons avec une énergie plus faible sont bien absorbés et contribuent à la génération du photo-courant, ce qui a affecté l'augmentation de la densité de courant comme nous l'avons expliqué précédemment.

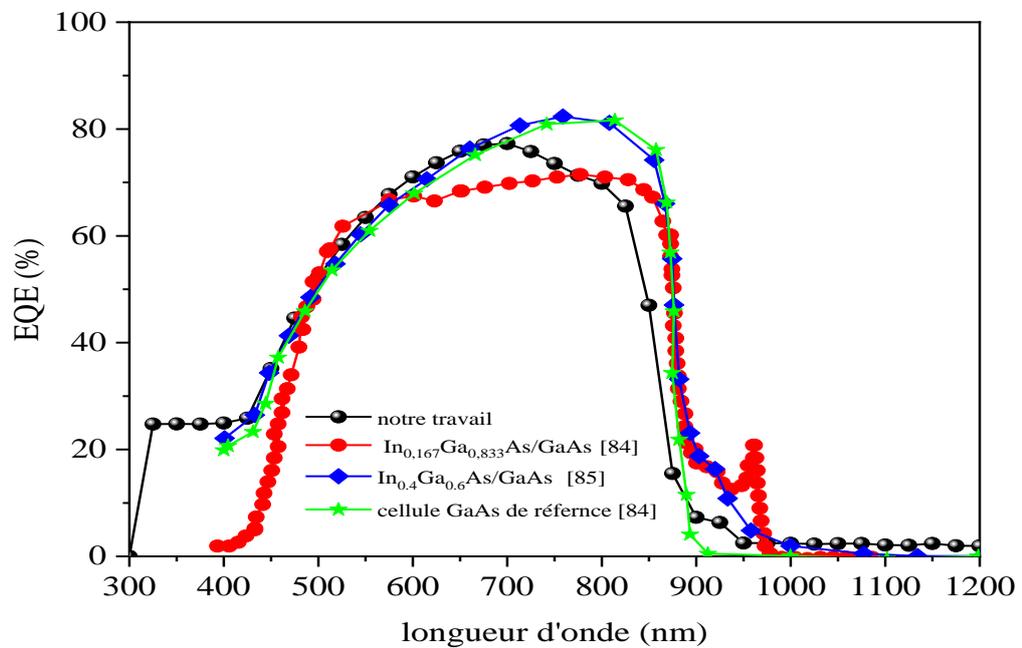


Figure 3.22 comparaison du EQE de notre structure à 25 couches de BQs $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}_{0.01}\text{As}_{0.99}$ avec celle des deux cellules à BQs $\text{In}_{0.167}\text{Ga}_{0.833}\text{As} / \text{GaAs}$ et $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$ et la cellule GaAs de référence.

3.2.2.2 Effet de la couche d'InGaP sur l'efficacité de la structure à BQs $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}_{0.01}\text{As}_{0.99} / \text{GaAs}$

Comme nous avons fait précédemment pour la structure GaAsBi / GaAs, dans cette partie nous allons voir l'effet de l'insertion des deux couches d'InGaP (couche fenêtre et couche BSF) sur l'efficacité de notre structure à BQs de $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}_{0.01}\text{As}_{0.99} / \text{GaAs}$, tous en gardant la même structure de la cellule de la figure 3.8, ou nous ajoutant les deux couches d'InGaP.

La figure 3.23 illustre la variation de densité de courant en fonction du voltage pour notre structure à 25 BQs de $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}_{0.01}\text{As}_{0.99}/\text{GaAs}$ sans et avec l'insertion des deux couches d'InGaP. On note que le courant ainsi que le voltage augmente avec l'insertion des deux couches d'InGaP, de telle sorte que le J_{cc} et le V_{co} profitent d'une amélioration de 9.54 mA/cm^2 et 0.48 V , respectivement.

Cette amélioration a un effet direct sur l'amélioration de l'efficacité de conversion de notre structure à BQs de $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}_{0.01}\text{As}_{0.99}/\text{GaAs}$ qui augmente d'un facteur de 2.12, lorsque nous comparons notre structure sans et avec l'insertion des deux couche d'InGaP. La densité du courant de court-circuit J_{sc} , la tension de circuit ouvert V_{oc} , le facteur de forme FF et l'efficacité de conversion de la structure $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}_{0.01}\text{As}_{0.99}/\text{GaAs}$ pour plusieurs nombres des BQs sont énumérées dans le tableau 3.4.

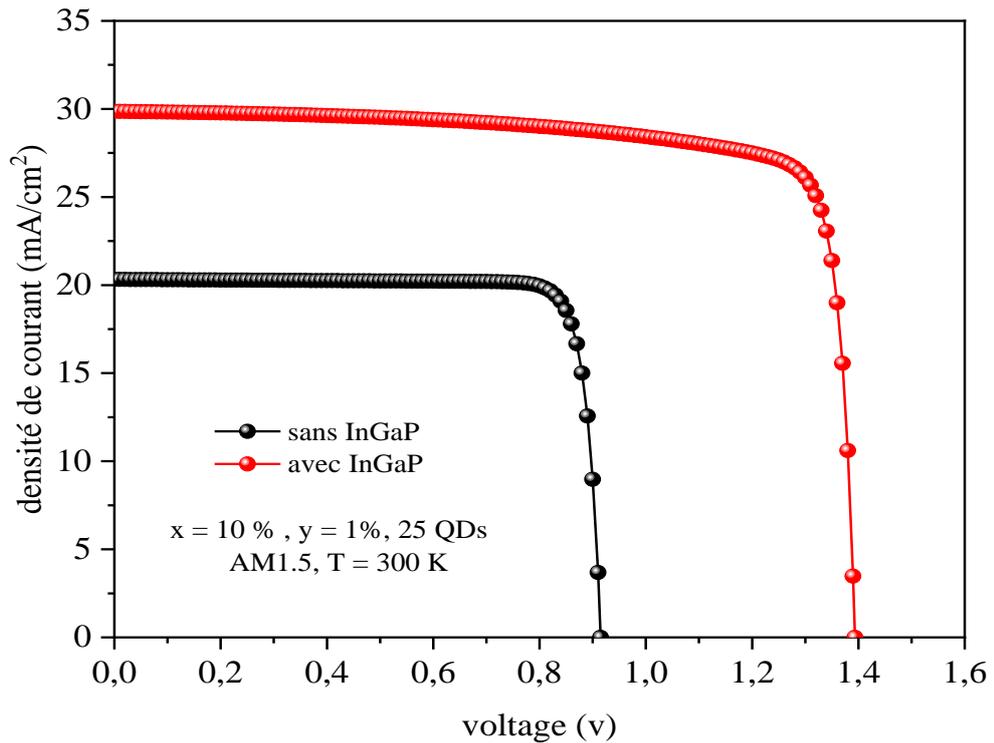


Figure 3.23 caractéristique J-V pour notre structure de la cellule solaire à BQs $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}_{0.01}\text{As}_{0.99}/\text{GaAs}$ sans et avec l'insertion des deux couches d'InGaP.

Tableau 3.4 : Paramètres caractéristiques d'une à BQs $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}_{0.01}\text{As}_{0.99}/\text{GaAs}$ avec l'insertion des deux couches d'InGaP pour un nombre variable de couches.

Nombre de couches de BQs	J_{cc} (mA/cm ²)	V_{co} (V)	FF (%)	η (%)
5	28.35	1.392	82.41	32.53
10	28.71	1.392	82.29	32.99
15	29.17	1.393	82.17	33.40
20	29.53	1.393	82.09	33.77
25	29.86	1.393	81.99	34.12

3.3 Conclusion

Dans ce chapitre deux structures de cellules solaires à nanostructures BQs à base de nouveaux matériaux ont été simulés et optimisés. Suites à ces simulations, nous sommes arrivés à montrer l'utilité des BQs pour améliorer les performances électriques et optiques d'une cellule solaire conventionnelle et à sélectionner les bons matériaux nanostructures et barrières. Nous avons constaté que l'utilisation du GaAs comme un matériau barrière et substrat est un très bon choix pour former des cellules solaires à nanostructures quantiques grâce à la facilité de croissance sur GaAs et ses propriétés excellentes. Concernant les matériaux nanostructures, l'étude de GaAsBi nous a montrés l'utilité de ce dernier comme un matériau BQ pour l'employer sur une matrice de GaAs, avec un rendement de conversion de 21.07 % obtenu pour 45 couches de BQs insérés. Aussi l'étude du matériau quaternaire InGaNAs montre la faisabilité de l'utilisation de ce dernier comme matériau BQs, avec un rendement de conversion de 16 % obtenue pour 25 couches de BQs seulement. Au-delà de ce nombre, nous avons vu une dégradation des performances de la cellule. Aussi la comparaison des résultats de ce matériau quaternaire avec d'autre résultat expérimentaux confirme le bon choix de notre matériau comme matériau. Aussi, à la fin de chaque simulation les deux structures ont été optimisées par l'étude de l'effet de l'insertion de la couche fenêtre et la couche BSF sur l'efficacité de conversion des deux structures étudié. Dans ce contexte, nous avons trouvé qu'avec l'insertion de ces deux couches l'efficacité augmente de 21.07% à 31% et de 16% à 34.12% pour nos structures a 45 BQs de $\text{GaAs}_{0.95}\text{Bi}_{0.05} / \text{GaAs}$ et à 25 BQs de $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}_{0.01}\text{As}_{0.99} / \text{GaAs}$, respectivement. Dans le chapitre suivant nous allons présenter d'autres structures de BQs à base des nouveaux matériaux tout en utilisant le GaAsP comme un matériau barrière.

CHAPITRE 4

MODELISATION ET SIMULATION DES CELLULES SOLAIRES À BOITES QUANTIQUES : BQs À BASE de GaAsP

4.1 Introduction

Dans ce chapitre nous allons continuer dans la modélisation et la simulation de différentes structures de BQs, mais cette fois-ci nous allons remplacer le matériau barrière GaAs par le ternaire GaAsP, où nous allons étudier l'effet de l'incorporation de ce dernier dans la région intrinsèque sur les performances électriques de nos structures afin de déterminer les concentrations optimales des différents éléments constituant l'alliage. La première partie de ce chapitre est consacré à l'étude de l'insertion de BQs de GaAs dans une matrice de GaAsP (GaAs/GaAsP), dans l'objectif est d'améliorer les performances électriques de nos cellule, par l'étude de l'effet de certains paramètres comme la différence du paramètre de maille, la fraction molaire x des nanostructures quantiques, le nombre de couches, et aussi l'effet de la température. Ensuite, nous allons continuer dans le même contexte par le remplacement des matériaux qui constituent les BQs (le GaAs) par le InP. Finalement, nous essaierons de faire une comparaison entre les différentes structures étudiées afin de sélectionner les meilleurs qui donnent une bonne optimisation de la cellule conventionnelle correspondante.

4.2 Cellules solaires à boîte quantiques simulées à base de GaAsP

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

4.2.1 Cellule solaire à BQs de GaAs/GaAsP

Actuellement, les auteurs chercheurs visent à améliorer l'efficacité de la cellule solaire à base de GaAs, en raison de ses bonnes propriétés physiques et optiques. Par conséquent, il est important de trouver un système de matériaux avec un paramètre de réseau adapté à GaAs. Cependant, l'insertion de BQ dans GaAs en tant que matériau barrière est une meilleure option pour surmonter les limites d'efficacité de conversion de Shockley-Quisser [87]. En règle générale, la recherche dans le domaine des cellules solaire à BQs a été effectuée et s'est concentrée sur le GaAs en tant que matériau barrière en raison de ses propriétés optiques et électroniques. Contrairement, l'alliage du GaAsP en tant que matériau

barrière à quelques rapports ; ceci est lié à la grande discordance de réseau qui crée une limite sur le nombre de BQ qui peuvent être logés avant que la relaxation de contrainte n'ait lieu. Une étude précédente de BQ basé sur GaAsP en tant que matériau barrière a été rapportée par Voicu Popescu et al [75] (InGaAs dans la matrice GaAsP). Dans cet étude, nous rapportons la modélisation et la simulation de cellule solaire à BQ GaAs / GaAsP, afin de montrer l'effet de la contrainte sur les propriétés optiques et électriques de la cellule, la variation du nombre de BQ et l'effet de la température ont également été rapportés.

La figure 4.1 montre la procédure d'insertion de trois couches de BQ dans la région intrinsèque de la cellule solaire p-i-n standard de GaAs, qui a également été remplacée par la région intrinsèque GaAsP, cela nous permet d'avoir une cellule solaire a BQ GaAs dans une matrice de GaAsP matrice (GaAs/GaAsP).

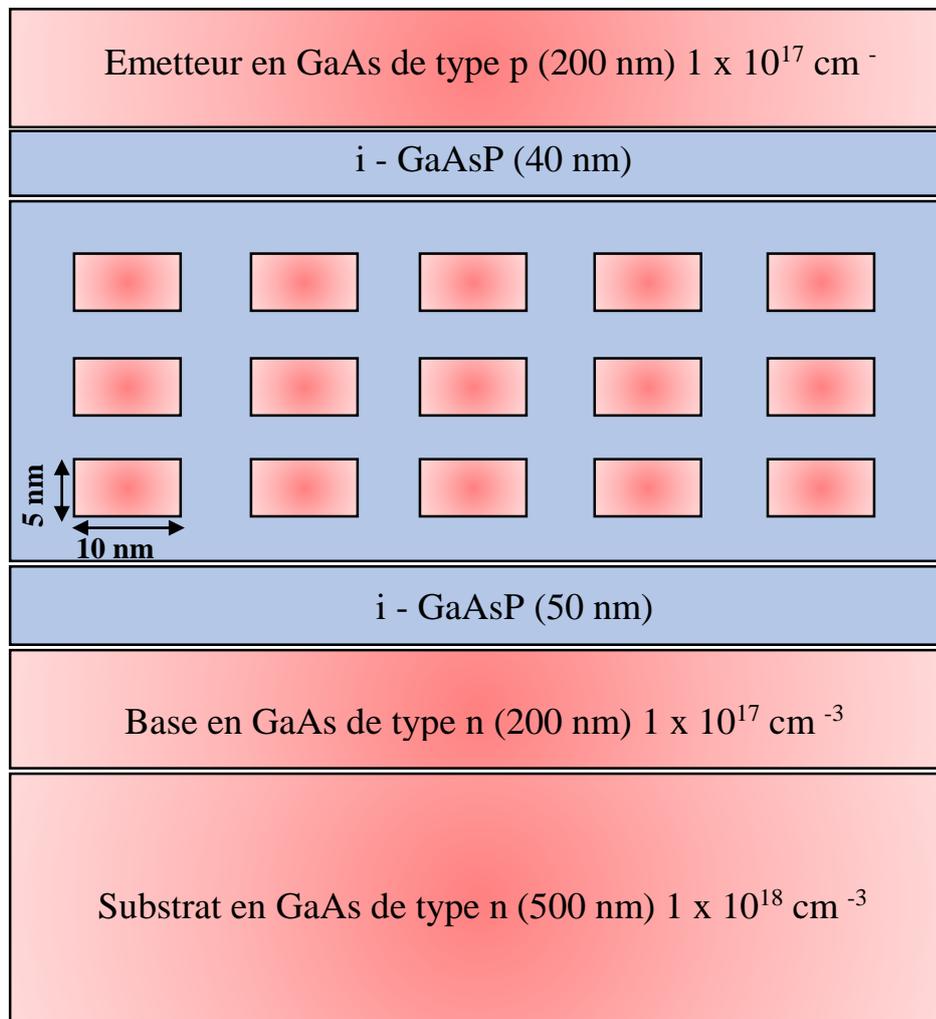


Figure 4.1 : Structure de la cellule a BQ de GaAs /GaAsP [88].

4.2.1.1 Résultat et discussion

La figure 4.2 montre la variation de l'énergie de la bande interdite et la variation de la contrainte en fonction de la concentration de Phosphore dans l'alliage $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x$. Cette figure montre qu'une augmentation de l'énergie de bande interdite de GaAsP s'accompagne d'une augmentation de la contrainte ; on note une augmentation de 59.15% de l'énergie de la bande interdite. On note également qu'il existe une seule contrainte (contrainte en tension) quelle que soit la concentration en phosphore. Selon cette simulation, nous avons fait varier la concentration de phosphore sur l'alliage $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x$ sur l'intervalle $[0, 0.5]$, dont nous avons une faible contrainte, afin de trouver la meilleure valeur de concentration de phosphore qui nous donne les meilleures performances de notre cellule.

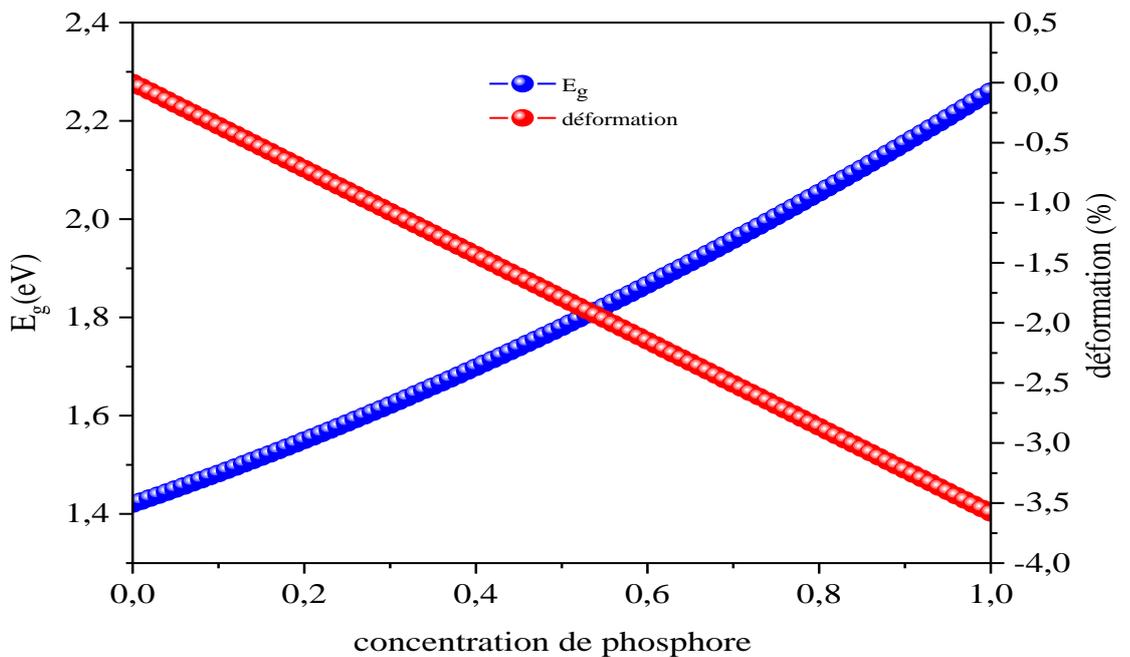


Figure 4.2 : Variation de l'énergie de la bande interdite et de la contrainte en fonction de la concentration de phosphore [88]

La figure 4.2 montre le diagramme d'énergie de la cellule solaire à BQs GaAs / GaAsP, où cinq périodes de BQs de GaAs / GaAsP sont insérées dans la région intrinsèque. Il était clair que la structure est un alignement de bande de type II. Dans ce type d'alignement, les électrons sont confinés dans un matériau (matériau BQ par exemple), tandis que les trous sont confinés dans l'autre matériau (matériau barrière), ce qui est favorable pour les

dispositifs photovoltaïques et utile pour le transport des porteurs photogénérés. Cette structure nous permet d'améliorer les systèmes photovoltaïques [89]

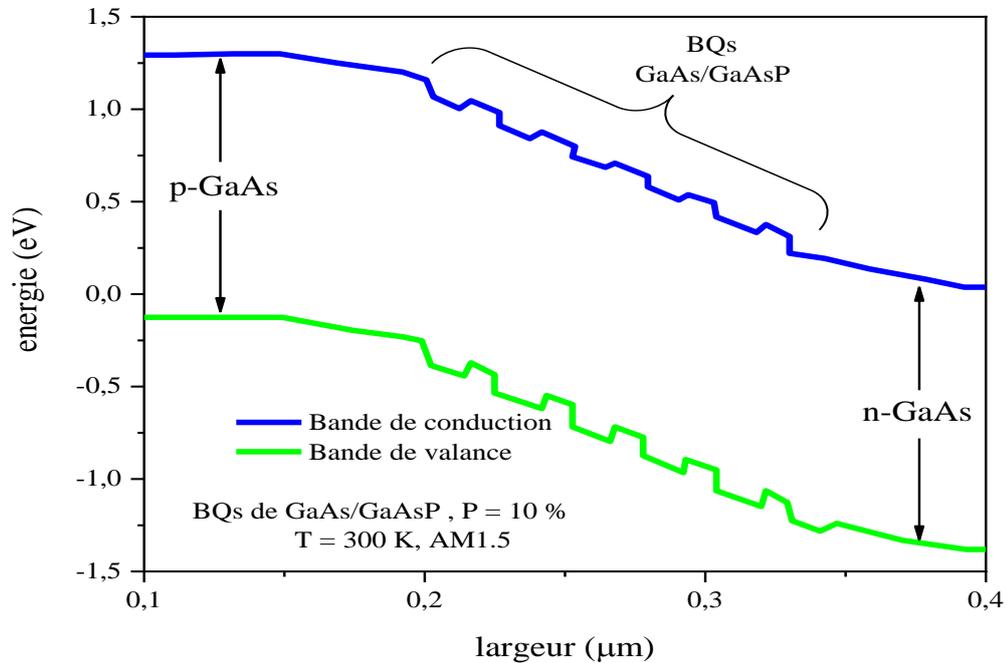


Figure 4.3 Diagramme d'énergie de la cellule solaire à BQs GaAs / GaAsP, pour cinq périodes de BQs de GaAs / GaAsP

Les figures 4.4 et 4.5 montrent la variation de l'énergie de quantification des électrons et des trous en fonction de la largeur de la boîte pour les deux premiers niveaux. Nous voyons bien dans ces deux figures que les énergies de quantification sont inversement proportionnelles aux dimensions de la boîte, de telle sorte que l'énergie décroît avec l'augmentation de la largeur de la boîte, pour cela l'énergie baisse d'une valeur de 0,015 eV et 0,005 eV lorsque la largeur de la boîte augmente de 10 à 30 nm, pour les électrons et les trous respectivement. Cette diminution dans l'énergie de quantification provoque une décroissance dans l'énergie de transition comme le montre la figure 4.6

Dans les figures 4.8 et 4.9, les énergies de transition pour différentes concentrations de phosphore sont présentées. Nous pouvons clairement remarquer d'une part que l'énergie de transition décroît avec l'augmentation de la largeur de la boîte à cause de la diminution de l'énergie de quantification comme nous avons expliqué précédemment. Aussi il est évident que cette énergie est toujours finie par une énergie supérieure ou égale à l'énergie de la bande interdite du matériau qui est utilisé comme boîte (le GaAs (1.42 eV)). D'autre part

l'énergie de transition augmente avec l'augmentation de la concentration du phosphore, par exemple, lorsque la concentration du phosphore varie de 10% à 30 %, la différence entre les deux valeurs d'énergie est de 0,122 eV pour une largeur de boîte de 10 nm. Nous pouvons expliquer cette augmentation dans l'énergie de transition par le fait que l'énergie de gap augmente avec l'augmentation de la concentration comme nous avons déjà expliqué précédemment dans la figure 4.2. Nous pouvons conclure que le potentiel de confinement électronique est plus important pour les petites BQ. Car ce dernier modifie les états énergétiques des BQs de différentes tailles. Nous observons aussi que pour les petites BQ, le potentiel de confinement électronique est plus profond, ce qui est lié à la contrainte [76].

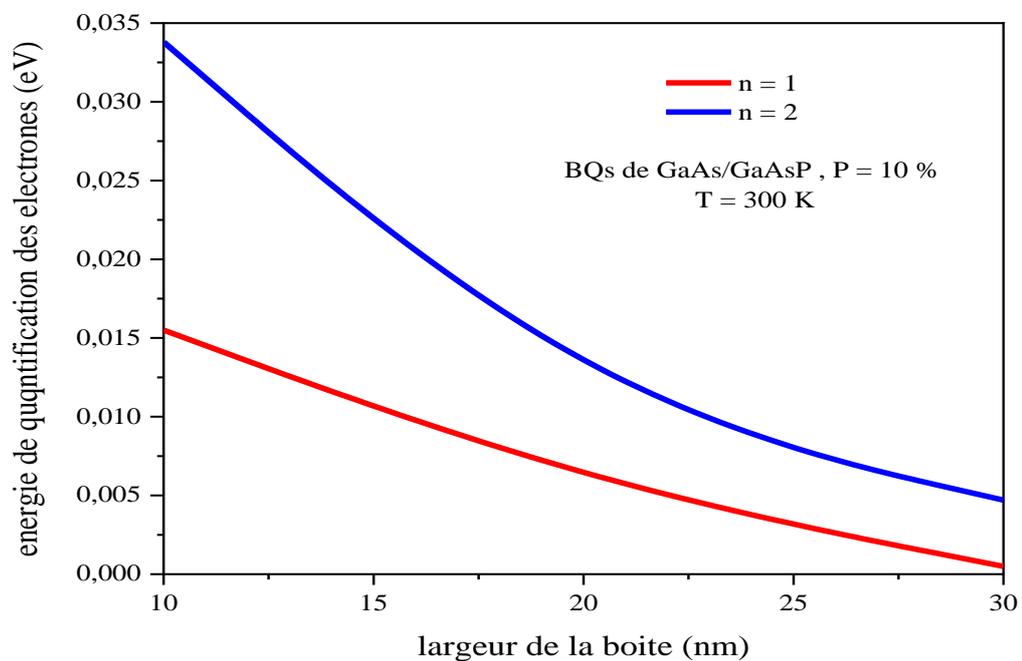


Figure 4.4 Variation de l'énergie de quantification des électrons en fonction de la largeur de la boîte.

Les figures 4.8 et 4.9 représentent les caractéristiques courant-tension J-V et puissance-tension P-V de la cellule solaire à BQs GaAs / GaAsP pour un nombre variable de couches de BQs insérées : 0, 5, 10, 15, 20 et 25 respectivement. Le tableau 4.1 englobe tous les paramètres caractéristiques de la cellule solaire obtenus dans notre simulation pour un nombre différent de BQs. Comme on peut le voir, la puissance libérée par cette structure augmente lorsque le nombre de couches BQ augmente. Cela est dû à l'augmentation du courant de court-circuit. Cette amélioration du courant de court-circuit est due à l'absorption des photons avec une énergie plus faible, ce qui signifie plus de paires électron-trou photo

g n r es. De plus, la tension en circuit ouvert reste presque la m me. En cons quence, l'efficacit  de conversion augmente de 12.50%   22% en comparant 25 couches de BQs de GaAs / GaAs_{0.9}P_{0.1} avec une cellule solaire GaAs-Pin standard. Au-del  de ce nombre, on constate une baisse soudaine d'efficacit . C'est le nombre de couches de BQs pour lequel nous avons la saturation.

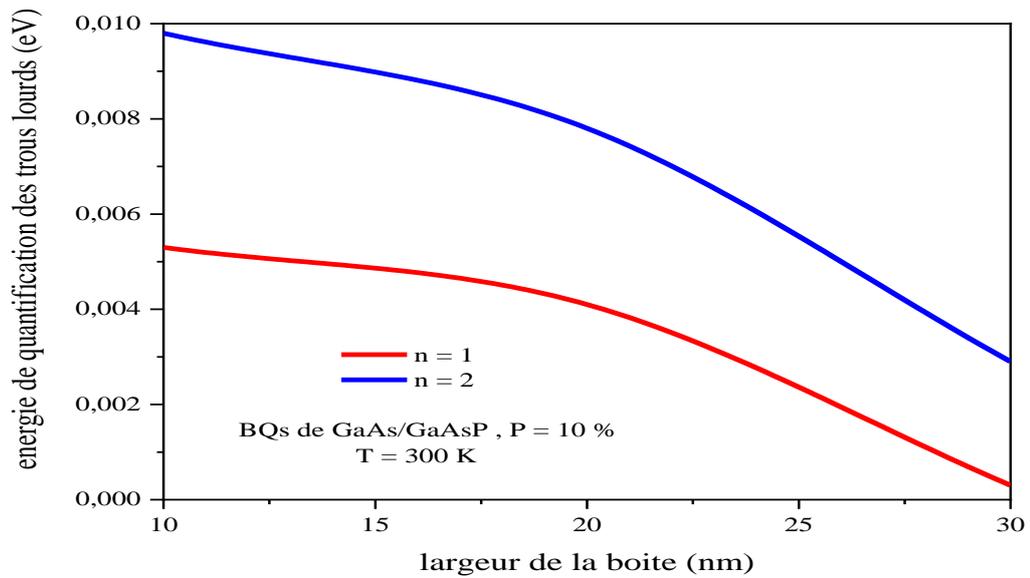


Figure 4.5 Variation de l' nergie de quantification des trous lourds en fonction de la largeur de la boite.

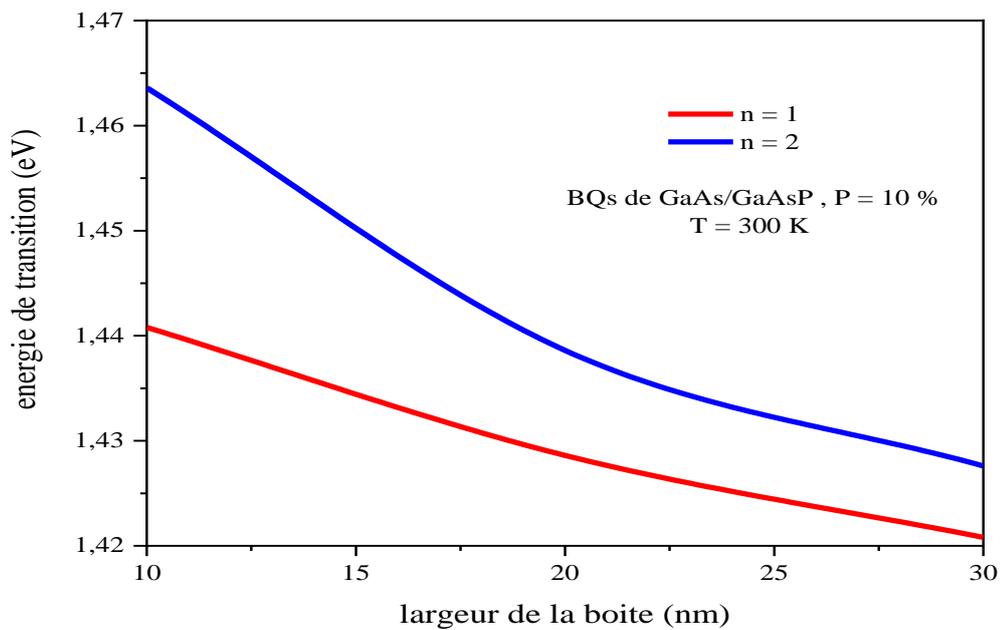


Figure 4.6  nergies de transition pour les deux premiers niveaux

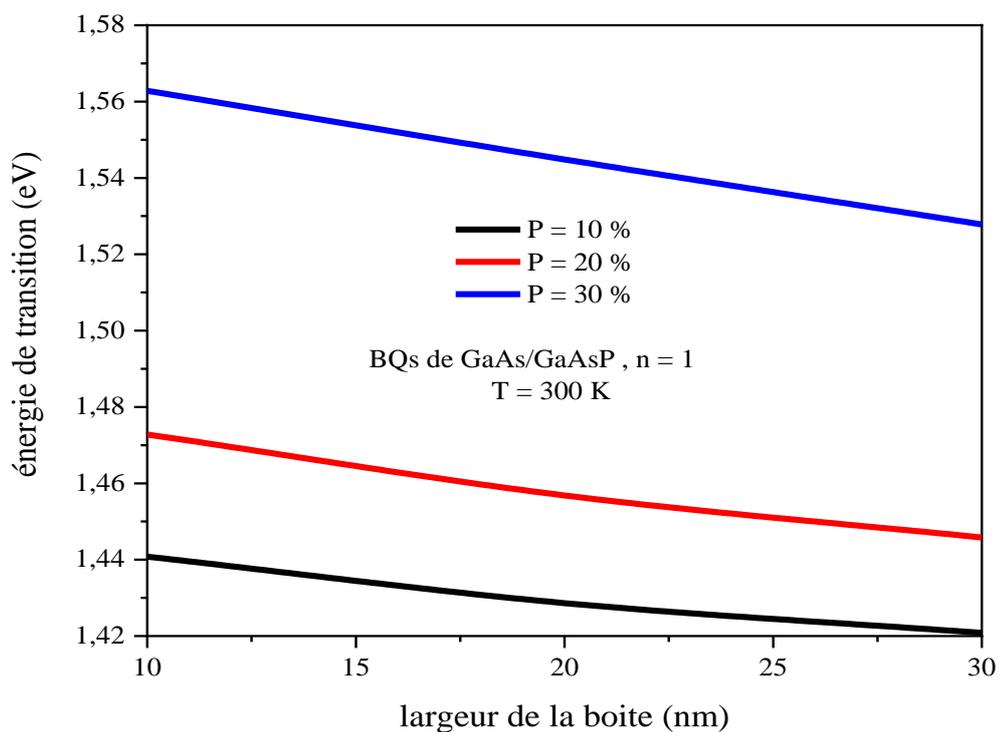


Figure 4.7 Énergies de transition pour différents concentration de phosphore.

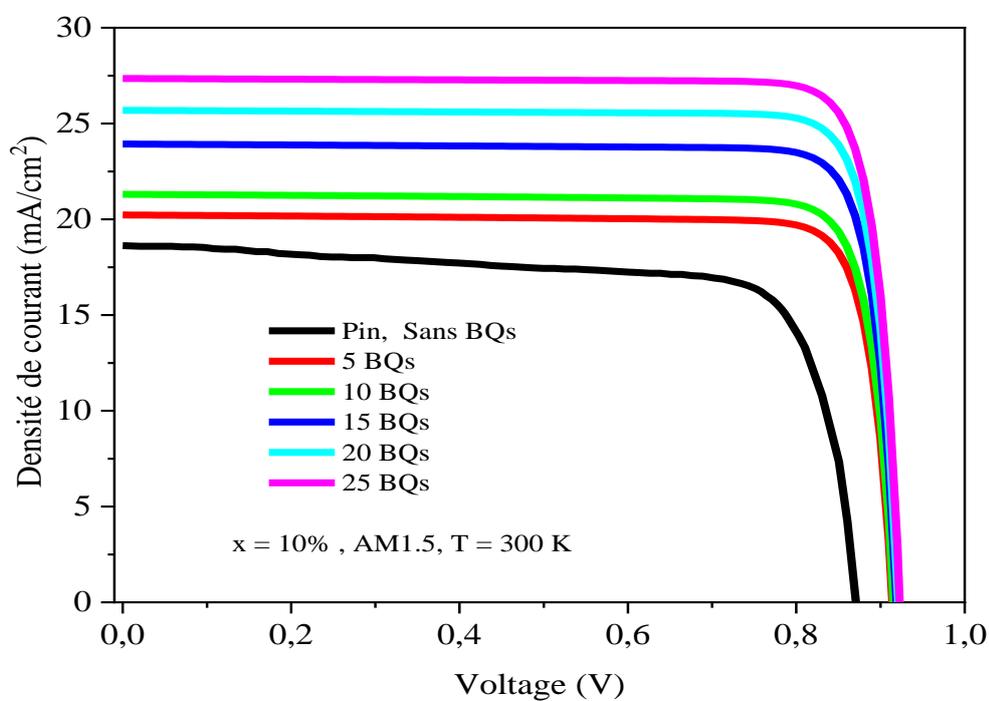


Figure 4.8 : Caractéristique J-V de la cellule solaire sans et avec un nombre variable de couches de BQs GaAs/GaAs_{0.9}P_{0.1} [88].

Tableau 4.1 : Paramètres caractéristiques d'une cellule solaire p-i-n et à BQs
GaAs/GaAs_{0.9}P_{0.1} pour un nombre variable de couches.

Nombre de couches de BQs	J_{cc} (mA/cm ²)	V_{co} (V)	FF (%)	η (%)
0	19.35	0.87	74.37	12.52
5	20.22	0.906	85.67	15.76
10	21.30	0.907	86.06	16.63
15	24.14	0.902	86.44	18.83
20	25.69	0.911	86.77	20.30
25	27.35	0.912	87.16	22.00

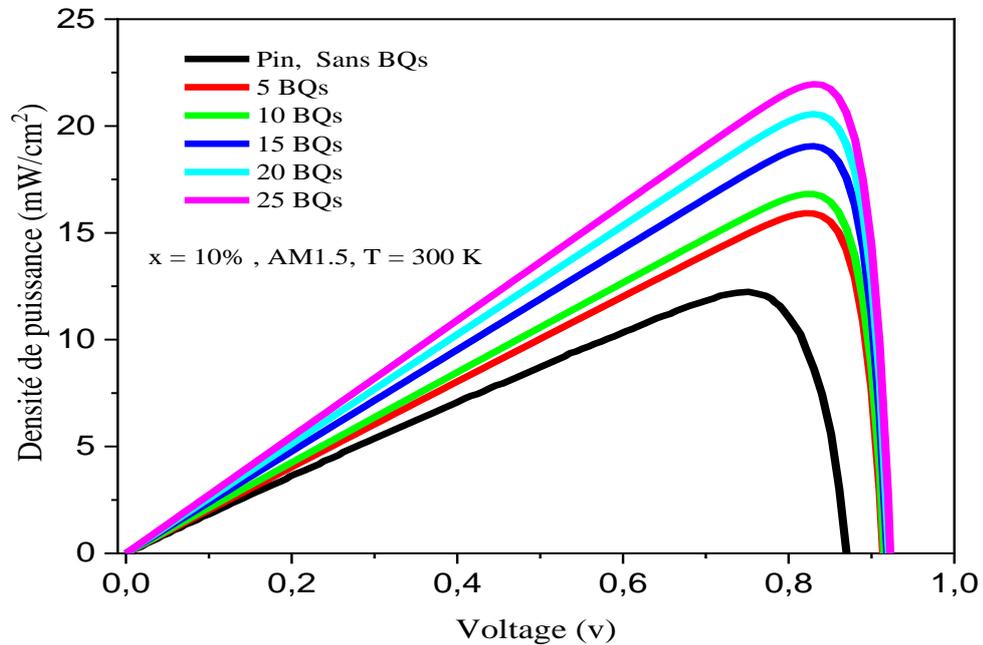


Figure 4.9 : Caractéristique P-V de la cellule solaire sans et avec un nombre variable de couches de BQs GaAs/GaAs_{0.9}P_{0.1} [88].

La figure 4.10 montre l'EQE en fonction de la longueur d'onde d'une cellule solaire avec et sans BQs de GaAs/GaAs_{0.9}P_{0.1} pour un nombre différent de couches de BQs insérées : 5, 10, 15, 20 et 25. Comme le montre cette figure, l'efficacité quantique externe de la cellule solaire pin standard sans BQs passe en effet à zéro autour d'une longueur d'onde de 875 nm [82]. D'autre part, nos cellules pour un nombre différent de BQs GaAs/GaAs_{0.9}P_{0.1} insérés montrent une réponse spectrale plus étendue que celle de la cellule de référence (au-dessus de 875 nm). Par exemple à une longueur d'onde de 1100 nm, la différence entre l'EQE d'une cellule solaire avec 25 BQs et la cellule solaire standard est de

$\Delta EQE = 24,80\%$. Cela est dû à l'absorption des photons de faible énergie par les BQs, ce qui signifie que ces photons sont bien absorbés par la cellule solaire et ont contribué à la création du photocourant. De plus, il est évident que le coefficient d'absorption prend une valeur élevée sur le long de l'intervalle de longueurs d'onde par rapport à la cellule solaire p-i-n lorsqu'un plus grand nombre de BQs de GaAs/GaAs_{0,9}P_{0,1} sont insérés. Par exemple, la différence entre le coefficient d'absorption des deux structures de cellules solaires est de $\Delta\alpha = 4,45 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-1}$. En comparant le coefficient d'absorption de 25 BQs de GaAs/GaAs_{0,9}P_{0,1} QDSC avec celui d'une cellule solaire p-i-n sans BQs, pour une valeur de longueur d'onde qui correspond à l'intensité maximale du spectre solaire (600 nm) [83]. Comme nous pouvons le voir sur la figure 4.11. Selon cette simulation, nous avons fixé le nombre de BQ à 25 ce qui nous donne de meilleures performances.

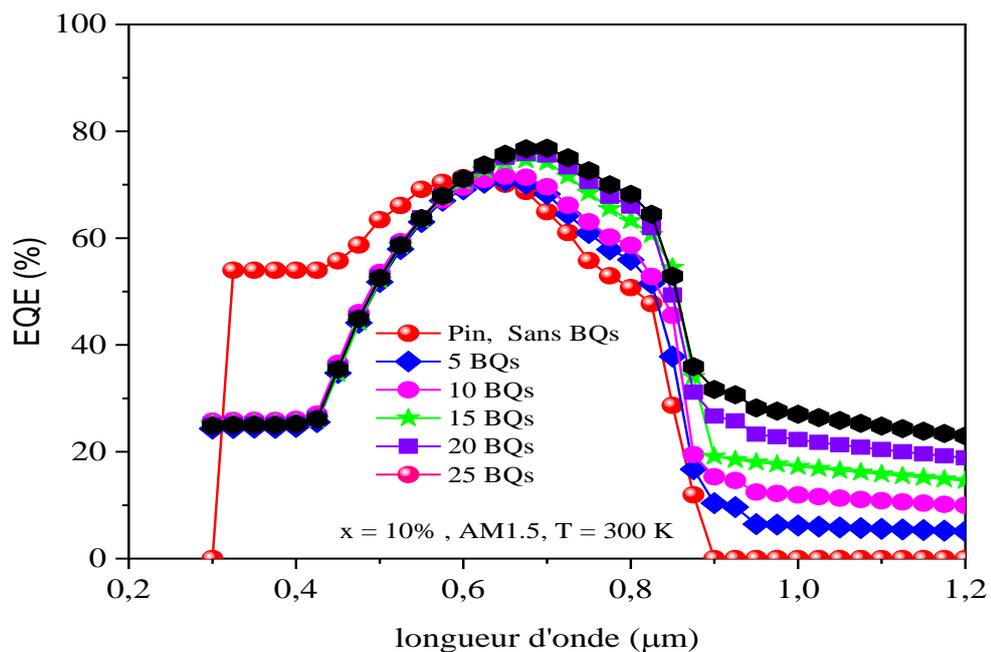


Figure 4.10 : EQE de la cellule solaire sans et avec un nombre variable de couches de BQs GaAs/GaAs_{0,9}P_{0,1} [88].

La figure 4.12 représente les caractéristiques J-V de la cellule solaire GaAs /GaAsP pour 25 couches de BQs insérées et pour des concentrations différentes du phosphore 0,1, 0,2, 0,3, 0,4 et 0,5, respectivement. Comme on peut le voir sur cette figure, l'augmentation de la concentration de phosphore entraîne une diminution du courant de court-circuit et de l'efficacité. Cette diminution est due à l'amélioration de l'énergie de bande interdite de

l'alliage GaAsP lors de la comparaison de GaAs_{0,9}P_{0,1} avec GaAs_{0,5}P_{0,5}. L'augmentation de la contrainte de notre structure a également un effet sur la diminution du courant de court-circuit et du rendement comme nous pouvons le voir sur la figure 4.13. Une diminution relative de 43.50% du courant de court-circuit et de 59.58% de l'efficacité est obtenue, en comparant GaAs/GaAs_{0,9}P_{0,1} avec GaAs/GaAs_{0,5}P_{0,5}.

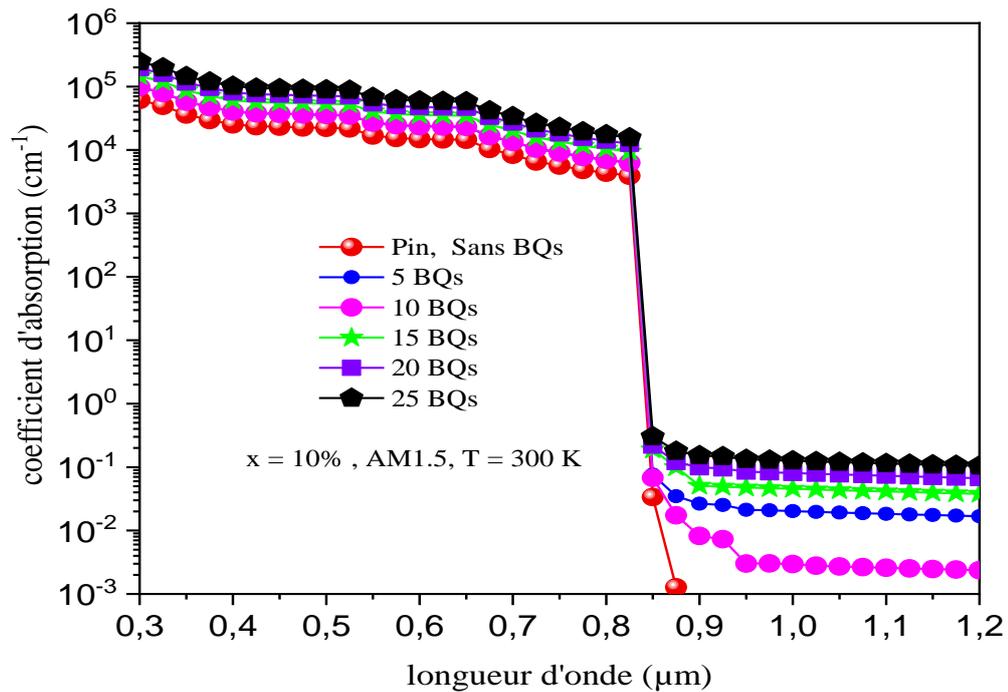


Figure 4.11 : Coefficient d'absorption de la cellule solaire sans et avec un nombre variable de couches de BQs GaAs/GaAs_{0,9}P_{0,1} [88].

La variation du rendement en fonction de l'énergie du gap et le nombre de BQs insérés est montrée sur la figure 4.14, nous pouvons voir que l'efficacité augmente rapidement lorsque le nombre de BQs augmente de 5 à 25 et diminue considérablement lorsque l'énergie de bande interdite augmente. Par exemple avec une énergie de bande interdite de 1.48 eV ($x = 0.1$) et pour 25 BQs insérés, nous avons un rendement de 21.70%, par contre, lorsque l'énergie de gap augmente à une valeur de 1.78 eV ($x = 0.5$), nous obtenons un rendement de 11.90%, ce qui signifie une diminution relative d'environ 45.30% pour un $\Delta E_g = 0.3$ eV. Nous pouvons expliquer cette diminution de l'efficacité par l'amélioration de la contrainte lorsque la concentration de phosphore augmente de 0.1 à 0.5, ce qui signifie qu'un grand désaccord de maille est obtenu pour la plus grande valeur de concentration ($\Delta = 1.43\%$).

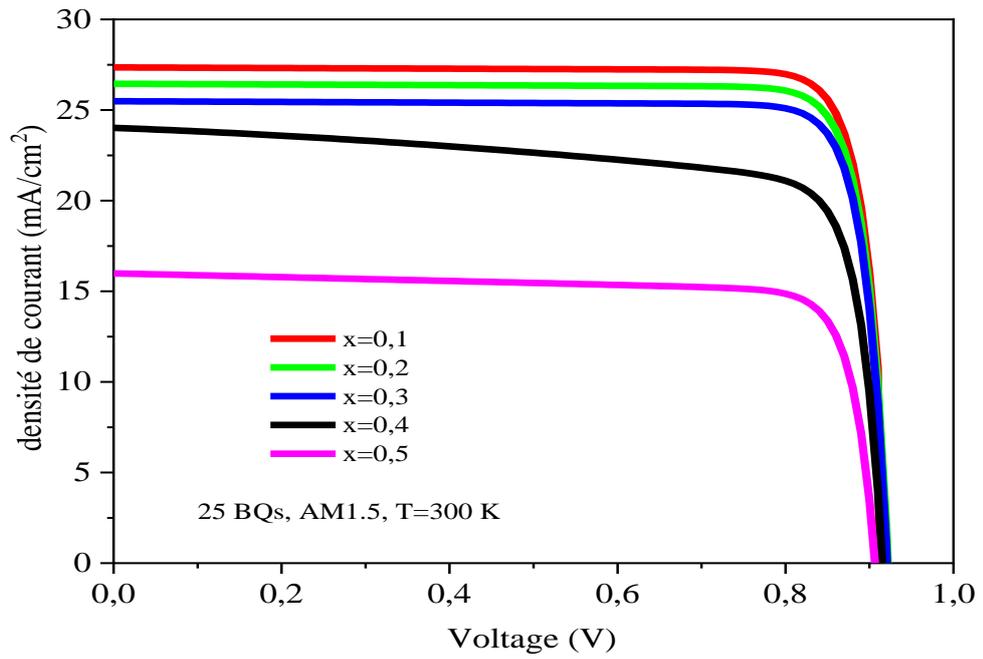


Figure 4.12 : Caractéristique J-V de la cellule solaire a 25 couches de BQs GaAs/GaAs_{1-x}P_x et pour différent concentration de Phosphore [88].

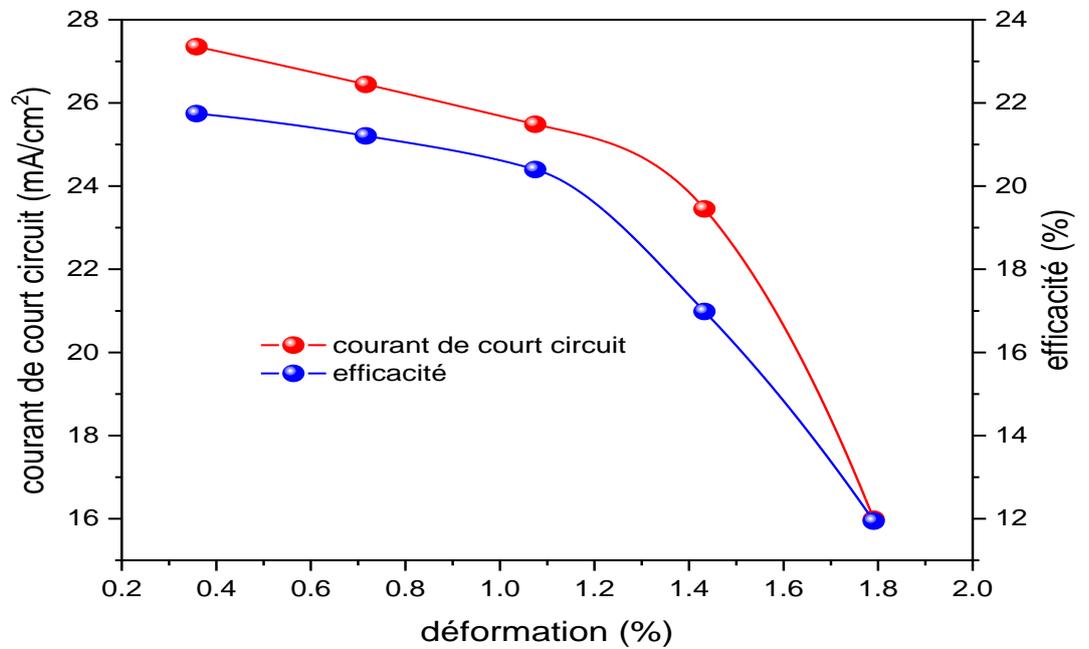


Figure 4.13 : Variation du rendement et du courant de court-circuit en fonction de la contrainte. [88].

La figure 4.15 montre la caractéristique J-V de notre structure simulé pour 25 couches de BQs de GaAs/GaAs_{0.9}P_{0.1} et la cellule solaire à BQs de In_{0.47}Ga_{0.53}As/GaAs_{0.86}P_{0.14} [75], la cellule solaire à BQs de In_{0.167}Ga_{0.833}As / GaAs [85], et la cellule GaAs de référence dans l'autre part [84]. Il a été noté que la densité de courant de notre structure simulée est plus grand que celle des deux structures mesurées et la cellule GaAs de référence ; comme on peut le voir sur cette figure, notre structure a le courant le plus élevé de 27.35 mA/cm² par rapport à la cellule de référence GaAs et les deux structures mesurées qui ont un courant de 14.86 mA/cm², 17.7 mA/cm² et 18.2 mA/cm², respectivement. Alors que la tension en circuit ouvert de notre structure est de 0.91 V, ce qui est légèrement supérieur à 0.88 V et 0.83 V obtenus pour la cellule de référence et la cellule solaire a BQs de In_{0.47}Ga_{0.53}As/GaAs_{0.86}P_{0.14}, respectivement, OÙ la différence de la tension en circuit ouvert de notre structure et In_{0.47}Ga_{0.53}As/GaAs_{0.86}P_{0.14} est de $\Delta J_{sc} = 0.22 \text{ mA} / \text{cm}^2$. Cette augmentation est due à la valeur élevé de la contrainte pour les deux structure mesurées (6.49% et 6%, respectivement), par rapport à la légère contrainte (0.3%) dans notre structure (le photocourant décroît rapidement pour de grande valeur des contraintes en tension [90]).

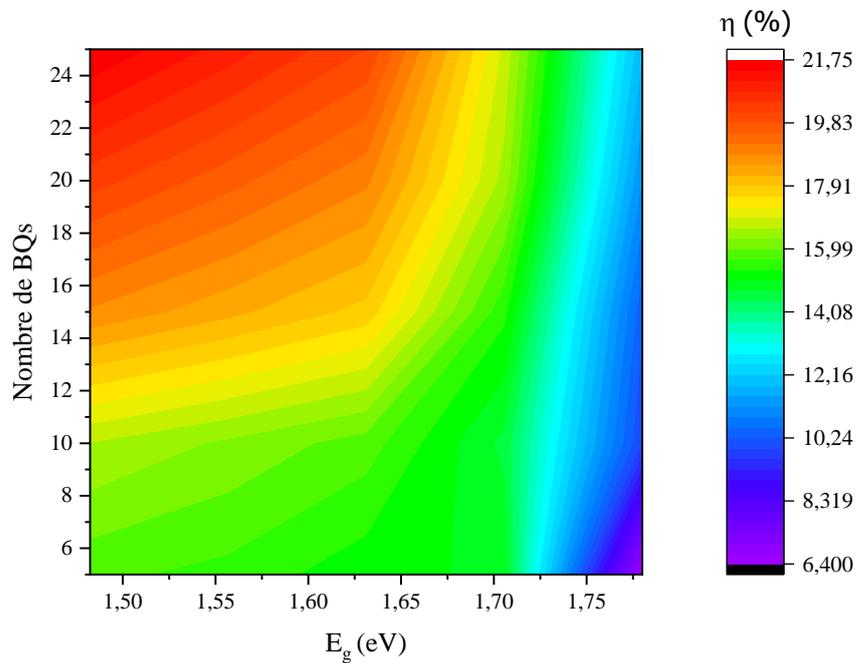


Figure 4.14 : La variation du rendement en fonction de l'énergie de gap et le nombre de BQs insérés. [88].

De plus, l'augmentation de la densité de courant est liée à l'extension du bord d'absorption, qui sera expliquée dans la section suivante.

La figure 4.16 montre la comparaison EQE entre notre structure simulé pour 25 couches de BQs de GaAs/GaAs_{0.9}P_{0.1} et la cellule solaire à BQs de In_{0.47}Ga_{0.53}As/GaAs_{0.86}P_{0.14} [75], la cellule solaire à BQs de In_{0.167}Ga_{0.833}As / GaAs [84] d'une part, et la cellule GaAs de référence d'autre part [84]. On voit bien que l'EQE mesuré de In_{0.167}Ga_{0.833}As / GaAs et de la cellule GaAs de référence prend une valeur élevée par rapport à l'EQE de notre structure dans la bande des longueurs d'onde 750-880 nm. Au-delà, notre structure présente l'EQE le plus élevée dans la gamme de longueurs d'onde 880-12000 nm, vu que la légère contrainte en tension de notre structure par rapport aux deux structures mesurées [86]. Sinon, l'EQE de notre structure prend une valeur élevée par rapport à l'EQE de la cellule solaire à BQs d'In_{0.47}Ga_{0.53}As/GaAs_{0.86}P_{0.14} mesuré dans toute la gamme de longueur d'onde. D'autre part, l'EQE mesuré tend vers zéro autour de la longueur d'onde de 1000 nm, tandis que l'EQE de notre simulation présente des valeurs non négligées d'environ 25.85%. Cependant, en raison de l'extension du bord d'absorption, la densité de courant de court-circuit (Jsc) de notre structure était plus grande que celle des structures mesurées, comme nous l'avons décrit ci-dessus.

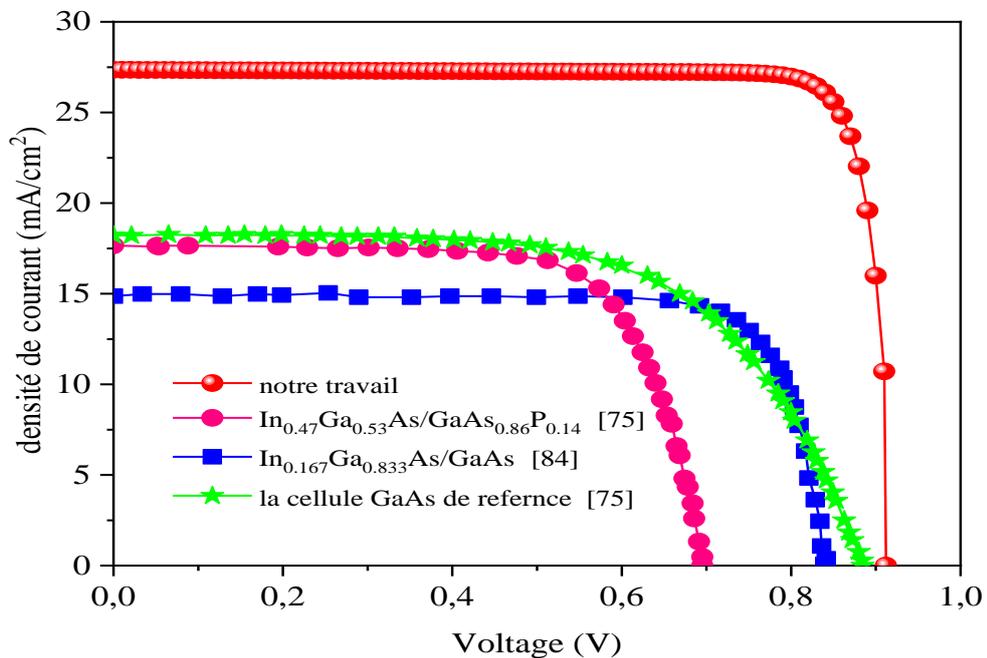


Figure 4.15 : Comparaison du Caractéristique J-V de la cellule a 25 couches de BQs GaAs/GaAs_{0.9}P_{0.1} et de la cellule solaire à BQs de In_{0.47}Ga_{0.53}As/GaAs_{0.86}P_{0.14} [75], la cellule solaire à BQs de In_{0.167}Ga_{0.833}As / GaAs [84], ainsi que la cellule GaAs de référence.

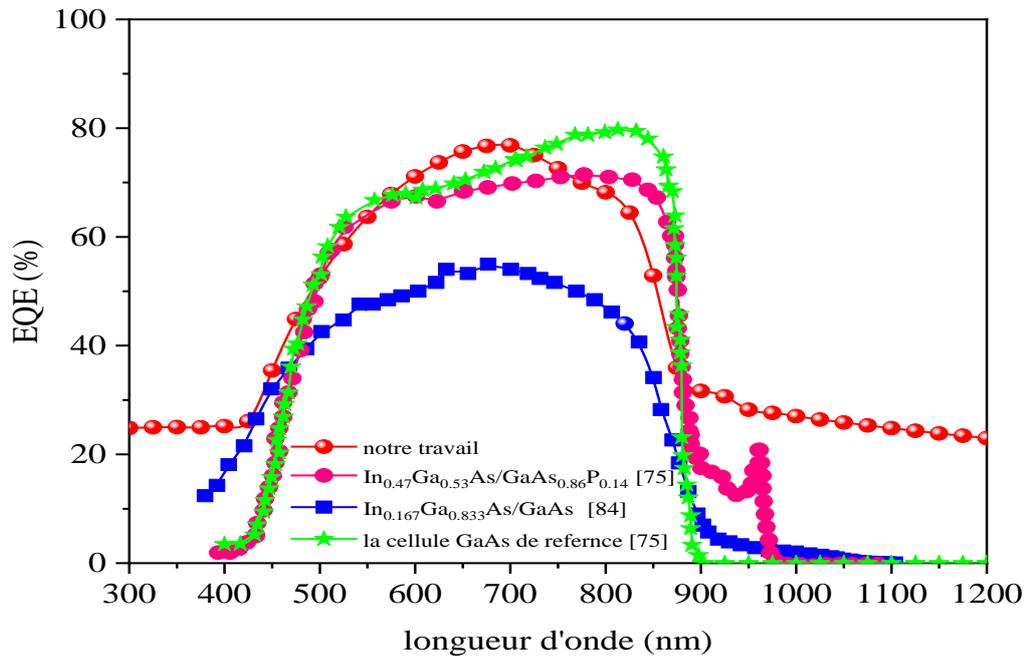


Figure 4.16 : Comparaison du EQE de la cellule solaire à 25 couches de BQs GaAs/GaAs_{0.9}P_{0.1} et de la cellule solaire a BQs de In_{0.47}Ga_{0.53}As/GaAs_{0.86}P_{0.14} [75], la cellule solaire à BQs de In_{0.167}Ga_{0.833}As / GaAs [84], ainsi que la cellule GaAs de référence.

La figure 4.17 illustre la variation du rendement en fonction de la température et du nombre de BQs. On note que, d'une part, l'efficacité augmente lorsque le nombre de BQs augmente, d'autre part, il est évident que l'efficacité diminue lorsque la température augmente. Par exemple, pour 25 couches de GaAs/GaAs_{0.9}P_{0.1} insérées dans la région intrinsèque et pour une température de 273 K nous avons un V_{oc} de 0.96 V et lorsque la température augmente à une valeur de 350 K, le V_{oc} diminue jusqu'à une valeur d'environ 0.81 V. En conséquence, le rendement de conversion diminue de 23.50% à 18.70%. On peut expliquer cette diminution par la réduction de la bande interdite d'une cellule solaire, ce qui a un effet sur la diminution de la tension en circuit ouvert [91, 92].

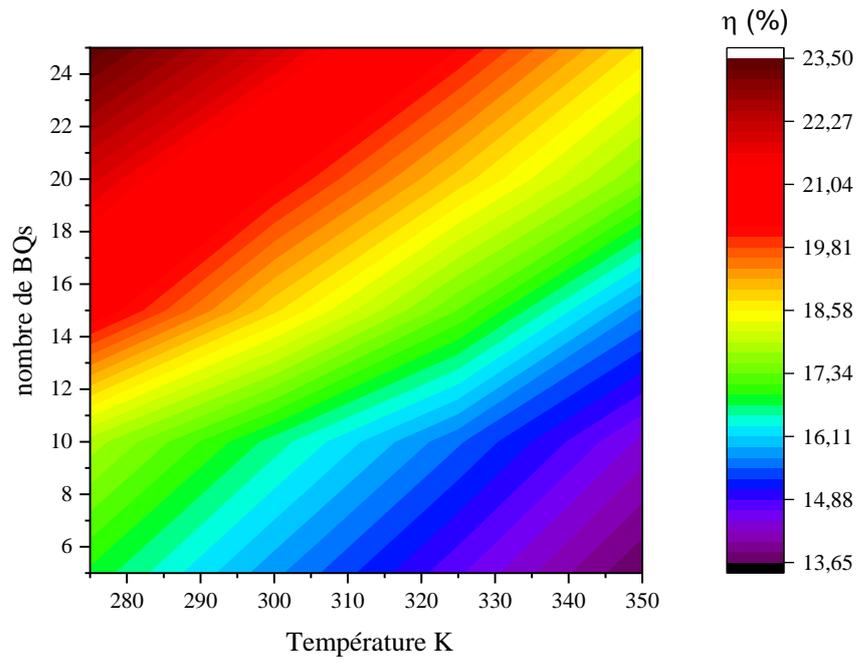


Figure 4.17 : Variation du rendement en fonction de la température et du nombre de BQs [88]

Le tableau 4.2 affiche tous les paramètres caractéristiques de la cellule solaire obtenus dans cette simulation en fonction de la température et du nombre de BQs.

Tableau 4.2 : Paramètres caractéristiques en fonction de la température et du nombre de BQs [88].

Temp (K)	5 BQ				10 BQ				15 BQ				20 BQ				25 BQ			
	Jsc mA/cm ²	Voc (V)	FF (%)	η (%)	Jsc mA/cm ²	Voc (V)	FF (%)	η (%)	Jsc mA/cm ²	Voc (V)	FF (%)	η (%)	Jsc mA/cm ²	Voc (V)	FF (%)	η (%)	Jsc mA/cm ²	Voc (V)	FF (%)	η (%)
273	20,24	0,957	87,14	16,88	21,32	0,958	87,51	17,87	24,16	0,960	88,32	20,49	25,71	0,961	88,76	21,94	27,37	0,963	89,05	23,46
300	20,22	0,906	85,97	15,76	21,30	0,907	86,06	16,63	24,14	0,902	86,44	18,83	25,69	0,911	86,77	20,30	27,35	0,912	87,16	22
325	20,21	0,857	84,89	14,71	21,29	0,858	84,98	15,53	24,12	0,840	85,57	17,33	25,67	0,862	85,34	18,90	27,34	0,864	85,65	20,23
350	20,19	0,808	83,68	13,65	21,27	0,809	83,77	14,42	24,10	0,773	84,09	15,67	25,66	0,814	84,11	17,56	27,32	0,816	84,12	18,74

4.2.2 Cellule solaire à BQs d'InP/GaAsP

Avec une croissance continue de l'efficacité de conversion d'énergie, les cellules solaires à BQs sont actuellement en hausse. Ici, nous continuons à développer ce type de cellule pour obtenir des cellules solaires à BQs à haut rendement, en modélisant les performances. Une nouvelle structure à BQs III-V croit sur une barrière différente de GaAs qui est GaAsP qui a été modélisé et simulé dans cette partie de travail. Pour cela, la cellule solaire a BQs de InP / GaAsP a examiné et optimisé ses caractéristiques structurales afin de démontrer l'effet du nombre de BQs sur les caractéristiques clés de la cellule solaire : courant-tension J-V, puissance-tension P-V et efficacité quantique externe EQE.

La figure 4.18 montre le schéma de la cellule solaire à BQs étudiée avec trois couches de BQs d'InP/GaAsP insérés dans la région intrinsèque et placés entre la couche de GaAs de type P en haut avec une concentration de dopants de $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ et la couche de GaAs de type N en bas avec une concentration de dopants de $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$.

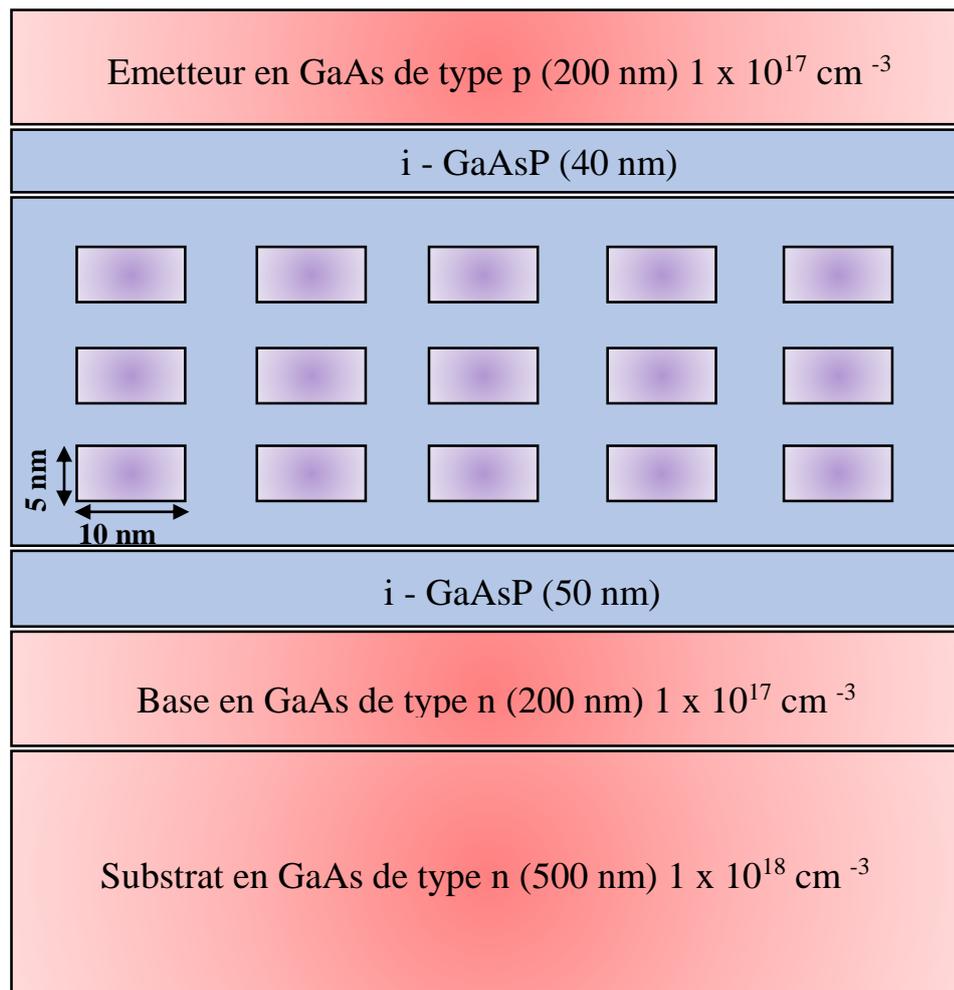


Figure 4.18 : Structure de la cellule a BQ de InP /GaAsP [93].

4.2.2.1 Résultat et discussion

La figure 4.19 montre l'EQE d'une cellule solaire a BQs d' InP / GaAs_{1-x}P_x pour différentes concentration de phosphore et pour 5 couches de BQs d'InP / GaAs_{1-x}P_x est insérée dans la région intrinsèque d'une jonction P (GaAs) -I (GaAsP) -N (GaAs). Contrairement à l'EQE de la cellule solaire GaAs standard, qui chute à partir de 873 nm ($E_g = 1,42$ eV), la cellule solaire a BQs présente une réponse spectrale à longueur d'onde étendue en raison de l'absorption de photons de faible puissance par BQs. Cela signifie que les photons de cette gamme sont absorbés et contribuent à de meilleures performances des cellules solaires. En revanche, il est clair que l'EQE de notre structure avec une concentration de phosphore égale à 10% est légèrement plus grande par rapport à notre structure avec l'autre concentration de phosphore. Ce qui signifie que cette concentration ($x = 10\%$) est adéquate pour notre structure. De plus, cette amélioration dans l'EQE engendre une amélioration dans le coefficient d'absorption, qui se traduit par des valeurs élevées des coefficients d'absorption le long de l'intervalle de longueurs d'onde par rapport à la cellule solaire p-i-n lorsqu'un plus grand nombre de BQs d'InP/GaAs_{0,9}P_{0,1} sont insérés comme montre la figure 4.20.

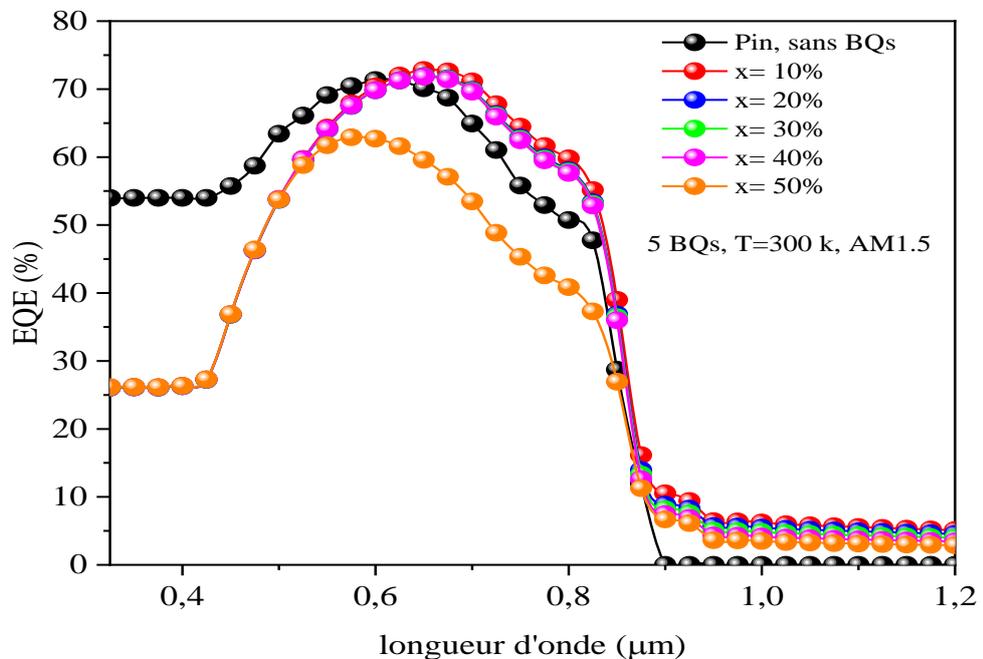


Figure 4.19 : EQE de la cellule solaire sans et avec 5 couches de BQs InP/GaAs_{1-x}P_x pour différent concentration de Phosphor [93].

La figure 4.21 représente la caractéristique courant-tension J-V à la fois d'une cellule solaire GaAs p-i-n et d'une cellule solaire à 5 couches de BQs d'InP / GaAs_{1-x}P_x pour des concentrations variables de phosphore : 10, 20, 30, 40 et 50% respectivement. Le tableau 4.3 résume toutes les caractéristiques des cellules solaires à 5 couches de BQs de InP / GaAs_{1-x}P_x, avec différentes concentrations de phosphore (le courant de court-circuit : J_{sc} , la tension en circuit ouvert : V_{oc} , le facteur de Forme : FF et le rendement : η). Comme on peut le voir, le courant de court-circuit diminue et la tension en circuit ouvert reste approximativement la même lorsque la concentration de phosphore augmente. Cette diminution de la densité de courant est due à une augmentation de la contrainte. Cela a conduit à une réduction de l'efficacité de conversion de 16,86 % à 12,20 %.

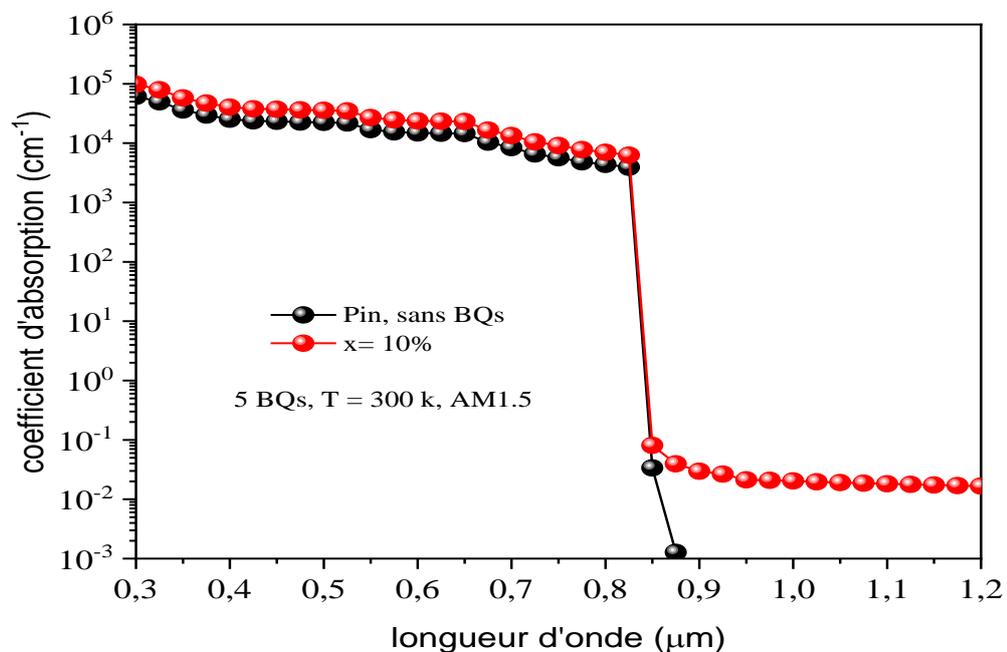


Figure 4.20 : Coefficient d'absorption de la cellule solaire sans et avec 5 couches de BQs InP/GaAs_{0,9}P_{0,1} [93].

La figure 4.22 représente la caractéristique courant-tension J-V à la fois d'une cellule solaire GaAs p-i-n et a BQs d'InP / GaAsP pour un nombre variable de couches de BQs insérées : 5, 10, 15, 20 et 25 respectivement, en utilisant la valeur optimale de la concentration de phosphore obtenue $x = 10\%$. Dans ces simulations, lorsque plus de BQs sont insérées, le courant du court-circuit augmente et la tension reste presque la même. Cela augmente l'efficacité de conversion de la cellule solaire à BQs par rapport à la cellule solaire

GaA p-i-n de 75,16%. Nous constatons une baisse soudaine de l'efficacité au-delà de ce nombre. C'est le nombre de couches BQs pour lesquelles la saturation est obtenue. L'augmentation du courant de court-circuit a également augmenté la puissance libérée par cette structure (figure 4.18). Le tableau 4.4 montre tous les paramètres caractéristiques atteints pour cette simulation.

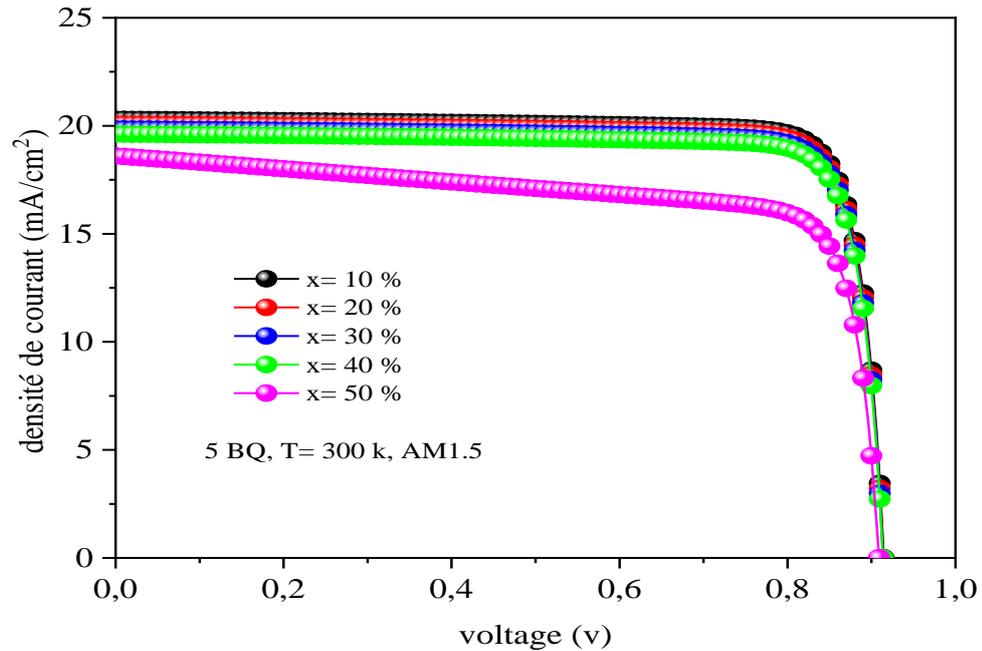


Figure 4.21 : J-V de la cellule solaire avec 5 couches de BQs InP/GaAs_{1-x}P_x pour différente concentration de Phosphore [93].

Tableau 4.3 : Caractéristiques de la cellule solaire à BQs InP/GaAs_{1-x}P_x pour un nombre variable de couches.

Concentration de Phosphore (%)	J_{cc} (mA/cm ²)	V_{co} (V)	FF (%)	η (%)
10	21.42	0.916	85.91	16.86
20	20.98	0.915	85.86	16.50
30	20.53	0.914	85.81	16.12
40	19.90	0.914	85.50	15.56
50	16.03	0.908	83.84	12.20

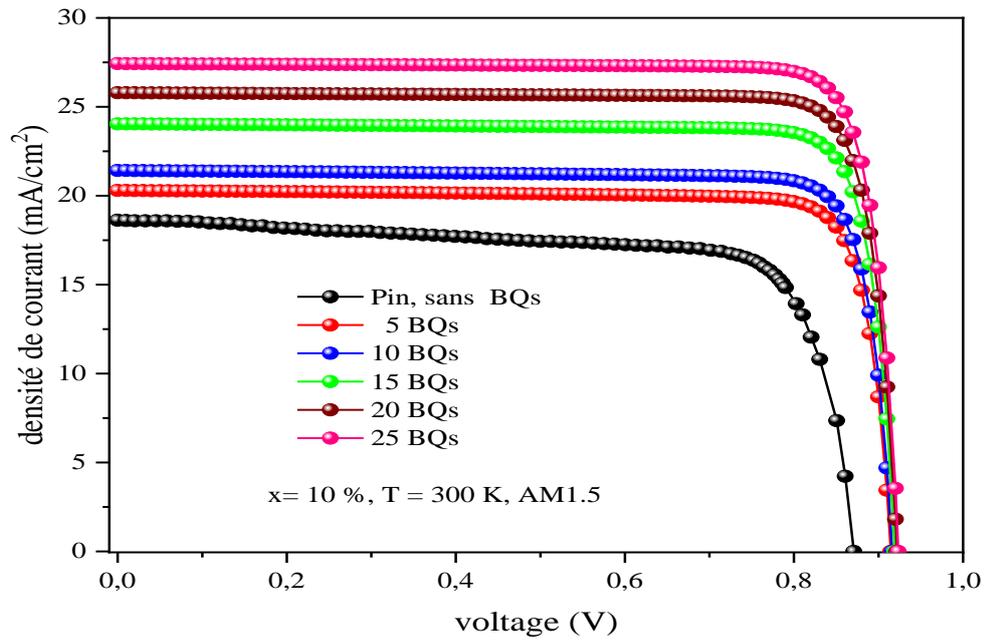


Figure 4.22 : Caractéristique J-V de la cellule solaire sans et avec un nombre variable de couches de BQs InP/GaAs_{0.9}P_{0.1} [93].

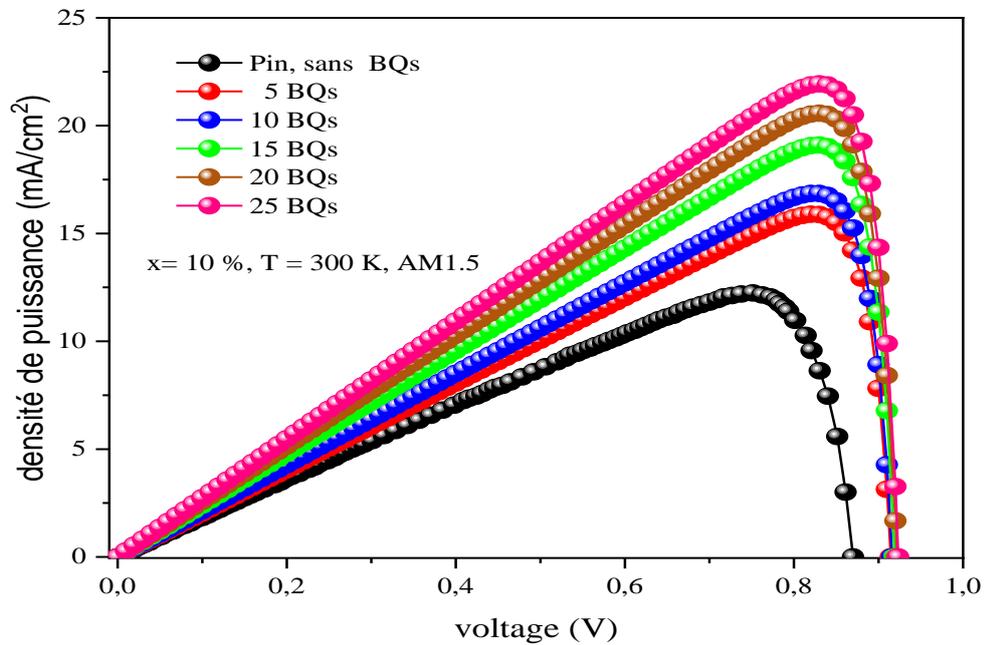


Figure 4.23 : Caractéristique P-V de la cellule solaire sans et avec un nombre variable de couches de BQs InP/GaAs_{0.9}P_{0.1} [93].

Tableau 4.4 : Paramètres caractéristiques d'une cellule solaire p-i-n et à BQs
InP/GaAs_{0,9}P_{0,1} pour un nombre variable de couches.

Nombre de couches de BQs	J_{cc} (mA/cm ²)	V_{co} (V)	FF (%)	η (%)
0	19.35	0.87	74.37	12.52
5	20.22	0.906	85.67	15.76
10	21.30	0.907	86.06	16.63
15	24.14	0.902	86.44	18.83
20	25.79	0.9217	86.55	20.58
25	27.43	0.9234	86.62	21.93

4.3 Comparaison entre les différentes cellules solaires nanostructures quantiques étudiés

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

4.3.1 Pour les cellules solaires à base de GaAs

La comparaison entre la cellule solaire à BQs GaAsBi/GaAs de la section 3.3.1 et la cellule solaire à BQs InGaNAs/GaAs de la section 3.3.2 nous a permis de sélectionner la première structure à BQs GaAsBi/GaAs comme la meilleure structure tout simplement parce qu'elle donne un meilleur rendement de conversion de l'ordre de 17,86 % par rapport à 15.78 % obtenu par la structure à BQs InGaNAs/GaAs avec 20 couches de BQs.

4.3.2 Pour les cellules solaires à base de GaAsP

La comparaison faite entre l'étude de la partie 4.3.1 sur la cellule solaire à BQs GaAs/GaAsP et celle faite sur la même structure mais avec un autre matériau barrière qui est le InP dans la partie 4.3.2 nous avons montré l'avantage d'utiliser GaAs comme un matériau de BQs par rapport au InP. En plus, cette comparaison affirme l'intérêt de l'utilisation de GaAsP comme matériau barrière pour améliorer les performances des cellules solaires conventionnelles.

4.4 Conclusion :

Dans ce chapitre, nous nous sommes intéressés à l'étude de l'effet de remplacement du le matériau barrière conventionnel qui est le GaAs, par un autre matériau qui est le

GaAsP. Pour cela deux structures à BQs sont étudiées et optimisées, ou dans la première structure nous avons utilisé le GaAs comme matériau de BQs dans une matrice de GaAsP, et pour la deuxième nous avons remplacé le GaAs par le InP. Nous avons vu que l'utilisation du GaAsP comme matériau barrière est un très bon choix pour former des cellules solaires à nanostructures quantiques. D'autre part nous avons trouvé que le GaAs et InP sont des excellents matériaux binaires BQ à employer sur une matrice de GaAsP avec un rendement de conversion de 22 % pour les BQs de GaAs, et avec une petite différence par rapport à la cellule solaire à BQs de InP 21.93%. A la fin de ce chapitre une comparaison entre nos structures a été faite afin de sélectionner les meilleures entre eux en termes de rendement.

CONCLUSION GENERALE

La cellule solaire GaAs est une cellule solaire typique qui a le potentiel d'atteindre un rendement de conversion élevé. Avec l'aide des boîtes quantique insérée, nous avons une efficacité de conversion très élevée dans le calcul théorique, ce qui en fait l'une des recherches les plus actives dans le domaine des cellules solaires de troisième génération.

Dans ce travail de thèse, nous avons montré l'avantage de l'insertion des boîtes quantiques (BQs) dans les cellules solaires conventionnelles. Ce travail a permis d'étudier et d'optimiser plusieurs structures de cellules solaires à base de nouveaux matériaux BQs en se basant sur la modélisation et la simulation d'une cellule solaire p-i-n comme structure du modèle, et les BQs sont insérées à l'intérieur de la région intrinsèque. Cette structure provient d'une véritable cellule solaire fabriquée, qui a des données de mesure à comparer. L'influence de différentes grandeurs physiques et géométriques comme le nombre de couches et périodes BQs, la température, la fraction molaire de matériaux ternaires et quaternaires utilisés comme de BQs sur les caractéristiques électriques et optiques a été examiné. Après avoir analysé et discuté des résultats de simulations, les conclusions spécifiques aux grandes étapes de ces travaux de thèse sont décrites ici.

Comme premier pas dans notre simulation, des structures de cellules solaires à nouveaux matériaux III-V de BQs ternaire et quaternaires sur une barrière de GaAs comme GaAsBi/GaAs, InGaNaNs/GaAs ont été étudié, optimisé et comparé avec des résultats expérimentaux disponibles pour la validation. Pour chaque étude, la caractéristique J-V et P-V, la courbe de l'efficacité quantique EQE, la courbe du coefficient d'absorption.

Deuxièmement, et afin d'améliorer la cellule solaire conventionnelle, l'étude de l'effet de remplacement du matériau barrière qui est le GaAs par un autre matériau ternaire qui est le GaAsP a été examiner, pour cela deux structures ont été étudié, la première est les BQs de GaAs sur une barrière de GaAsP, et la deuxième est les BQs de InP sur une barrière de GaAsP. Comme est le cas des structures précédentes, la caractéristique J-V et P-V, la courbe de l'efficacité quantique EQE, la courbe du coefficient d'absorption.

Enfin, des comparaisons entre les différentes structures étudiées montrent que l'utilisation de GaAsP comme matériau barrière est un très bon choix pour former les cellules solaires à BQs, avec un rendement de conversion de 22% obtenu, tout en utilisant des BQs de GaAs. Nous avons vu aussi que le GaAsBi est un bon matériau à employer comme BQs et qui donne un meilleur rendement de conversion de 21,07 %, si on le croit sur substrat GaAs. En outre, l'utilisation d'InGaAs avec une faible concentration d'Indium et d'Azote (10 et 1% respectivement) comme un matériau BQs donne des améliorations non négligeables en termes de rendement de conversion, et nous avons vu qu'avec 25 couches de BQs d' $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}_{0.01}\text{As}_{0.99}$ / GaAs, nous avons obtenu un rendement de 16.14%, et c'est le nombre de couches ou bien périodes maximales à ne pas dépasser pour avoir un rendement de conversion optimal.

Les perspectives de ce travail sont en effet le développement de nouvelles structures de cellule solaires avec matériaux nanostructures plus performante plus précisément les matériaux quaternaires et quinaires pour atteindre des rendements de conversion élevés d'une part, et d'autre part l'intégration de ces structures dans les cellules de multi-jonction dans le but d'atteindre de rendement de conversion plus élevés.

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

1. Shaozhen Xiong, Meifang Zhu, "Basic Knowledge and Application of Solar Cell, first edition," Beijing: Science Press, 2009:4-42
2. <https://www.nrel.gov/> (cite official The National Renewable Energy Laboratory)
3. A. Luque et A. Marti. Physical Review Letters 78(26), 5014–17 (1997).
4. A. W. Walker, O. Theriault, J. F. Wheeldon, et K. Hinzer. The Effects of Absorption and Recombination on Quantum Dot Multijunction Solar Cell Efficiency IEEE J. Quantum Electron. 3(3), 1118–1124 (2013).
5. Okada, Y., Ekins-Daukes, N. J., Kita, T., Tamaki, R., Yoshida, M., Pusch, A., Hess O., Phillips, C. C., Farrell, D. J., Yoshida, K., Ahsan, N., Shoji, Y., Sogabe, T., and Guillemoles, J.F., "Intermediate band solar cells: Recent progress and future directions", Applied Physics Reviews, 2, p 021302, 2015.
6. Marti, A., Cuadra, L., and Luque, A., "QUANTUM DOT INTERMEDIATE BAND SOLAR CELL", IEEE 28th International Conference on Photovoltaic Specialists Conference, Sep 2000.
7. J. Nelson, The Physics of Solar Cells. Imperial College Press, 2003.
8. B. E. Hardin, H. J. Snaith, and M. D. McGehee, "The renaissance of dye-sensitized solar cells," Nat. Photonics, vol. 6, no. 3, pp. 162–169, Feb. 2012.
9. M. A. Green, K. Emery, Y. Hishikawa, and W. Warta, "Solar cell efficiency tables (version 36)," Prog. Photovoltaics Res. Appl., vol. 18, no. 5, pp. 346–352, Jun. 2010.
10. M. A. Green, K. Emery, Y. Hishikawa, and W. Warta, "Solar cell efficiency tables (version 36)," Prog. Photovoltaics Res. Appl., vol. 18, no. 5, pp. 346–352, Jun. 2010.
11. W. Guter, J. Schone, S. P. Philipps, M. Steiner, G. Siefer, A. Wekkeli, E. Welser, E. Oliva, A. W. Bett, and F. Dimroth, "Current-matched triple-junction solar cell reaching 41.1% conversion efficiency under concentrated sunlight," Appl. Phys. Lett., vol. 94, no. 22, p. 223504, 2009.
12. R. T. Ross and A. J. Nozik, "Efficiency of hot-carrier solar energy converters," J. Appl. Phys., vol. 53, no. 5, p. 3813, 1982.]
13. A. Luque and A. Marti, "Increasing the Efficiency of Ideal Solar Cells by Photon Induced Transitions at Intermediate Levels," Phys. Rev. Lett., vol. 78, no. 26, pp. 5014–5017, Jun. 1997.

14. I. Fraunhofer, "World Record: 41.1 per cent efficiency reached for multi-junction solar cells," Press release, 2009.
15. Petibon Stéphane. Nouvelles architectures distribuées de gestion et de conversion de l'énergie pour les applications photovoltaïques. Thèse de Doctorat, Université de Toulouse, (2009).
16. S. M. Hubbard, C. D. Cress, C. G. Bailey, R. P. Raffaele, S. G. Bailey, and D. M. Wilt, "Effect of strain compensation on quantum dot enhanced GaAs solar cells," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 92, no. 12, p. 123512, 2008.
17. A. Luque and S. Hegedus, *Handbook of Photovoltaic Science and Engineering*. John Wiley and Sons, 2011].
18. Morales, R. A. L., "Performance of advanced triple-junction (ATJ) solar cells", Thèse de Doctorat, Pontificia Universidad Catolica de Chile, 2005.
19. R. Oshima, A. Takata, and Y. Okada, "Strain-compensated InAs/GaNAs quantum dots for use in high-efficiency solar cells," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 93, no. 8, p. 083111, 2008.
20. Markvart, T. et Castaner, L., Ch. 1 of "Solar cell: Material, Manufacture and Operation", First Edition, pp 6-15, 2005
21. H. Lu, S. Mokkalapati, and L. Fu, "Plasmonic quantum dot solar cells for enhanced infrared response," *Appl. Phys. ...*, vol. 103505, 2012.
22. Oleksiy, N., "Simulation, fabrication et analyse de cellules photovoltaïques à contacts arrière interdigités", Thèse de Doctorat, Institut national des sciences appliquées de Lyon, 2005.
23. R. McConnell and V. Fthenakis, "Concentrated Photovoltaics," in *Third Generation Photovoltaics*, V. Fthenakis, Ed. InTech, 2012.
24. G. F. Brown and J. Wu, "Third generation photovoltaics," *Laser Photonics Rev.*, vol. 3, no. 4, pp. 394–405, Jul. 2009.
25. R. P. Raffaele, S. Sinharoy, J. Andersen, D. M. Wilt, and S. G. Bailey, "Multi-junction solar cell spectral tuning with quantum dots," in *Photovoltaic Energy Conversion, Conference Record of the 2006 IEEE 4th World Conference on*, 2006, vol. 1, pp. 162–166.
26. W. Shockley and H. J. Queisser, "Detailed Balance Limit of Efficiency of p-n Junction Solar Cells," *J. Appl. Phys.*, vol. 32, no. 3, p. 510, 1961.
27. A. Luque and A. Marti, "The intermediate band solar cell: progress toward the realization of an attractive concept." *Adv. Mater.*, vol. 22, no. 2, pp. 160–174, Jan. 2010.
28. A. Marti, E. Antolin, E. Canovas, N. Lopez, P. Linares, A. Luque, C. R. Stanley, and C. D. Farmer, "Elements of the design and analysis of quantum-dot intermediate band solar cells," *Thin Solid Films*, vol. 516, no. 20, pp. 6716–6722, Aug. 2008.
29. P. Palacios, J. Fernandez, K. Sanchez, J. Conesa, and P. Wahnnon, "Firstprinciples investigation of isolated band formation in half-metallic $Ti(x)Ga(1-x)P$ ($x=0.3125-0.25$)," *Phys. Rev. B*, vol. 73, no. 8, pp. 1–8, Feb. 2006.

30. P. Palacios, K. Sanchez, J. C. Conesa, and P. Wahnou, “First principles calculation of isolated intermediate bands formation in a transition metal-doped chalcopyrite-type semiconductor,” *Phys. status solidi*, vol.203, no. 6, pp. 1395–1401, May 2006.
31. C. Tablero, “Optoelectronic properties of Cr-substituted II–VI semiconductors,” *Comput. Mater. Sci.*, vol. 37, no. 4, pp. 483–490, Oct. 2006.
32. Bimberg, D., Grundmann, M., et Ledentsov, N.N, “Quantum Dot Heterostructures”, John Wiley and Sons, 1999.
33. Arakawa, Y. et Sakaki, H., “Multidimensional quantum well laser and temperature dependence of its threshold current”, *Applied Physics Letters*, 40(11), p 939–41, 1982.
34. Zribi, J, “Croissance et caractérisation des boîtes quantiques InAs/GaAs pour des applications photovoltaïques”, Thèse de Doctorat en physique, Université de Sherbrooke, 2014.
35. Dupuy, E., “Croissance et spectroscopie de boîtes quantiques diluées d’InAs/InP(001) pour des applications nanophotoniques à 1.55 μm ”, Thèse de Doctorat, Université de Sherbrooke, 2009.
36. Balaguru, R. J. B., Jeyaprakash, B. G., “Quantum Wells, Quantum Wires, Quantum Dots, Quantum Limit of Conductance, Quantum Capacitance & Quantum HALL Effect”, NPTEL, Electrical & Electronics Engineering, Semiconductor Nanodevices.
37. Harrison, P., “Quantum Wells, Wires and Dots Second Edition: Theoretical and Computational Physics of Semiconductor Nanostructures”, John Wiley & Sons, second edition, 2005.
38. Fafard, S., Leonard, D., Merz, J.L., et Petroff, P.M., “Selective excitation of the photoluminescence and the energy levels of ultra small InGaAs/GaAs quantum dots”. *Applied Physics Letters*, vol 65, pp 1388–1390, 1994.
39. Leon, R., Petroff, P.M., Leonard, D., et Fafard, S., “Spatially-resolved visible luminescence of self-assembled”, *Science*, vol 267 (5206), pp.1966–8, 1995.
40. Baira, M., “Propriétés optiques et modélisation des structures à base de boîtes quantiques pour l’émission à 1.3 μm ”, Thèse de Doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 2009.
41. Stranski, I. N. et Krastanow, L., “Abhandlungen der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Klasse IIb”, Akademie der Wissenschaften Wien, 1938.
42. Goldstein, L., Glas, F., Marzin, J.Y., Charasse, M.N., et Le Roux, G. “Growth by molecular beam epitaxy and characterization of InAs/GaAs strained-layer superlattices”, *Applied Physics Letters*, vol 47(10), pp 1099–1101, 1985.
43. Oura, K., Lifshits, V.G., Saranin, A.A., Zotov, A.V., Katayama, M., “Surface Science: An Introduction”, Berlin: Springer, 2003.

44. Pimpinelli, A., Villain, J., “Physics of Crystal Growth”, Cambridge: Cambridge University Press, 1998.
45. Al-Jassim, M., Norman, A., and Hanna, M., “Intermediate Band Quantum Dot Solar Cells”, National Center for Photovoltaics, National Renewable Energy Laboratory NREL, Golden, Colorado.
46. Nasi, L., Ferrari, C., Lazzarini, L., et Clarke, G., “Role of strain on the wavy growth onset in strain-balanced InGaAs-based multiquantum wells”, *Journal of Applied Physics*, vol 92(12), pp 7678–80, 2002.
47. Aissat, A., El bey, M., Bestam, R., Vilcot, J.P., “Modeling and simulation of Al_xGa_yIn_{1-x-y}As/InP quaternary structure for photovoltaic”, *International Journal of Hydrogen Energy*, vol 39, pp 15287-15291, 2014.
48. Oshima, R., Komiyama, H., Hashimoto, T., Shigekawa, H., et Okada, Y., “Fabrication of Multi-layer Self-assembled InAs Quantum Dots for High-Efficiency Solar Cells”, *Conference Record of the 2006 IEEE 4th World Conference on Photovoltaic Energy Conversion, WCPEC-4*, vol 1, pp 158–161, 2006.
49. Alonso-Alvarez, D., Taboada, A.G., Gonzalez, Y., Ripalda, J.M., Alen, B., Gonzalez, L., Garcia J.M., Briones, F., Marti, A., Luque, A., Sanchez, A.M., et Molina, S.I., “Stress compensation by GaP monolayers for stacked InAs/GaAs quantum dots solar cells”, *Dans Conference Record of the IEEE Photovoltaic Specialists Conference*, 2008.
50. Tatebayashi, J., Nuntawong, N., Wong, P.S., Xin, Y.C., Lester, L.F., and Huffaker, D.L., “Strain compensation technique in self-assembled InAs/GaAs quantum dots for applications to photonic devices”, *Journal of Physics D: Applied Physics*, Vol 42 (7), 2009.
51. A. Y. Cho et J. R. Arthur, « Molecular beam epitaxy », *Progress in Solid State Chemistry*, vol. 10, no. 3, p. 157-191, 1975.
52. Franchi, S., Trevisi, G., Seravalli, L., and Frigeri, P., “Quantum dot nanostructures and molecular beam epitaxy”, *Progress in Crystal Growth and Characterization of Materials* vol 47, p 166, 2003.
53. Joyce, P.B., Krzyzewski, T.J., Bell, G.R., et Jones, T.S., “Surface morphology evolution during the overgrowth of large InAs–GaAs quantum dots”, *Applied Physics Letters*, vol 79(22), pp 3615–3615, 2001.
54. Saint-Girons, G., “L’épitaxie”, *Ecole Centrale de Lyon*.
55. Davis, R.F., III-V nitrides for electronic and optoelectronic applications. *Proceedings of the IEEE*, 1991. 79(5): pp. 702-712. , Mathine, D.L., The integration of III-V optoelectronics with silicon circuitry. *Selected Topics in Quantum Electronics, IEEE Journal of*, 1997. 3(3): pp. 952-959.
56. Xu, G.Y., A. Salvador, W. Kim, Z. Fan, C. Lu, H. Tang, H. Morkoç, G. Smith, M. Estes, B. Goldenberg, W. Yang, and S. Krishnankutty, High speed, low noise ultraviolet

- photodetectors based on GaN p-i-n and AlGaN(p)-GaN(i)-GaN(n) structures. *Applied Physics Letters*, 1997. 71(15): pp. 2154-2156.
57. Chau, R., S. Datta, and A. Majumdar. Opportunities and challenges of III-V nanoelectronics for future high-speed, low-power logic applications. in *Compound Semiconductor Integrated Circuit Symposium, 2005. CSIC '05. IEEE. 2005.*
 58. Yamaguchi, M., T. Takamoto, K. Araki, and N. Ekins-Daukes, Multi-junction III-V solar cells: current status and future potential. *Solar Energy*, 2005. 79(1): pp. 78-85.
 59. Dimroth, F., High-efficiency solar cells from III-V compound semiconductors. *physica status solidi (c)*, 2006. 3(3): pp. 373-379.
 60. Green, M.A., E. Dunlop, J. Hohl-Ebinger, M. Yoshita, N. Kopidakis, and X. Hao, Solar cell efficiency tables (version 57).
 61. Brown, G.F. and J. Wu, Third generation photovoltaics. *Laser & Photonics Reviews*, 2009. 3(4): pp. 394-405, Aroutiounian, V., S. Petrosyan, A. Khachatryan, and K. Touryan, Quantum dot solar cells. *Journal of Applied Physics*, 2001. 89(4): pp. 2268-2271.
 62. Luque, A. and A. Marti, Increasing the efficiency of ideal solar cells by photon induced transitions at intermediate levels. *Physical Review Letters*, 1997. 78(26): pp. 5014-5017.
 63. Yu, K. and J. Chen, Enhancing Solar Cell Efficiencies through 1-D Nanostructures. *Nanoscale Research Letters*, 2009. 4(1): pp. 1-10.
 64. Dehimi, S., “Etude de lasers à base des composés semi-conducteurs (InP, GaAs, GaP) ”, mémoire de magister, Université El Hadj Lakhdar, Batna, 2011.
 65. Davies, J.H., “The physics of low-dimensional semiconductors”, Cambridge University Press, Cambridge 1997.
 66. Silvaco Atlas User’s Manual, Device simulation software, p 1545, 2014.
 67. Vurgaftman, I., Meyer, J.R., and Ram-Mohan, L.R., “Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys”, *J. Appl. Phys.*, vol 89, p 5815, 2001.
 68. Wright, A.F., “Elastic properties of zinc-blende and wurtzite AlN, GaN, and InN”, *Journal of Applied Physics*, vol 82 (6), pp 2833–2839.38, 1997.
 69. Jenks S.E., “Selecting Semiconductor Materials for the Quantum Dot Intermediate Band Solar Cell”, Thèse de doctorat en physique, Université de Drexel, 2012.
 70. Piprek, J., “Semiconductor Optoelectronic Devices: Introduction to Physics and Simulation”, UCSB: Academic Press, p 22, 2003.
 71. Jasim, K.E., “Dye Sensitized Solar Cells-Working Principles, Challenges and Opportunities”, In: *Solar Cells-Dye-Sensitized Devices Springer Science*, Chap. 8, pp 171-204, 2011.
 72. Buyanova, I.A., Chen, W.M., and Monemar, B., “Electronic Properties of Ga(In)NAs Alloys”, *J. Nitride Semicond. Res.*, vol 6, 2, 2001.

73. Kuroiwa R., Asahi, H., Asami, K., Kim, S.J., Iwata, K., and Gonda, S., "Optical properties of GaN-rich side of GaNP and GaNAs alloys grown by gas-source molecular beam epitaxy", *Appl. Phys. Lett*, vol 73, p 2630, 1998.
74. Geisz, J.F., Friedman, D.J., "III–N–V semiconductors for solar photovoltaic applications", *Semicond. Sci. Technol.* vol 17, pp 677–769, 2002.
75. V. Popescu, G. Bester, M.C. Hanna, A.G. Norman, A. Zunger, Theoretical and experimental examination of the intermediate-band concept for strain-balanced (In,Ga)As/Ga(As,P) quantum dot solar cells, *Phys. Rev. B* 78 (2008).
76. SILVACO® (2016) ATLAS™ User's Manual. <https://dynamic.silvaco.com/dynamicweb/jsp/downloads/DownloadManualsAction.do?req=silentmanuals&nm=atlas>.
77. Abdelilah Faraji, Sara Sabri, Rachid Malek, Khalil Kassmi, Effect of structural properties of InAs/GaAs QDs on optoelectronic devices, *Materials Today: Proceedings*, Volume 45, Part 8, 2021, Pages 7329-7333.
78. Bailey, C., "Optical and mechanical characterization of InAs/GaAs quantum dot solar cells", *Thèse de doctorat*, Rochester Institute of Technology, January 2012.
79. Benyettou, F., Aissat, A., Benamar, M., Vilcot, J., "Modeling and simulation of GaSb/GaAs quantum dot for solar cell", *Energy Procedia*, vol 74:139, 2015
80. Lifei Yu, Dechun Li,* Shengzhi Zhao, Guiqiu Li, and Kejian Yang "First Principles Study on Electronic Structure and Optical Properties of Ternary GaAs:Bi Alloy" *Materials (Basel)* 2012 Dec; 5(12): 2486–2497.
81. H. Guesmi, A. Aissat, M. Safi, F. Benyettou and I. Berbezier, "Simulation and optimization of GaAs_{1-x}Bi_x/GaAs Quantum Dot for Solar Cell Applications," 2018 International Conference on Communications and Electrical Engineering (ICCEE), 2018, pp. 1-5, doi: 10.1109/CCEE.2018.8634544.
82. C. Bailey, S. Polly, R. Raffaele, And all, Open-circuit voltage improvement of InAs/ GaAs quantum dot solar cells using reduced InAs coverage, *IEEE Journal of Photovoltaics* 2 (3) (2012) 269–275.
83. H. Saha and KD. Swapan, Enhancement of Performance of Crystalline and Amorphous Silicon Solar Cells through Optical Engineering by Nanostructured Materials, Springer International Publishing. (2014) 309-314.
84. P. Lam, J. Wu, M. Tang, All, Submonolayer InGaAs/GaAs quantum dot solar cells, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* 126 (2014) 83–87
85. T. Sugaya, O. Numakami, R. Oshima, All, Ultra-high stacks of InGaAs/GaAs quantum dots for high efficiency solar cells, *Energy Environ. Sci.*, 2012, 5, 6233

86. H. Sodabanlu, S. Ma, All, Impact of strain accumulation on InGaAs/GaAsP multiplequantum-well solar cells: direct correlation between in situ strain measurement and cell performances, *Jpn. J. Appl. Phys.* 51 (10s) (2012).
87. W. Shockley, H.J. Queisser, Detailed balance limit of efficiency of p-n junction solar cells, *J. Appl. Phys.* 32 (1961) 510.
88. Guesmi, H., A. Aissat, M. Safi and I. Berbezier. "Efficiency improvement of GaAs Quantum Dot in GaAs_{1-x}P_x matrix for solar cell applications." *Microelectron. J.* 99 (2020): 104738.
89. D. Rekioua, E. Matagne, Optimization of Photovoltaic Power Systems: Modelization, Simulation and Control, *Green Energy and Technology* 2012; p 284.
90. J.M. Olson, S.R. Kurtz, A.E. Kibbler, P. Faine, A 27.3% efficient Ga_{0.5}In_{0.5}P/GaAs tandem solar cell, *Appl. Phys. Lett.* 56 (1990) 623.
91. P. Singh, Temperature dependence of I–V characteristics and performance parameters of silicon solar cell, *Sol. Energy Mater. Sol. Cell.* 92 (12) (2008) 1611–1616.
92. P. Singh, N.M. Ravindra, Temperature dependence of solar cell performance—an analysis, *Sol. Energy Mater. Sol. Cell.* 101 (2012) 36–45.
93. Guesmi, H., A. Aissat and M. Safi "Implementation of InP Quantum dots in P(GaAs)-I(GaAsP)-N(GaAs) structure for Solar Cell Applications" *DZENERGY* 2021, Hassi Messaoud, Ouargla, Algeria. ISBN: 978-1-912532-21-6.

PUBLICATIONS

1. **Guesmi, H.**, A. Aissat, M. Safi and I. Berbezier. "Efficiency improvement of GaAs Quantum Dot in GaAs_{1-x}P_x matrix for solar cell applications." *Microelectron. J.* 99 (2020): 104738.

CONFERENCES

1. Aissat A., **Guesmi H.**, Vilcot J.P. (2018) Study and Simulation of a New Structures Containing GaInAsSb/GaInSb for Photovoltaic. In: Hatti M. (eds) *Artificial Intelligence in Renewable Energetic Systems. ICAIRES 2017. Lecture Notes in Networks and Systems*, vol 35. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-319-73192-6_55
2. **H. Guesmi**, A. Aissat, M. Safi, F. Benyettou and I. Berbezier, "Simulation and optimization of GaAs_{1-x}Bi_x/GaAs Quantum Dot for Solar Cell Applications," 2018 International Conference on Communications and Electrical Engineering (ICCEE), 2018, pp. 1-5, doi: 10.1109/CCEE.2018.8634544.
3. M. Safi, A. Aissat, **H. Guesmi**, F. Benyettou and I. Barbezier, "Modeling of Si-Based Nanowires by Insertion of SiGe Quantum Wells (QWNW)," 2018 6th International Renewable and Sustainable Energy Conference (IRSEC), 2018, pp. 1-4, doi: 10.1109/IRSEC.2018.8702282.
4. **H. Guesmi**, A. Aissat, M. Safi and I. Barbezier, "Electrical Properties of Si Quantum Dot in GaAs_{1-x}P_x Matrix for Solar Cell Applications," 2019 7th International Renewable and Sustainable Energy Conference (IRSEC), 2019, pp. 1-5, doi: 10.1109/IRSEC48032.2019.9078237.
5. **Guesmi, H.**, A. Aissat and M. Safi "Implementation of InP Quantum dots in P(GaAs)-I(GaAsP)-N(GaAs) structure for Solar Cell Applications" *DZENERGY 2021*, Hassi Messaoud, Ouargla, Algeria. ISBN: 978-1-912532-21-6.