

الجزائرية الديمقراطية الشعبية
République Algérienne démocratique et populaire

وزارة التعليم العالي و البحث العلمي
Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique

جامعة سعد دحلب البلدية
Université SAAD DAHLAB de BLIDA

كلية التكنولوجيا
Faculté de Technologie

قسم الإلكترونيك
Département d'Électronique



Mémoire de Projet de Fin d'Études

présenté par

Aïda BENAMAROUCHE

pour l'obtention du diplôme de Master en Électronique spécialité Réseaux et
Télécommunication

Thème

Etude et simulation d'une structure photovoltaïque à base de semiconducteurs II-VI (CdZnTe)

Proposé par : Aissat Abdelkader

Bestam Rachid

Année Universitaire 2011-2012

Remerciements

Ce travail a été réalisé au laboratoire (LATSIS) département d'électronique faculté des sciences de l'ingénieur Université Saad Dahleb de Blida.

Tout d'abord, tout remerciement et louange à **ALLAH** Tout Puissant de m'avoir accordé la volonté, le courage, et la patience de mener à terme le présent travail.

Je tiens à remercier **Mr Aissat Abdelkader** d'avoir encadré ce travail avec compétence et disponibilité.

Je tiens à témoigner ma sincère reconnaissance et mes chaleureux remerciements à **Mr BESTAM Rachid** qui a participé à l'évolution de mon travail et à sa confection.

Je tiens à remercier Mr **El Bey Moussa** pour son aide et ses judicieux conseils.

Je remercie les membres du jury d'avoir accepté de juger le présent travail.

Mes sentiments de profonde gratitude vont à mes professeurs qui tout au long des années d'études nous ont transmis leurs savoirs sans réserve.

Je remercie également mes amis pour leurs aides et toutes les personnes qui m'ont aidée de près ou de loin à réaliser ce travail.

Dédicace

A mes chers parents

*En témoignage de mon grand amour et ma
profonde affection et pour leurs soutiens et
leurs sacrifices qu'ils n'ont cessé de consentir
pour moi et dont je serai à jamais redevable.*

A mes frères, Mes sœurs, ma famille

Mes amis...

ملخص:

هذا العمل يتناول دراسة ومحاكاة لهيكل أساسه أنصاف النواقل من نوع II-VI و هذا لتطبيق ضوئي. درسنا تأثير تركيز الزنك على مختلف معايير السبائك $CdZnTe$ النامية على ركيزة $CdTe$. في الواقع الزيادة في كثافة الزنك تزيد من الفجوة في السبيكة وهذا غير مثير للاهتمام من اجل امتصاص حد أقصى من الطيف الشمسي. من أجل تركيزات منخفضة من مادة الزنك تصبح هذه السبيكة مثيرة للاهتمام في مجال التطبيق الضوئي.

كلمات المفاتيح: أنصاف النواقل, تطبيق الضوئي, الامتصاص, الفجوة.

Résumé :

Ce travail porte sur l'étude et la simulation d'une structure à base de semi-conducteurs II-VI pour une application photovoltaïque. Nous avons étudié l'influence de la concentration de Zinc sur les différents paramètres de l'alliage $CdZnTe$ épitaxié sur substrat de $CdTe$. En effet l'augmentation de la densité de Zinc fait croître le Gap de l'alliage, ce qui n'est pas intéressant pour absorber le maximum du spectre solaire, mais pour des faibles concentrations de Zinc ce matériau ternaire devient important dans le domaine photovoltaïque.

Mots clés : semi-conducteurs, photovoltaïque, absorption, Gap.

Abstract :

This work concerns the study and the simulation of a structure containing semi-conductor II-VI for photovoltaic application. We studied the influence of the zinc concentration on the various parameters of the alloy $CdZnTe$ epitaxy on substrate of $CdTe$. Indeed the packing of zinc increases the Gap of the alloy, which is not interesting to absorb the maximum of the solar spectrum, but for low concentrations of zinc the ternary material becomes important in the photovoltaic field.

Keywords : semi-conductors, photovoltaic, absorption, Gap.

Listes des acronymes et abréviations

N_d	Densité d'atomes donneurs
N_a	Densité d'atomes accepteurs
μ_n	Mobilité des électrons
μ_p	Mobilité des trous
E_F	Niveau de Fermi
AM	Air mass (masse d'air)
Φ	Flux incident
CAR	Couche antireflet
Cd	Cadmium
Zn	Zinc
Te	Tellure
x	La concentration de Zinc
B_C	Bande de Conduction
B_V	Bande de valence
E_g	Energie de la bande interdite
E_C	Energie de la bande de conduction
E_V	Energie de la bande de valence
E_{hh}	Niveau d'énergie des trous lourds
E_{lh}	Niveau d'énergie des trous légers
α_C	Potentiel de déformation dans la bande de conduction

a_V	Potentiel de déformation dans la bande de valence
a_e	Paramètre de maille de la couche épitaxiée
a_s	Paramètre de maille du substrat
Δ_a	Désaccord paramétrique
ν	Coefficient de Poisson
C_{ij}	Coefficients élastiques
h_c	Epaisseur critique
α	Coefficient d'absorption
h	Constante de Planck
K	Constante de Boltzmann
$e\chi_e$	Affinité électronique
$e\phi$	Travail de sortie
ΔE_C	Décalage de bande de conduction
ΔE_V	Décalage de bande de valence
ZCE	Zone de charge d'espace
I_{obs}	Courant d'obscurité
J_{dif}	Courant photo-généré
I_{cc}	Courant de Court-Circuit
V_{co}	Tension de circuit ouvert
FF	Facteur de forme
η	Rendement de conversion

Table des matières

Introduction générale.....	1
----------------------------	---

Chapitre 1: Généralités sur l'effet photovoltaïque

1.1	Introduction	3
1.2	Généralités sur les semi-conducteurs	3
1.2.1	Définition d'un semi-conducteur	3
1.2.2	La conductivité électrique d'un semi-conducteur.....	4
1.2.3	Types de semi-conducteurs.....	4
a	Semi-conducteur intrinsèque.....	4
b	Concentration intrinsèque	4
1.2.4	Différents types de dopage	6
a	Semi- conducteur dopé N	6
b	Semi-conducteur dopé p.....	7
c	Densité de charges dans un semi-conducteur	8
d	Loi d'action de masse	9
1.2.5	Courant dans le semi-conducteur	9
1.2.6	Jonction PN	11
1.3	Production de l'énergie électrique photovoltaïque	12
1.3.1	Le rayonnement solaire.....	12
1.3.2	Absorption et réflexion de la lumière	16
1.3.3	L'effet photovoltaïque.....	17
a	L'énergie photovoltaïque	17
b	La cellule photovoltaïque.....	18
c	Principes photovoltaïques.....	19

1.3.4	Les constituants de base d'une cellule photovoltaïque.....	20
a	Passivation des faces avant et arrière.....	21
b	Couche antireflet.....	21
c	Texturation de la surface	21
d	Contacts face avant et arrière.....	22
e	Le champ électrique arrière	23
1.3.5	Caractéristique électrique d'une cellule photovoltaïque.....	23
1.4	Facteurs limitant le rendement	25
1.4.1	Pertes physiques.....	25
1.4.2	Pertes technologiques	26
1.5	Schéma électrique équivalent d'une cellule photovoltaïque.....	27
1.6	Conclusion.....	28

Chapitre 2: Etude de la structure $Cd_{1-x}Zn_xTe/CdTe$

2.1	Introduction	30
2.2	Propriétés structurales	32
2.3	Structure de bande	33
2.3.1	Gap direct et Gap indirect	34
2.3.2	Hétérojonction (semi-conducteur/semi-conducteur).....	35
a	Diagramme des bandes d'énergie	35
b	Diagramme énergétique loin de la jonction	37
c	Diagramme énergétique au voisinage de la jonction	39
d	La zone de déplétion	41
2.4	Notion de couche contrainte et épaisseur critique.....	42
2.4.1	La contrainte.....	42
2.4.2	Définition de l'épaisseur critique	43

2.5	Effet de la contrainte sur le Gap	44
2.6	Effet de la température la largeur de la bande interdite	49
2.7	Le coefficient d'absorption	50
2.8	Mécanismes de conduction dans une cellule éclairée :	51
2.9	Conclusion.....	53

Chapitre 3: Simulations et interprétations

3.1	Introduction	54
3.2	Simulation et interprétation	54
3.2.1	Le paramètre de maille.....	54
3.2.2	L'épaisseur critique.....	56
3.2.3	Le Gap non contraint	56
3.2.4	Effets de la température sur le Gap	57
3.2.5	Effets de la contrainte sur le Gap	59
3.2.6	Effet de la contrainte sur le coefficient d'absorption	60
3.2.7	Le courant photo-généré.....	63
3.2.8	Caractéristique courant tension.....	64
3.2.9	La puissance délivrée par la cellule étudiée.....	65
3.2.10	La puissance maximale	66
3.2.11	La tension de circuit ouvert V_{co}	67
3.2.12	Le facteur de forme FF	68
3.2.13	Le rendement	69
3.3	Conclusion.....	70
	Conclusion générale.....	72
	Annexe.....	74
	Bibliographie.....	77

Liste des figures

Chapitre 1

Figure1. 1 {a} un SC intrinsèque;{b} un SC de type n;{c} un SC de type p.	7
Figure1. 2 Représentation des charges électriques dans la jonction PN et le diagramme énergétique de la jonction PN.....	12
Figure1. 3 Normes de mesures du spectre d'énergie lumineuse émis par le soleil, notion de la convention <i>AM</i>	14
Figure1. 4 Représentation du spectre solaire, hors atmosphère AM0, au niveau de la mer avec le soleil au zénith AM1, avec le soleil à 48° par rapport à l'équateur AM1.5,(b) Tableau représentant l'intégration du nombre de photon pour une cellule absorbant 250 nm aux différentes longueurs d'onde mentionnée [10].	15
Figure1. 5 Diagramme d'énergie d'un semi-conducteur a) dans l'obscurité. b) sous illumination.....	16
Figure1. 6 Les trois composantes de la réflexion.....	17
Figure1. 7 Coupe transversale d'une cellule PV typique.....	18
Figure1. 8 Structure et diagramme de bande d'une cellule photovoltaïque sous éclairage.....	19
Figure1. 9 Composition d'une cellule photovoltaïque.....	20
Figure1. 10 Caractéristique courant-tension $I = f(V)$ en obscurité et sous éclairage d'une cellule photovoltaïque [16].	24
Figure1. 11 Schéma équivalent d'une cellule photovoltaïque.....	27

Chapitre 2

Figure2. 1 Energie de bande interdite en fonction du paramètre de maille cubique pour différents binaires II-VI.	30
Figure2. 2 La structure cristalline du <i>CdTe</i> et <i>ZnTe</i> (Zinc blende).....	32
Figure2. 3 Schéma simplifié de la structure de bande du semi-conducteur à Gap direct	34
Figure2. 4 Transitions inter bandes a) directe b) indirecte.....	35

Figure2. 5 Diagrammes énergétiques dans chacun des semi-conducteurs.....	36
Figure2. 6 Diagramme énergétique loin de l'interface de contact.....	38
Figure2. 7 Diagramme énergétique au voisinage de la jonction $\chi_1 > \chi_2$	40
Figure2. 8 Couche contrainte, (a) en compression ($a_{couche} > a_{substrat}$) (b) en tension ($a_{couche} < a_{substrat}$).	42
Figure2. 9 Relaxation des contraintes de la couche épitaxiée par génération de dislocations à l'interface.....	43
Figure2. 10 Structure de bande d'un semi-conducteur à Gap directe a)Non contraint b) Contraint en compression c) Contraint en tension.	46

Chapitre 3

Figure3. 1 Variation du paramètre de maille de $Cd_{1-x}Zn_xTe$ en fonction de la concentration de Zinc (x).....	55
Figure3. 2 Variation du désaccord paramétrique en fonction de la concentration de Zinc de la structure $Cd(1-x)Zn_xTe/CdTe$	55
Figure3. 3 Variation de l'épaisseur critique en fonction de la concentration de Zinc (x).	56
Figure3. 4 Variation de l'énergie du Gap en fonction de concentration en Zinc (x).	57
Figure3. 5 Variation de l'énergie de la bande interdite en fonction de la température pour le $CdTe$	58
Figure3. 6 Variation de l'énergie de la bande interdite en fonction de la température pour le $ZnTe$	58
Figure3. 7 Variation de l'énergie de la bande interdite en fonction de la température pour le $Cd(1-x)Zn_xTe$	59
Figure3. 8 Variation de l'énergie de bande interdite de la structure contrainte $Cd(1-x)Zn_xTe /CdTe$ en fonction de la concentration de Zinc (x).	60
Figure3. 9 Variation du coefficient d'absorption de la structure $Cd(1-x)Zn_xTe/CdTe$ en fonction de l'énergie du photon incident.....	61
Figure3. 10 L'effet de la contrainte sur le coefficient d'absorption de la structure $Cd(1-x)Zn_xTe/CdTe$	62

Figure3. 11 Variation du nombre de photons absorbés en fonction de la concentration en Zinc (x).	63
Figure3. 12 Variation du courant photo-généré en fonction de la concentration de Zinc (x).	64
Figure3. 13 Caractéristiques courant-tension pour plusieurs Concentrations de Zinc (x).	65
Figure3. 14 Puissance délivrée par la cellule pour différentes concentrations de Zinc (x).	66
Figure3. 15 Variation de la puissance maximale en fonction de la concentration en Zinc (x).	67
Figure3. 16 La tension de circuit ouvert en fonction de la concentration de Zinc (x)... ..	68
Figure3. 17 Variation du facteur de forme en fonction de la concentration de Zinc (x).	69
Figure3. 18 Le rendement de conversion en fonction de la concentration de Zinc (x). ..	70

Liste des tableaux

Tableau2. 1 Extrait de la classification périodique des éléments [23].....	31
Tableau2. 2 Paramètre de maille des matériaux binaires <i>CdTe</i> et <i>Zinc</i>	33
Tableau2. 3 Affinités électroniques χ de <i>CdTe</i> et <i>ZnTe</i> [30].	36
Tableau2. 4 Travail de sortie $e\phi$ de <i>CdTe</i> et <i>ZnTe</i> [30].	37
Tableau2. 5 Paramètres de variation du Gap [24].	50

Introduction générale

Depuis de nombreuses années l'Humanité fait face à une demande en énergie croissante. Cette croissance, qui n'est que la conséquence directe de la croissance démographique mondiale et la mutation progressive des nombreuses économies primaires (basées sur l'agriculture) vers des économies secondaires (basées sur la production) dans les pays en voie de développement, entraîne une raréfaction des ressources naturelles utilisées pour répondre à ce besoin en énergie. Une très grande partie de ces ressources sont aujourd'hui fossiles : pétrole, charbon, gaz naturel. Bien que diversifiées et très abondantes, ces ressources ne sont pas inépuisables et l'exploitation qui en est aujourd'hui faite ne pourra durer plus d'un siècle. Mais la sûreté énergétique à long terme des pays du monde n'est pas le seul péril que fait encourir le recours aux énergies fossiles. Leur utilisation génère considérablement de dioxyde de carbone, gaz en parti responsable de l'effet de serre. Cet effet de serre met en péril de nombreuses populations de part le monde et la stabilité géopolitique même de certaines régions du globe pourrait être mise à mal par des phénomènes climatiques majeurs.

Pour répondre à ces préoccupations, de plus en plus d'états mettent en place des politiques incitant à l'économie de l'énergie, mais aussi à la production d'énergie grâce à d'autres moyens souvent qualifiés de « propres » en référence au fait qu'ils ne génèrent pas de dioxyde de carbone. Ces moyens de production sont principalement issus des énergies renouvelables, c'est-à-dire dont les ressources sont inépuisables par nature. Parmi celles-ci l'énergie « solaire ». Ce terme recouvre en réalité de nombreuses technologies, parmi lesquelles l'énergie photovoltaïque. Il s'agit ici de transformer directement la lumière du soleil en électricité, sans intermédiaire, directement grâce à un matériau semi-conducteur [1].

L'énergie solaire photovoltaïque occupe une grande place dans la recherche, et connaît une croissance de plus en plus importante depuis 1990. Cette recherche est orientée sur deux axes essentiels, qui peuvent sembler opposés : (augmentation du rendement de la cellule, et diminution du coût de production) [2].

Ce développement passe essentiellement par la maîtrise des matériaux utilisés dans la conception des composants. La plupart de ces matériaux sont obtenus par alliage sur des substrats standards. Ils pourraient à priori couvrir une large gamme de compositions et donc d'applications [3].

Les alliages à base du $CdTe$ qui font l'objet de ce travail permettent d'entrevoir des possibilités de développement des cellules solaires et peuvent être concurrentiels du silicium et des composés III-V.

Le présent mémoire est organisé en trois chapitres qui présentent de manière assez fusionnée, les divers paramètres électroniques et optiques des cellules photovoltaïques ainsi que la simulation des modèles mathématiques présentés.

Dans le premier chapitre, nous présentons des notions sur les semi-conducteurs, le rayonnement solaire, le principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque, la caractéristique électrique et les principaux facteurs limitant le rendement de conversion qui permettent de modéliser la cellule par un circuit électrique.

Le deuxième chapitre, est consacré à présenter la structure cristallographique et la structure de bande de l'alliage $Cd_{1-x}Zn_xTe$ ainsi que le coefficient d'absorption et l'effet de la contrainte et la température sur le Gap.

Le troisième chapitre est consacré à la simulation et à l'étude de l'effet de Zinc sur les différents paramètres électroniques et optiques cités dans le chapitre 2, et la caractéristique -courant tension et les différents paramètres de notre cellule.

1.1 Introduction

La cellule solaire est un dispositif de conversion de la lumière en énergie électrique par un processus appelé "effet photovoltaïque" qui est propre à certains matériaux appelés "semi-conducteurs". C'est dans ce chapitre qu'on va présenter les concepts nécessaires pour la compréhension de la cellule solaire.

On abordera en premier lieu des généralités sur les semi-conducteurs, par la suite on donnera des notions sur la production de l'énergie électrique photovoltaïque, les constituants de base d'une cellule photovoltaïque, les facteurs limitant le rendement, et on terminera par un schéma électrique équivalent d'une cellule photovoltaïque.

1.2 Généralités sur les semi-conducteurs

1.2.1 Définition d'un semi-conducteur

Les semi-conducteurs sont des matériaux intermédiaires entre les métaux et les isolants. Ce sont en principe des isolants à la température $T=0^{\circ}\text{K}$ car on peut établir que les électrons de la couche de valence occupent complètement la bande permise d'énergie la plus élevée (bande de valence). Mais la distance séparant cette bande pleine de la première bande vide supérieure dans le diagramme énergétique, c'est à-dire la bande interdite de largeur E_g est faible alors qu'elle est notable pour les isolants, et dès que la température augmente les semi-conducteurs commencent à conduire l'électricité. Leur résistivité varie entre $10^{-3} \Omega\text{cm}$ et $10^9 \Omega\text{cm}$, alors que celle des métaux est de l'ordre de $10^{-6} \Omega\text{cm}$ et celle des isolants peut atteindre $10^{22} \Omega\text{cm}$ [4].

1.2.2 La conductivité électrique d'un semi-conducteur

Dans un semi-conducteur, un atome réalise des liaisons covalentes avec les atomes voisins grâce à des électrons de la couche périphérique afin d'assurer une cohésion du cristal. Ces électrons ne sont pas libres pour participer à la création du courant électrique. Mais pour produire de l'électricité il suffit d'exposer le semi-conducteur à une source d'énergie (température ou lumière) pour faire casser les liaisons covalentes et les électrons devenant mobiles. Par ailleurs et après la libération des électrons, les liaisons covalentes devenant des liaisons pendantes appelées "trous" ou "lacunes" participent à la création du courant électrique. On dit que ces trous sont des porteurs positifs et les électrons des porteurs négatifs. L'augmentation de la température ou le flux incident sur le semi-conducteur induit l'accroissement des densités des porteurs qui explique la variation de sa conductivité [5].

1.2.3 Types de semi-conducteurs

a Semi-conducteur intrinsèque

Un semi-conducteur intrinsèque est un matériau idéal ne possédant aucun défaut physique. Un tel monocristal possède une structure de type tétraédrique c'est à dire que chaque atome est entouré symétriquement de 4 autres atomes.

A la température zéro absolu tous les électrons se trouvent dans la bande de valence et la largeur de la bande interdite est maximale. Avec l'accroissement de la température la largeur de la bande interdite diminue et certains électrons de la bande de valence augmentent leurs énergies qui leur permettent d'immigrer vers la bande de conduction. Dans le semi-conducteur intrinsèque le niveau énergétique qui se trouve au milieu de la bande interdite est appelé le niveau de Fermi (figure 1.1) [6].

b Concentration intrinsèque

A l'équilibre thermique, les densités totales d'électrons et trous dans la bande de conduction et la bande de valence respectivement sont données par les expressions suivantes [7] :

$$n = N_c \exp \left[\frac{E_F - E_C}{kT} \right] \quad (1.1)$$

$$p = N_v \exp \left[\frac{E_v - E_F}{kT} \right] \quad (1.2)$$

Avec:

N_c : Densité d'états des électrons dans la bande de conduction.

N_v : Densité d'états des trous dans la bande de valence.

E_C : Énergie de la bande de conduction.

E_v : Énergie de la bande de valence.

E_F : Énergie de Fermi.

Un semi-conducteur intrinsèque est un matériau qui ne possède aucun atome étranger (impureté) qui provoque une modification des densités des porteurs dans les deux bandes. Le seul changement qu'on peut noter dans ce semi-conducteur idéal, est dû aux transitions des électrons de la bande de valence vers la bande de conduction sous une excitation thermique ou lumineuse.

Dans ce type de semi-conducteur électriquement équilibré c.-à-d. que les trous et les électrons ont la même densité ($n = p = n_i$), et après excitation on trouve ces porteurs sous la forme des paires électron-trou. On peut obtenir la concentration intrinsèque n_i et le niveau de Fermi intrinsèque E_{F_i} par les équations suivantes:

$$n_i = [N_c N_v]^{1/2} \exp \left[-\frac{E_g}{2kT} \right] \quad (1.3)$$

$$E_{F_i} = \frac{1}{2} [E_v E_c] + \frac{3}{4} kT \log \frac{m_h}{m_e} \quad (1.4)$$

Avec :

m_e : Masse effective des électrons.

m_h : Masse effective des trous.

Il en résulte que le niveau de Fermi intrinsèque est toujours très proche du centre de la bande interdite.

Dans le cas d'un semi-conducteur non dégénéré et à l'équilibre thermique

($p = p_0, n = n_0, p_0 \cdot n_0 = n_i^2$):

$$n_0 = n_i \exp \left[-\frac{E_i - E_F}{kT} \right] \quad (1.5)$$

$$p_0 = n_i \exp \left[+\frac{E_i - E_F}{kT} \right] \quad (1.6)$$

1.2.4 Différents types de dopage

Dans le semi-conducteur intrinsèque la création des porteurs positifs et négatifs par un accroissement thermique ou une excitation lumineuse pour modifier la conductivité n'a pas une grande utilité, car les paires électrons-trous se recombinent avec la diminution ou l'absence des sources énergétiques. Donc l'ajout d'atomes étrangers est nécessaire pour faciliter la mobilité des porteurs dans le réseau cristallin. Cette procédure s'appelle « le Dopage » et le semi-conducteur devient extrinsèque. Il existe deux types de dopage dans les semi-conducteurs [7].

a Semi- conducteur dopé N

Dans un semi-conducteur dopé N la concentration des électrons est largement supérieure à la concentration des trous. On introduit généralement du phosphore, de l'arsenic ou de l'antimoine pour rendre la densité des électrons importante par rapport à celle des trous. Prenons par exemple le cas du silicium dans lequel on introduit de l'arsenic (qui possède 5 électrons sur la couche extérieure). Dans la bande interdite du silicium l'arsenic intervient pour créer une impureté donneuse très proche de la bande de conduction. Pour les températures supérieures à 0°K, les atomes d'arsenic sont ionisés ce qui revient à faire passer l'électron du niveau donneur à la

bande de conduction. La concentration des donneurs sera donc supérieure à celle des accepteurs ($N_d - N_a > 0$) ce qui correspond à la définition d'un semi-conducteur dopé N. A la température ambiante, pratiquement tous les donneurs sont ionisés et si la concentration en atomes donneurs est N_d , la densité des porteurs libres du semi-conducteur sera :

$$n = n_0 + N_d \quad (1.8)$$

Avec :

n_0 : est la densité d'électrons générés par le processus de rupture des liaisons covalente qui engendre des paires électrons-trous.

b Semi-conducteur dopé p

Il s'agit d'un semi-conducteur dont la concentration en trous est largement supérieure à la concentration en électrons. On y a introduit généralement du Bore, de l'Aluminium, du Gallium ou encore de l'Indium, prenons le cas du Silicium dans lequel on introduit du Bore. On associe au Bore un niveau accepteur E_a dans la bande interdite très proche de la bande de valence [4]. De la même façon que pour le semi-conducteur dopé n, la concentration en trous du semi-conducteur sera :

$$p = p_0 + N_a \quad (1.9)$$

La figure (1.1) illustre les différents types de semi-conducteurs.

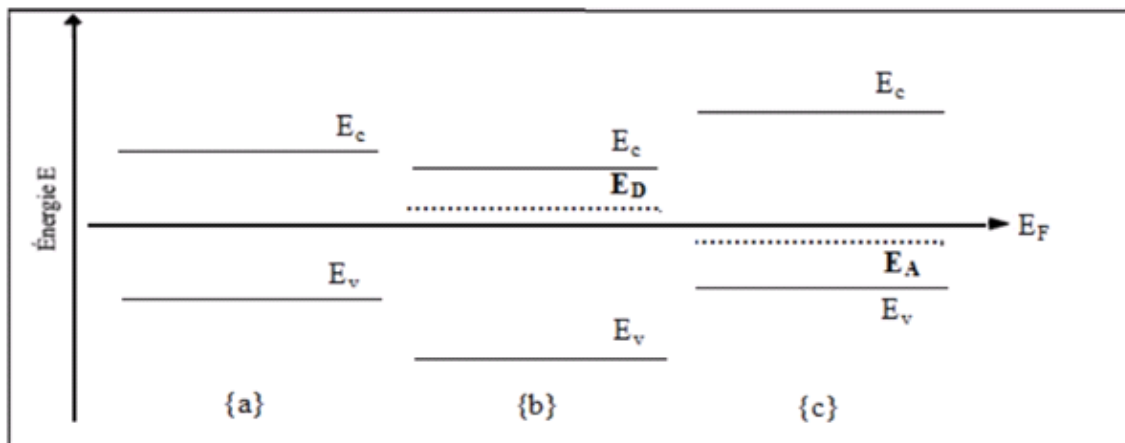


Figure1. 1 {a} un SC intrinsèque;{b} un SC de type n;{c} un SC de type p.

c Densité de charges dans un semi-conducteur

Si l'on considère un Semi-conducteur possédant une densité N_d d'atomes donneurs et une densité N_a d'atomes accepteurs on peut estimer qu'à la température ordinaire toutes les impuretés sont ionisées. Il en résulte le bilan des charges suivant:

$$n + N_a = p + N_d \quad (1.10)$$

Dans le cas de semi-conducteurs dopés n ou p la relation (1.10) se simplifie lorsque l'on tient compte des ordres de grandeur des différentes concentrations.

- Semi-conducteur dopé n:

$N_a = 0$ et $N_d \gg p \longrightarrow n \approx N_d$: Les électrons sont les porteurs majoritaires.

La densité des donneurs ionisés N_d^+ s'écrit:

$$N_d^+ = \frac{N_d}{1 + 2 \exp \left[\frac{E_F - E_d}{kT} \right]} \quad (1.11)$$

E_d étant le niveau d'énergie donneur.

- Semi-conducteur dopé p:

$N_d = 0$ et $N_a \gg n \longrightarrow p \approx N_a$: Les trous sont les porteurs majoritaires.

La densité des accepteurs ionisés N_a^- s'écrit [8]:

$$N_a^- = \frac{N_a}{1 + \frac{1}{4} \exp \left[\frac{E_a - E_F}{kT} \right]} \quad (1.12)$$

E_a étant le niveau d'énergie accepteur.

Le matériau semi-conducteur étant globalement neutre, l'équation de la neutralité électrique s'écrit :

$$n + N_a^- = p + N_d^+ \quad (1.13)$$

d Loi d'action de masse

La loi d'action de masse relie, à une température T , la densité de porteurs (électrons et trous) à la densité intrinsèque du semi-conducteur. Elle s'exprime par:

$$n \cdot p = n_i^2 \quad (1.14)$$

On en déduit la concentration des porteurs minoritaires de Semi-conducteurs dopés n et dopés p:

- Trous dans un semi-conducteur dopé n:

$$p_n = \frac{n_i^2}{N_d} \quad (1.15)$$

- Electrons dans un semi-conducteur dopé p :

$$n_p = \frac{n_i^2}{N_a} \quad (1.16)$$

1.2.5 Courant dans le semi-conducteur

Les courants dans le semi-conducteur résultent du déplacement des porteurs de charge, électrons et trous, sous l'action de différentes forces. L'origine de ces forces est un champ électrique (courant de conduction) ou un gradient de concentration (courant de diffusion) [7].

Le courant de conduction est le courant que l'on rencontre dans les métaux et qui est proportionnel au champ électrique:

$$J_{C_n} = q \cdot n \cdot \mu_n \cdot E \quad (1.17)$$

$$J_{c_p} = q \cdot p \cdot \mu_p \cdot E \quad (1.18)$$

Avec :

μ_n : Mobilité des électrons.

μ_p : Mobilité des trous.

Le courant total s'écrit alors [7]:

$$J_{tot} = q(n\mu_n + p\mu_p)E = \sigma E \quad (1.19)$$

Ainsi, la conductivité $\sigma(T)$ et la résistivité $\rho(T)$, sont données par :

$$\sigma(T) = q(n\mu_n(T) + p\mu_p(T)) \quad (1.20)$$

$$\rho(T) = \frac{1}{q(n\mu_n(T) + p\mu_p(T))} \quad (1.21)$$

Considérons un semi-conducteur dopé dont la concentration en trous varie suivant un axe x . La densité de courant de diffusion en un point d'abscisse x est:

$$J_{D_p} = -qD_p \frac{dp(x)}{dx} \quad (1.22)$$

Les porteurs en excès tendent à se donner une concentration uniforme. Il en est de même dans le cas des électrons de concentration $n(x)$ et on a:

$$J_{D_n} = -qD_n \frac{dn(x)}{dx} \quad (1.23)$$

Avec :

D_n : Constante de diffusion des électrons.

D_p : Constante de diffusion des trous.

Lorsque les deux phénomènes existent simultanément la densité totale de courant pour les électrons et les trous est donnée, en explicitant la relation de dépendance avec la température, par :

$$J_n = q \cdot n \mu_n \cdot E + q \cdot D_n \frac{dn}{dx} \quad (1.24)$$

$$J_p = q \cdot n \mu_p \cdot E + q \cdot D_p \frac{dn}{dx} \quad (1.25)$$

Ces relations sont valables pour des champs électriques suffisamment faibles pour que la vitesse des porteurs reste proportionnelle au champ. Le courant total s'écrit alors [5]:

$$J_{tot} = J_n + J_p \quad (1.26)$$

Les constantes D_p et D_n sont liées aux mobilités μ_n et μ_p par la relation d'Einstein :

$$\frac{D_p}{\mu_p} = \frac{D_n}{\mu_n} = \frac{kT}{q} = V_T \quad (1.27)$$

1.2.6 Jonction PN

Une jonction PN est constituée de deux zones respectivement dopées P et N et juxtaposées d'une façon que nous supposons abrupte, c'est-à-dire que la transition de la zone P à la zone N se fait brusquement. Lorsque l'on assemble les deux régions, la différence de concentration entre les porteurs des régions P et N va provoquer la circulation d'un courant de diffusion tendant à égaliser la concentration en porteurs d'une région à l'autre. Les trous de la région P vont diffuser vers la région N laissant derrière eux des atomes ionisés, qui constituent autant de charges négatives fixes. Il en est de même pour les électrons de la région N qui diffusent vers la région P laissant derrière eux des charges positives. Il apparaît aussi au niveau de la jonction une zone contenant des charges fixes positives et négatives. Ces charges créent un champ électrique E qui s'oppose à la diffusion des porteurs de façon à ce qu'un équilibre électrique s'établisse [9].

L'équilibre thermodynamique est atteint lorsque l'influence du champ électrique compense exactement les effets de la diffusion. Il apparaît une différence de potentiel (V) entre les régions neutres cotés N et P qui correspond au fait que les

niveaux d'énergie se déplacent jusqu'à ce que les niveaux de Fermi coté N et coté P coïncident figure (1.2).

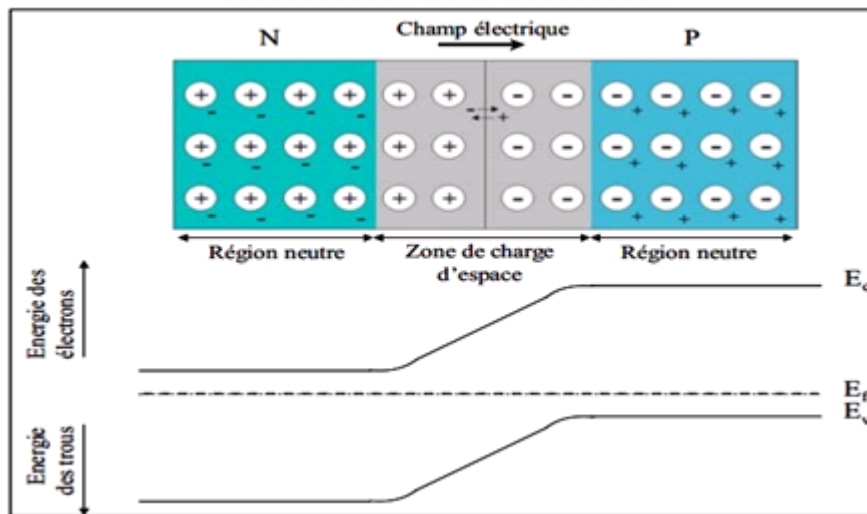


Figure 1. 2 Représentation des charges électriques dans la jonction PN et le diagramme énergétique de la jonction PN.

1.3 Production de l'énergie électrique photovoltaïque

1.3.1 Le rayonnement solaire

Le rayonnement émis par le soleil comporte des ondes électromagnétiques dont une partie, appelée le rayonnement solaire, ne cesse de parvenir à la limite supérieure de l'atmosphère terrestre. En raison de la valeur prise par la température superficielle du soleil environ $5800^{\circ}K$, l'énergie du rayonnement électromagnétique transmise à la terre provient essentiellement de l'émission d'ondes lumineuses qui se situent dans le visible (entre $0,4$ et $0,7 \mu m$ de longueur d'onde environ) et le proche infrarouge (entre $0,7$ et $4 \mu m$ environ) ; cette énergie, moyennée sur une année et sur l'ensemble de la limite supérieure de l'atmosphère, correspond à un éclairement de quelque $340 Wm^{-2}$. Mais sur cette quantité d'éclairement qu'apporte le soleil au système terre-atmosphère, environ $100 Wm^{-2}$ sont réfléchis vers l'espace : le reste est absorbé, pour un tiers par l'atmosphère et pour les deux tiers par la surface terrestre [10].

Tout d'abord, près du quart de cet éclairement incident est réfléchi dans l'espace par l'atmosphère : pareille réflexion est essentiellement le fait des nuages (environ 65 Wm^{-2}), le reste étant dû aux autres constituants atmosphériques- gaz et aérosols- qui réfléchissent environ 15 Wm^{-2} . En outre, l'atmosphère et ses nuages prélèvent par absorption 80 Wm^{-2} environ sur l'éclairement solaire : restent donc approximativement 180 Wm^{-2} qui parviennent à la surface terrestre au terme d'une transmission dont à peu près les deux tiers se font directement, le reste s'effectuant par diffusion vers le bas ; c'est grâce à ce rayonnement diffus que l'on peut voir sans interruption pendant le jour, même quand les nuages cachent le soleil.

On assiste à un processus assez complexe d'interaction entre diffusion vers le bas et réflexion : la surface terrestre, possédant un albédo moyen élevé (l'albédo est la fraction d'un rayonnement incident diffusée ou réfléchi par un obstacle), devrait renvoyer dans l'atmosphère environ 50 Wm^{-2} sur les quelque 180 Wm^{-2} incidents ; mais en fait, la majeure partie de l'éclairement qu'elle réfléchit ainsi lui revient tôt ou tard par diffusion vers le bas depuis le milieu atmosphérique et s'ajoute partiellement aux 130 Wm^{-2} de rayonnement solaire non réfléchis à son contact. Bien qu'il n'existe pas dans la réalité deux instants distincts pour l'absorption par la surface terrestre, mais un phénomène continu d'absorption du rayonnement solaire, on peut résumer le processus précédent en disant que tout se passe comme si les 50 Wm^{-2} réfléchis par cette surface se répartissaient entre 20 Wm^{-2} définitivement renvoyés vers l'espace interplanétaire après diffusion vers le haut à travers l'atmosphère et 30 Wm^{-2} retournant à la surface terrestre après diffusion différée vers le bas. Ces 30 Wm^{-2} s'ajoutent aux 130 Wm^{-2} initialement non réfléchis pour constituer approximativement les 160 Wm^{-2} — pratiquement la moitié du rayonnement solaire — qu'absorbe la surface terrestre [10].

En ramenant toutes les couches de l'atmosphère dans des conditions normales ($P= 1013 \text{ mbar}$ et $T= 25^\circ\text{C}$), on a défini une atmosphère standard d'épaisseur verticale moyenne de $7,8 \text{ km}$ prise pour référence unité et formée de couches planes et stratifiées composées par les divers gaz comme l'azote (couche de 6150 m), l'oxygène (1650 m), l'argon (74 m), le gaz carbonique (24 m)... L'eau est représentée par une

couche d'épaisseur variable de quelques dizaines de mètres pour la vapeur et de quelques centimètres pour le liquide.

De là on introduit la notion d'air masse (AM_x) qui permet de tenir compte de l'épaisseur de l'atmosphère traversée par les rayons solaires suivant l'inclinaison du soleil (Figure 1.3). Elle correspond à la perte de l'énergie solaire par l'absorption atmosphérique. La masse d'air est exprimée comme un multiple du parcours traversé en un point au niveau de la mer, le soleil étant directement à l'aplomb [10].

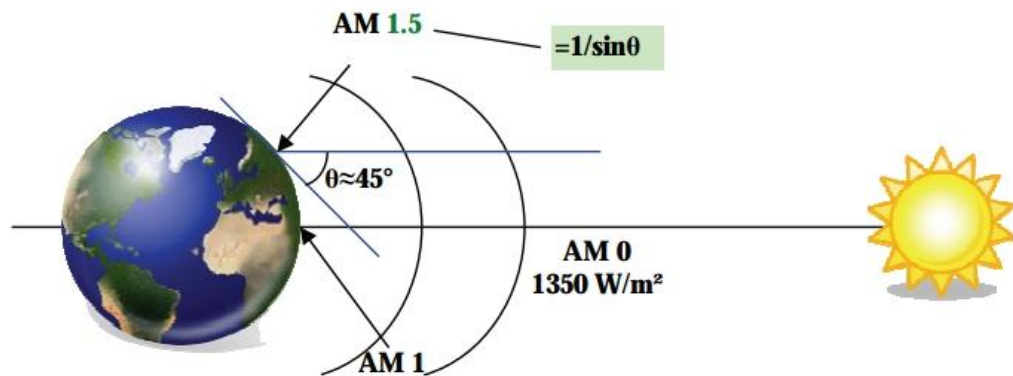


Figure1. 3 Normes de mesures du spectre d'énergie lumineuse émis par le soleil, notion de la convention AM .

En chaque point, la valeur de la masse d'air est donnée par l'équation (1.28):

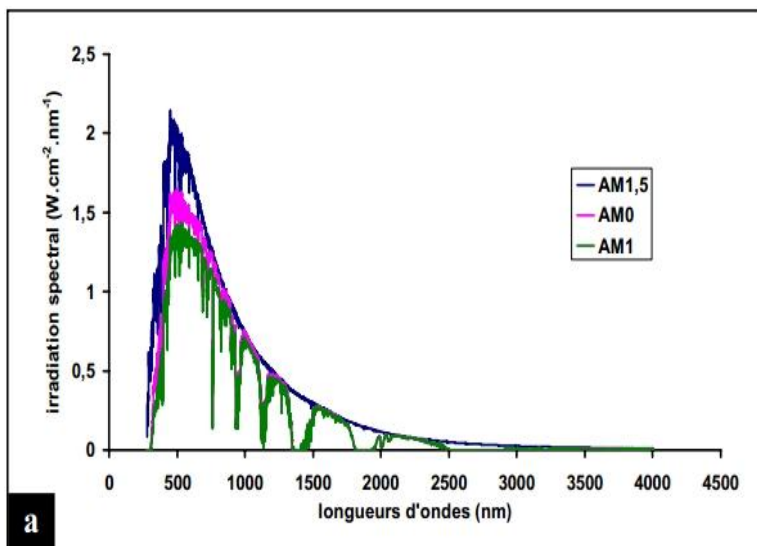
$$AM \approx \frac{1}{\sin\theta} \quad (1.28)$$

Où l'angle θ est l'élévation solaire, c'est-à-dire l'angle en radian entre le rayonnement solaire et le plan horizontal. Le spectre solaire $AM 0$, correspond à une masse d'air nulle pour un éclairage solaire au-delà de l'atmosphère à incidence normale. Pour un ciel clair avec le soleil à l'aplomb, on a le rayonnement de la masse d'air "1" (ou $AM1$), $AM2$ lorsqu'on a une inclinaison de 30° , L'éclairage solaire arrivant sur la terre avec un angle de 48° est de $1000 W/m^2$ (soit $100 mW/cm^2$) avec une masse d'air $AM1.5$ [10].

Le spectre solaire $AM 1.5$ est composé de $3\sim 4\%$ de lumière ultraviolette (< 390 nm), de 45% de lumière visible ($390-750$ nm) et de 52% de lumière infrarouge [Proche

IR (750-1400 nm) = 38 % et IR Lointain (> 1400 nm) = 14%]. La figure (1.4) montre que l'éclairement est maximal entre 450 et 700 nm. Parmi les facteurs majeurs qui sont impliqués dans une conversion photovoltaïque efficace, il y a l'absorption de la lumière blanche reçue sur terre.

Il est important de comprendre les deux aspects recouverts par le concept de nombre d'air masse. D'une part, il caractérise la puissance transportée par le rayonnement solaire (1353 Wm^{-2} pour *AM0*, 833 Wm^{-2} pour *AM1.5*) et d'autre part, il sert à définir un spectre de référence pour calibrer les cellules étalons destinées à qualifier les performances des dispositifs photovoltaïques. Ainsi les conditions standards de qualification des cellules sont un spectre *AM 1.5*, une puissance incidente de 1000 Wm^{-2} et une température de 25°C . Sauf indication contraire, c'est pour de telles conditions que doivent être fournies les performances et spécifications d'un dispositif photovoltaïque donné.



longueur d'onde [nm]	flux de photons [%](250 nm à)
500	8,0
600	17,3
650	22,4
700	27,6
750	35,6
800	37,3
900	46,7
1000	53,7
1250	58,7
1500	75,0

Figure 1. 4 Représentation du spectre solaire, hors atmosphère *AM0*, au niveau de la mer avec le soleil au zénith *AM1*, avec le soleil à 48° par rapport à l'équateur *AM1.5*, (b) Tableau représentant l'intégration du nombre de photon pour une cellule absorbant 250 nm aux différentes longueurs d'onde mentionnée [10].

1.3.2 Absorption et réflexion de la lumière

L'absorption de la lumière solaire par le matériau étant sans doute le mécanisme principal du phénomène de la génération. La majorité des semi-conducteurs de base des cellules solaires absorbe convenablement le spectre visible. En effet, on utilise toujours les semi-conducteurs ayant un coefficient d'absorption élevé. Le taux d'absorption des photons par un matériau semi-conducteur est lié directement aux énergies des photons incidents.

L'absorption n'a lieu que si l'énergie de ces photons est égale ou est supérieure à l'énergie de la bande interdite du semi-conducteur E_g . Les photons qui ne satisfont pas à cette condition ($E_{ph} < E_g$) ne seront pas absorbés et ne contribuent pas à la conversion photovoltaïque. S'il y a une énergie supérieure à E_g . Le photon 2 du diagramme de la figure (1.5) génère une paire électron-trou à niveau supérieure, mais l'excédent d'énergie est perdu par un processus de désexcitation spontanée qui produit de la chaleur et ramène son énergie vers les niveaux du bas de bande et sachant que chaque photon absorbé ne crée qu'une seule paire électron-trou [11].

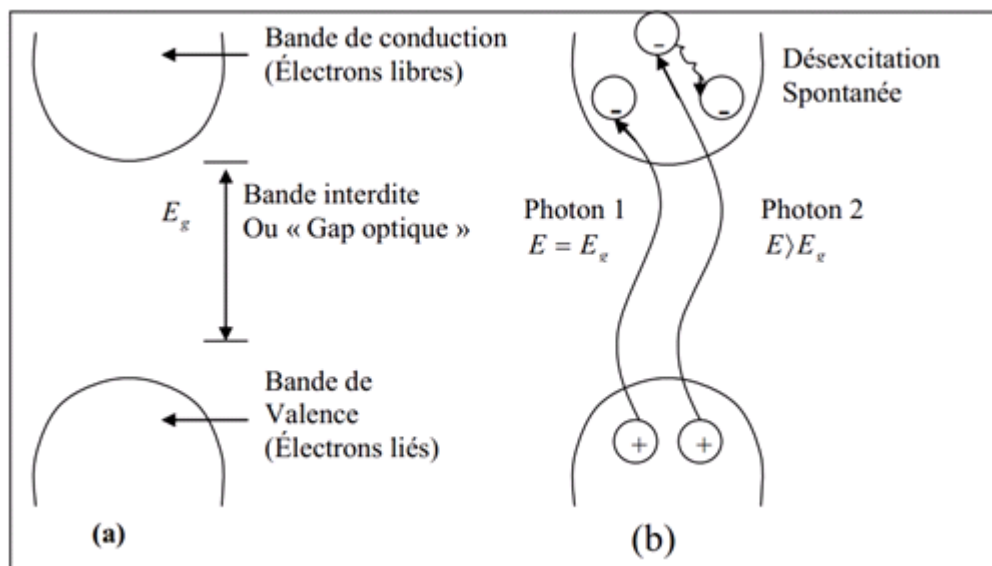


Figure1. 5 Diagramme d'énergie d'un semi-conducteur a) dans l'obscurité. b) sous illumination.

Bien que le phénomène d'absorption joue un rôle positif dans la conversion photovoltaïque, le phénomène de la réflexion est au contraire l'un des problèmes qui

réduisent le rendement de la conversion d'énergie. Ces pertes affectent principalement le courant de court-circuit de la cellule solaire.

Généralement, la lumière incidente subit des pertes sous deux formes : soit par réflexion, soit par transmission.

Il est à noter que, dans une structure photovoltaïque, les pertes par réflexion ont trois composantes à savoir :

- Réflexion par les contacts ohmiques ;
- Réflexion par la surface avant du semi-conducteur ;
- Réflexion par la couche arrière (BSR).

La figure (1.6) ci-dessous illustre ces différentes réflexions.

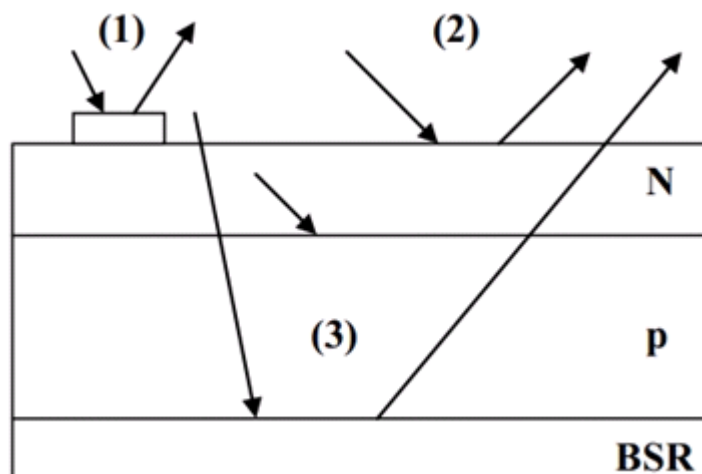


Figure1. 6 Les trois composantes de la réflexion.

1.3.3 L'effet photovoltaïque

a L'énergie photovoltaïque

L'énergie photovoltaïque (PV) est la transformation directe de la lumière en électricité. Elle n'est pas une forme de l'énergie thermique. Elle utilise une photopile pour transformer directement l'énergie solaire en courant continu.

L'effet photovoltaïque a été découvert par E. Becquerel en 1839: il découvrit que certains matériaux délivraient une petite quantité d'électricité quand ils étaient exposés à la lumière. Albert Einstein expliqua le phénomène photoélectrique en 1912, mais il fallut attendre le début des années 50 pour que les scientifiques approfondissent et exploitent ce phénomène physique [12].

L'utilisation des cellules solaires a débutée dans les années quarante dans le domaine spatial. Les recherches d'après-guerre ont permis d'améliorer leurs performances et leurs tailles, mais il faudra attendre la crise énergétique des années soixante-dix pour que les gouvernements et les industriels investissent dans la technologie photovoltaïque et ses applications terrestres.

b La cellule photovoltaïque

Pour obtenir une cellule photovoltaïque il faut réaliser une structure de diode, c'est à dire réaliser une jonction du type p-n. Le champ électrique qui règne à la jonction de ces deux zones dopées différemment sépare les charges électriques photo-générées par la lumière solaire (paires d'électrons-trous) et assure leur évacuation du cristal (les électrons par la cathode et les trous par l'anode) [13].

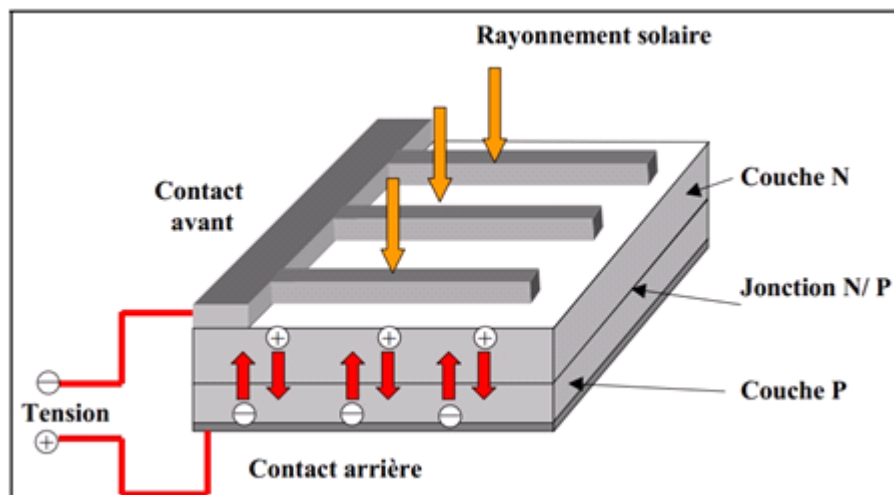


Figure1. 7 Coupe transversale d'une cellule PV typique.

c Principes photovoltaïques

La transformation d'énergie solaire en énergie électrique est basée sur les trois mécanismes suivants [14]:

- absorption des photons (dont l'énergie est supérieure au Gap) par le matériau constituant le dispositif ;
- conversion de l'énergie du photon en énergie électrique, ce qui correspond à la création de paires électron/trou dans le matériau semi-conducteur ;
- collecte des particules générées dans le dispositif.

Le matériau constituant la cellule photovoltaïque doit donc posséder deux niveaux d'énergie et être assez conducteur pour permettre l'écoulement du courant: d'où l'intérêt des semi-conducteurs pour l'industrie photovoltaïque.

Afin de collecter les particules générées, un champ électrique permettant de dissocier les paires électrons / trous créés est nécessaire. Pour cela on utilise le plus souvent une jonction p-n. D'autres structures, comme les hétérojonctions et les diodes schottky peuvent également être utilisées.

Le fonctionnement des cellules photovoltaïques est illustré sur la figure (1.8) :

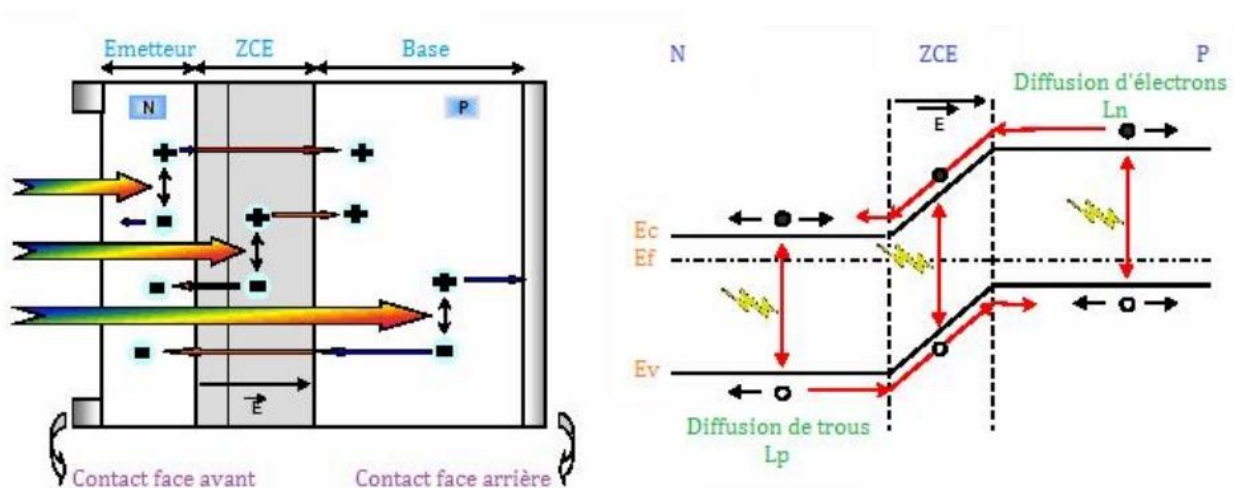


Figure1. 8 Structure et diagramme de bande d'une cellule photovoltaïque sous éclairage.

Les photons incidents créent des porteurs dans les zones n et p et dans la zone de charge d'espace. Les photoporteurs auront un comportement différent suivant la région [11]:

- dans la zone n ou p, les porteurs minoritaires qui atteignent la zone de charge d'espace sont "envoyés" par le champ électrique dans la zone p (pour les trous) ou dans la zone n (pour les électrons) où ils seront majoritaires. On aura un photocourant de diffusion ;
- dans la zone de charge d'espace, les paires électrons /trous créées par les photons incidents sont dissociées par le champ électrique: les électrons vont aller vers la région n, les trous vers la région p. On aura un photocourant de génération.

Ces deux contributions s'ajoutent pour donner un photocourant résultant I_{ph} . C'est un courant de porteurs minoritaires. Il est proportionnel à l'intensité lumineuse.

1.3.4 Les constituants de base d'une cellule photovoltaïque

Bien que différentes structures soient envisageables pour l'élaboration des cellules photovoltaïques, des parties similaires sont présentes dans chaque composant. La structure d'une cellule photovoltaïque avec contacts sur les deux faces est présentée sur la figure (1.9).

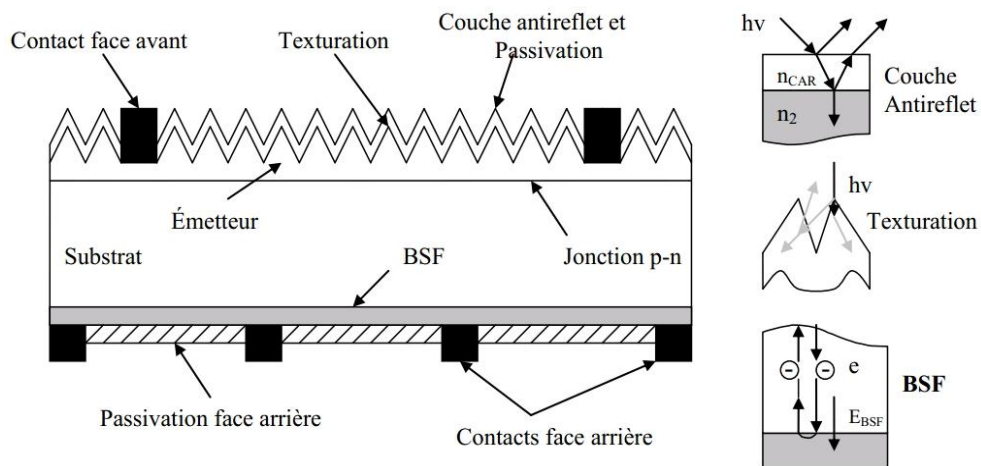


Figure1. 9 Composition d'une cellule photovoltaïque.

a Passivation des faces avant et arrière

La surface des semi-conducteurs contient une densité importante de défauts (liaisons pendantes, impuretés, etc.) entraînant des pertes non négligeables liées à la recombinaison en surface. La passivation consiste à améliorer les qualités électroniques de la surface et du volume du matériau en neutralisant les effets de ses défauts électriquement actifs. Diverses couches de passivation sont utilisées en photovoltaïque mais les principales sont l'oxyde thermique de silicium (SiO_2), le nitrure de silicium hydrogéné (SiNx:H) et le dioxyde d'étain (SnO_2) [15].

b Couche antireflet

Pour minimiser la réflexion de la lumière, une couche antireflet (CAR) est utilisée. Le principe d'action des couches antireflet est basé sur l'interférence des faisceaux lumineux dans les couches diélectriques minces (voir l'insertion sur la figure (1.9)). Si l'épaisseur de la couche diélectrique est égale à :

$$d_{VAR} = \frac{(2.N+1)\lambda}{4.n_{CAR}}, \quad N = 0, 1, 2, 3 \dots$$

On obtiendra l'annulation des faisceaux réfléchis à l'interface air/CAR et CAR/semi-conducteur. Pour les cellules photovoltaïques à haut rendement η , une double couche antireflet est utilisée (avec deux diélectriques différents). Différentes CAR sont utilisées en photovoltaïque : TiO_2 , SiO_2 , ZnS , MgF_2 , SiNx , etc. [15].

c Texturation de la surface

La texturation est utilisée pour diminuer la réflectivité de la surface de la cellule. Cette opération vise à développer en surface un relief micrométrique, généralement de forme pyramidale. La longueur d'onde de la lumière incidente étant inférieure aux dimensions des structures ainsi réalisées, les rayons incidents suivent les lois de l'optique géométrique. L'insertion sur la figure (1.9) présente le principe de réflexions multiples propre à la texturation. Le relief de la surface entraîne une baisse

de la réflexion en face avant: un rayon arrivant à incidence normale (par rapport au plan de la cellule) sur une pyramide sera réfléchi sur la face d'une pyramide adjacente, cette double réflexion sur les pyramides diminue le coefficient de réflexion totale, qui ne vaut plus R mais R^2 [15].

D'autre part, un rayon d'incidence normale sera transmis dans la cellule avec un angle de réfraction θ différent de 0° . Le trajet de ce rayon au sein du matériau sera donc augmenté d'un facteur $1/\sin \theta$ par rapport au cas d'une surface plane et perpendiculaire à l'éclairement, ce qui aura pour effet d'augmenter la part de photons absorbés par le matériau. Pour finir, la texturation de la surface entraîne un piégeage plus important de la lumière pénétrant dans la cellule. Sur la face arrière de la cellule, il existe un angle d'incidence critique θ_c à partir duquel le rayon est totalement réfléchi et prolonge son trajet au sein du semi-conducteur, augmentant là aussi l'absorption des photons.

Ce phénomène est particulièrement important dans le cas des cellules de faible épaisseur, et peut être renforcé par une texturation de la face arrière et/ou une couche antireflet sur cette même face. Différents procédés sont utilisés pour texturer la surface des semi-conducteurs : attaques chimiques de la surface (KOH , $NaOH$, acides), texturation mécanique (laminage à froid sous un peigne dentelé), texturation laser [12].

d Contacts face avant et arrière

Les contacts métalliques au substrat servent à collecter le courant de porteurs photo générés. Les contacts doivent être ohmiques, c'est-à-dire que la caractéristique $I=f(V)$ du contact doit être linéaire. La résistance des contacts est un paramètre très important. La forte résistance des contacts augmente la résistance série de la cellule et baisse le facteur de forme et le rendement. Différents procédés sont utilisés pour réaliser les contacts. Dans le cadre des cellules photovoltaïques industrielles en silicium multicristallin, les contacts sont généralement réalisés par sérigraphie. Pour les cellules photovoltaïques à haut rendement, la pulvérisation cathodique ou l'évaporation sous vide sont utilisées [15].

e **Le champ électrique arrière**

Le champ électrique arrière (BSF : Back Surface Field) consiste à créer une barrière de potentiel (par exemple, jonction ($p^+ - p$) sur la face arrière de la cellule pour assurer une passivation. La barrière de potentiel induite par la différence de niveau de dopage entre la base et le BSF tend à confiner les porteurs minoritaires dans la base (voir l'insertion sur la figure 1.9). Ceux-ci sont donc tenus à l'écart de la face arrière qui est caractérisée par une vitesse de recombinaison très élevée. Le BSF fait encore l'objet de nombreuses recherches car l'épaisseur des plaques est constamment réduite afin de réaliser une économie de matière première.

1.3.5 **Caractéristique électrique d'une cellule photovoltaïque**

Dans la cellule photovoltaïque, deux courants s'opposent, le courant d'éclairement (photocourant I_{ph}) et un courant de la diode appelé courant d'obscurité I_{obs} , qui résulte de la polarisation du composant. Le courant résultant $I(V)$ est [13] :

$$I(V) = I_{obs}(V) - I_{ph} \quad (1.29)$$

Avec

$$I_{obs}(V) = I_s \left(e^{\left(\frac{qV}{nkT}\right)} - 1 \right) \quad (1.30)$$

$$I_{ph} = q \times \Phi \left[1 - \frac{e^{-\alpha w}}{1 + \alpha w} \right] \times A \quad (1.31)$$

D'Où

q : Charge élémentaire ($q=1.6 \times 10^{-19}C$).

V : Tension aux bornes de la jonction.

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

Φ : Flux incident.

T : Température en (K).

A : Surface de la cellule PV.

I_s est le courant de saturation de la diode. n est le facteur d'idéalité de la diode, fonction de la qualité de la jonction (égal à 1 si la diode est idéale et égal à 2 si la diode est réelle).

La caractéristique d'une cellule à l'obscurité est identique à celle d'une diode. Sous éclairage, la caractéristique courant-tension a l'allure présentée sur la figure (1.10).

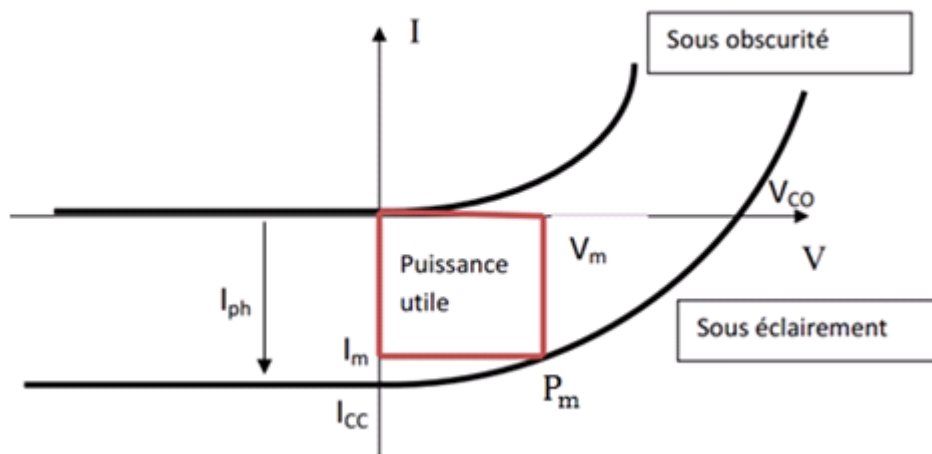


Figure 1. 10 Caractéristique courant-tension $I = f(V)$ en obscurité et sous éclairage d'une cellule photovoltaïque [16].

A partir de la caractéristique courant-tension de la cellule photovoltaïque, on peut déduire les paramètres propres à la cellule et particulièrement :

I_{cc} : Courant de court-circuit (obtenu pour $V=0$).

V_{CO} : Tension en circuit ouvert (obtenu pour $I=0$).

I_M : Courant à la puissance maximale de fonctionnement de la cellule PV.

V_M : Tension à la puissance maximale de fonctionnement de la cellule PV.

η : Rendement de conversion.

FF : Facteur de forme.

Avec

$$\eta = \frac{\text{(puissance électrique maximale fournie)}}{\text{(puissance solaire incidente)}}$$
$$\eta = \frac{V_M I_M}{P_i \cdot A} = \frac{FF \cdot V_{CO} \cdot I_{CC}}{P_i \cdot A} \quad (1.32)$$

P_i : Puissance d'éclairement reçue par unité de surface.

$$FF = \frac{\text{(puissance maximale délivrée sur la charge)}}{V_{CO} I_{CC}}$$
$$FF = \frac{V_M I_M}{V_{CO} I_{CC}} \quad (1.33)$$

1.4 Facteurs limitant le rendement

En pratique, la conversion d'énergie lumineuse en énergie électrique n'est pas totale. Différentes pertes viennent influencer le rendement d'une cellule. Elles sont dans la plupart des cas dues à la nature du matériau et la technologie utilisée. Ces pertes sont évoquées ci-après :

1.4.1 Pertes physiques

Tous les photons possédant une longueur d'onde supérieure à celle associée au Gap du semi-conducteur ($\lambda_{ph} > \lambda_g$), ne peuvent générer de paire électron-trou, et sont donc perdus. Un modèle plus détaillé du phénomène permet toutefois de considérer les mécanismes d'absorption.

Les photons d'énergie supérieure au Gap ne pourront générer qu'une seule paire électron trou. L'excès d'énergie est perdu sous forme de chaleur.

Le facteur de tension qV_{CO}/E_g , est le rapport de l'énergie maximale développée par la cellule sur l'énergie du Gap. La tension aux bornes de la cellule n'est qu'une fraction de l'énergie du Gap à cause notamment de la chute de potentiel au niveau des contacts et de la jonction ; les meilleures valeurs obtenues de V_{CO} sont de l'ordre de 700mV [17].

Le facteur de forme, ne peut dépasser 0.86 [18], car les courbes courant-tension sont générées par les équations de Boltzmann sous forme exponentielle ($\exp(qV/kT)$), donc il n'existe pas de courbes $I(V)$ de forme rectangulaire, même dans le cas d'une cellule idéale (voir la figure 1.11). Ce paramètre dépend également de la conception de la cellule, de la qualité de la jonction des matériaux utilisés, de la résistivité des contacts métalliques, etc.

Ces facteurs physiques étant considérés comme limitatifs pour une structure donnée des cellules photovoltaïques, les facteurs technologiques sont les seuls acteurs qui peuvent améliorer le rendement de la cellule.

1.4.2 Pertes technologiques

Le rendement de la cellule photovoltaïque dépend à la base du nombre des photons incidents. Cette quantité d'énergie est limitée par le coefficient de réflexion de la surface de la cellule R , qui pondère toutes les équations du photocourant de génération par un facteur $(1-R)$, le coefficient de réflexion peut être optimisé par la mise en œuvre des traitements de surface appropriés et de couche antireflet.

Les contacts métalliques présents sur la face avant de la cellule afin de collecter les porteurs, entraînent des pertes de puissance car ils couvrent des parties de la surface réceptrice de la cellule (effet d'ombre). La largeur de métal, engendre un compromis entre les pertes dues à la couverture partielle de l'émetteur et les pertes de facteur de forme FF provoquées par la résistance série (liée à la largeur de la métallisation).

Il y a des photons, ayant l'énergie nécessaire pour créer une paire électron-trou, mais qui traversent l'épaisseur de la cellule sans être absorbés. Ce nombre de photons devient important surtout dans les cellules minces d'épaisseur ($< 100 \mu\text{m}$). ce phénomène réduit le rendement d'absorption, et peut être diminué en utilisant une couche réfléchissante sur la face arrière de la cellule (appelé réflecteur arrière ou miroir arrière « BSR ») [19].

Le rendement de collecte, est le rapport entre le nombre de porteurs de charge effectivement collectés, et le nombre de porteurs photogénérés. En effet, certains porteurs se recombinent à la surface ou dans le volume de la cellule photovoltaïque. Ce phénomène est lié directement à la durée de vie τ des porteurs minoritaires (le temps moyen entre la génération et la recombinaison d'un porteur minoritaire). Egalement ; il est possible d'améliorer la collecte par l'utilisation (diffusion) d'un champ arrière P^+ dans le cas de la structure NP (BSF) [20].

Ces phénomènes peuvent être optimisés à l'aide des technologies de fabrication des cellules photovoltaïques.

1.5 Schéma électrique équivalent d'une cellule photovoltaïque

La figure (1.11) présente un modèle de la cellule photovoltaïque, prenant en compte les facteurs limitant le rendement, on trouve le générateur de courant I_{ph} , qui traduit le courant photogénéré ainsi que les résistances complémentaires, R_s et R_p , et deux diodes D_1 et D_2 . R_L est la résistance de charge [21].

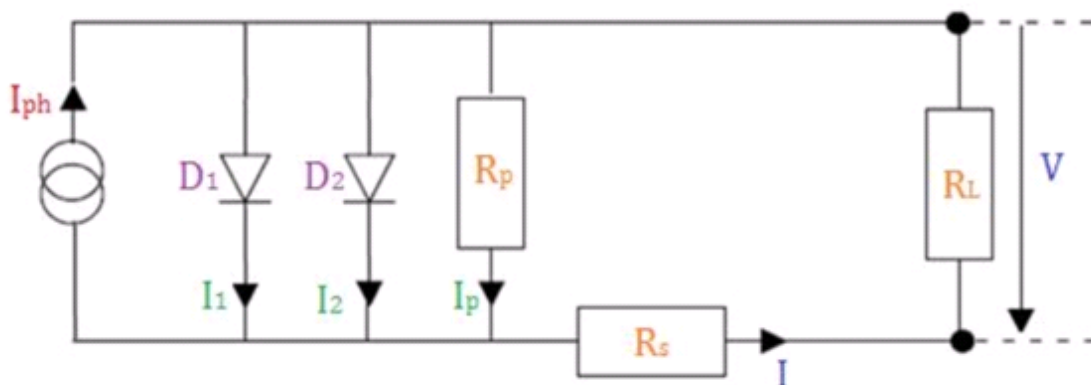


Figure 1. 11 Schéma équivalent d'une cellule photovoltaïque.

L'équation de courant s'écrit :

$$I = I_1 + I_2 + I_p - I_{ph}$$

$$I_{ph}I = I_{01} \left(e^{\frac{q(V-IR_s)}{n_1 kT}} - 1 \right) + I_{02} \left(e^{\frac{q(V-IR_s)}{n_2 kT}} - 1 \right) + \frac{V - IR_s}{R_p} - I_{ph} \quad (1.34)$$

R_s la résistance série modélise la résistance des différentes couches de la cellule (émetteur, base et contacts métalliques). Pour limiter l'impact de cette résistance sur le courant de la cellule, il faut que sa valeur soit la plus faible possible. Ceci peut être réalisé en optimisant la surface de contact métal/semi-conducteur et en réduisant la résistivité du matériau utilisé. Cependant, un dopage trop élevé entraîne une augmentation de la recombinaison des porteurs.

R_p la résistance parallèle (de court-circuit) traduit quant à elle, la présence d'un courant de fuite à travers l'émetteur, causé par un défaut. Ceci est le cas lorsque la diffusion des contacts métalliques à haute température perfore l'émetteur. Elle peut être due à un court-circuit sur les bords de la cellule. Cette valeur devra être la plus élevée possible.

La première diode qui a un facteur d'idéalité $n_1 \approx 1$ correspond au courant de diffusion dans la base et l'émetteur de la cellule. I_{01} C'est le courant de saturation de ce phénomène.

I_2 est le courant de génération-recombinaison ou d'effet tunnel dans la zone de charge d'espace, avec I_{02} le courant de saturation de ce phénomène et $n_2 \approx 2$ le facteur d'idéalité de la deuxième diode.

1.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons rappelé quelques notions sur les semi-conducteurs, le rayonnement solaire et les mécanismes induits lors de son interaction avec les matériaux semi-conducteurs, comme l'absorption. Nous avons ensuite expliqué le fonctionnement des cellules photovoltaïques et leurs caractéristiques

principales ainsi que les paramètres limitant leur rendement de conversion avec une modélisation de cette dernière par un circuit électrique.

Le chapitre qui va suivre présentera quelques propriétés physiques de la structure $Cd_{1-x}Zn_xTe/CdTe$.

2.1 Introduction

Les composés binaires et ternaires à base des semi-conducteurs II-VI, présentent des caractéristiques très importantes leur permettant d'être des candidats concurrentiels du silicium et des composés III-V pour la conversion photovoltaïque et l'optoélectronique dans le visible. Ils forment une classe de matériaux dont le gap varie de 3.84 eV (*ZnS*) à 1.5 eV (*CdTe*) à la température ambiante. Leurs attraits résident dans leurs forts coefficients d'absorption et la large bande interdite (Figure 2.1) ainsi que leurs faibles coûts de production [22].

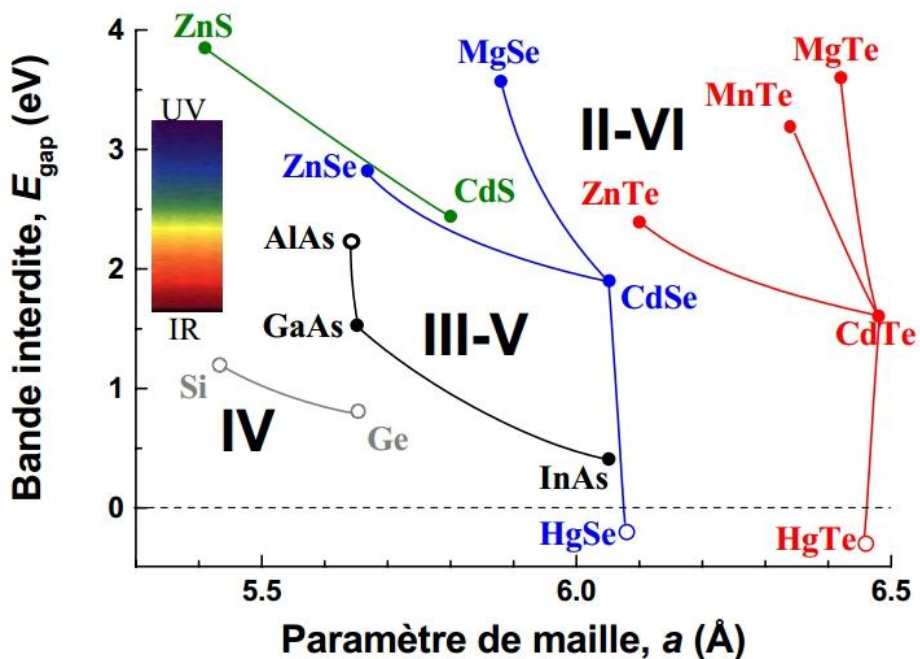


Figure 2. 1 Energie de bande interdite en fonction du paramètre de maille cubique pour différents binaires II-VI.

Les semi-conducteurs II-VI sont constitués par l'association des atomes de la colonne II avec ceux de la colonne VI de la classification périodique de Mendeleïev (Tableau 2.1) [23].

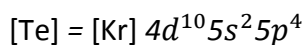
		III	IV	V	VI	VII
		B	C	N	O	F
I	II	Al	Si	P	S	Cl
Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br
Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I
Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At

Tableau 2. 1 Extrait de la classification périodique des éléments [23].

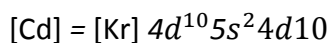
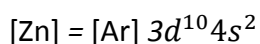
La dernière orbitale *s* des atomes du groupe II ne possède que deux électrons; tandis que la couche électronique périphérique des atomes du groupe VI renferme six électrons de valence dont deux sur l'orbitale *s* et quatre sur l'orbitale *p*. Un matériau II-VI comportera donc des liaisons hybrides de type sp^3 où chaque anion se retrouve dans un environnement tétraédrique d'un cation, et inversement. Ces liaisons ont un caractère intermédiaire entre la liaison ionique et la liaison covalente [24].

La configuration électronique est la suivante :

- Un anion : (élément II)



- Un cation : (élément VI)



Dans notre travail on s'intéresse essentiellement à des composés à base de cadmium et de tellure qui seront utilisés pour notre structure. L'intérêt de ces composés est encore renforcé par la possibilité de réaliser des alliages par la combinaison d'éléments appartenant à ces colonnes II et VI. On obtient ainsi l'alliage ternaire de type $Cd_{1-x}Zn_xTe$.

Ce chapitre présente la structure cristalline, la structure de bande de l'alliage $Cd_{1-x}Zn_xTe$, les contraintes soumises lors de l'épitaxie d'un matériau sur un substrat, la valeur critique d'une croissance contrainte et également le coefficient d'absorption.

2.2 Propriétés structurales

Les semi-conducteurs II-VI cristallisent dans la structure cubique, précisément la structure Zinc blende, aussi appelée sphalérite. La maille de cette structure se décompose en deux réseaux cubiques faces centrées, décalés d'un quart de la grande diagonale du cube du réseau [25].

Les nœuds d'un des réseaux cubiques à faces centrées sont occupés par les atomes de cadmium/Zinc tandis que ceux de l'autre réseau sont occupés par les atomes de tellure. Ainsi, autour de chaque atome d'une espèce, quatre atomes de l'autre espèce sont disposés aux sommets d'un tétraèdre régulier. Le réseau cristallin de la structure zinc-blende est schématisé dans la figure (2.2) [26].

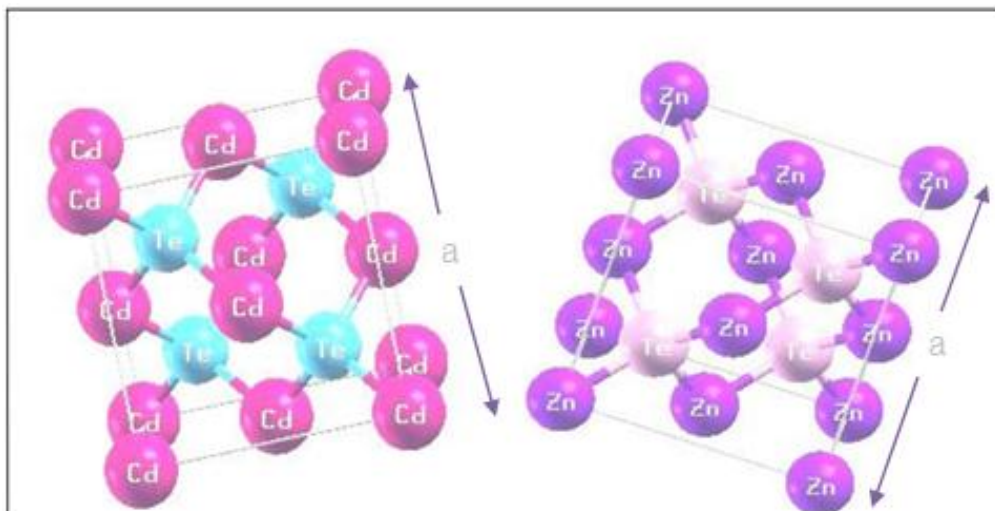


Figure 2. 2 La structure cristalline du $CdTe$ et $ZnTe$ (Zinc blende).

Le paramètre de maille défini comme étant la distance séparant deux mailles consécutives est noté « a » sur la figure (2.2), il dépend de la nature des éléments chimiques mis en jeu. La maille cristalline est d'autant plus grande que le numéro atomique des éléments constituants est grand.

Le paramètre de maille « a » d'un alliage $A_{(1-x)}B_xC$ est calculé par la loi de Végard donné par :

$$a_{CdZnTe} = xa_{ZnTe} + (1 - x)a_{CdTe} \quad (2.1)$$

Où a_{ZnTe} et a_{CdTe} sont respectivement les paramètres cristallographiques des deux binaires $ZnTe$ et $CdTe$ et sont rapportés dans le tableau (2.2) [27].

	CdTe	ZnTe
Paramètre de maille a (Å)	6.4810	6.1037

Tableau2. 2 Paramètre de maille des matériaux binaires $CdTe$ et $Zinc$.

2.3 Structure de bande

Les extremums de la structure de bande des semi-conducteurs II-VI sont situés au centre de la zone de Brillouin. Les semi-conducteurs II-VI ont une bande de conduction (B_C) qui est due à l'orbitale s de l'atome de la colonne II et une bande de valence (B_V) qui est due à l'orbitale p de l'atome de la colonne VI. La prise en compte du spin transforme la symétrie Γ_1 de la bande de conduction au centre de la zone de Brillouin en Γ_6 , deux fois dégénérée, et celle Γ_5 de la bande de valence en Γ_7 et Γ_8 , respectivement deux et quatre fois dégénérées. Les deux bandes Γ_7 et Γ_8 sont séparées d'énergie Δ_{so} . Ce sont finalement les bandes Γ_6 et Γ_8 qui bordent la bande interdite. Quant à la bande de valence, Γ_8 elle se compose de deux bandes de courbure différentes, d'où deux masses effectives: une lourde et une légère. La bande de forte courbure est celle des trous dits légers (lh: light holes), l'autre est celle des trous lourds (hh: heavy-holes) [24] (figure 2.3).

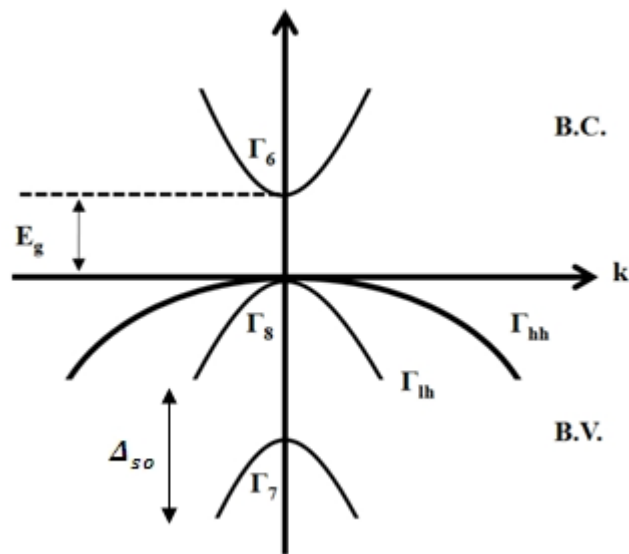


Figure2. 3 Schéma simplifié de la structure de bande du semi-conducteur à Gap direct.

Le Gap est direct car le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence correspondent au même vecteur d'onde \vec{k} . La transition d'énergie minimale entre ces deux bandes peut avoir lieu sans changement de vecteur d'onde, [28].

2.3.1 Gap direct et Gap indirect

Pour un cristal semi-conducteur, le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont caractérisés par une énergie E et un vecteur d'onde \vec{k} . Dans l'espace réciproque, si ce maximum et ce minimum correspondent à la même valeur de \vec{k} : on dit que le semi-conducteur est à Gap direct. Si au contraire, ce maximum et ce minimum correspondent à des valeurs de \vec{k} différentes : on dit que le semi-conducteur est à Gap indirect; c'est le cas du silicium et du germanium. La transition d'énergie minimale entre la B_v et B_c peut avoir lieu sans changement de vecteur d'onde dans les semi-conducteurs à Gap direct, ce qui permet l'absorption et l'émission de lumière de façon beaucoup plus efficace que dans les matériaux à Gap indirect [27].

Les transitions inter bandes dans un semi-conducteur sont classifiées en transitions directes (figure2.4.a) et indirectes (avec intervention d'un phonon), (figure2.4.b) :

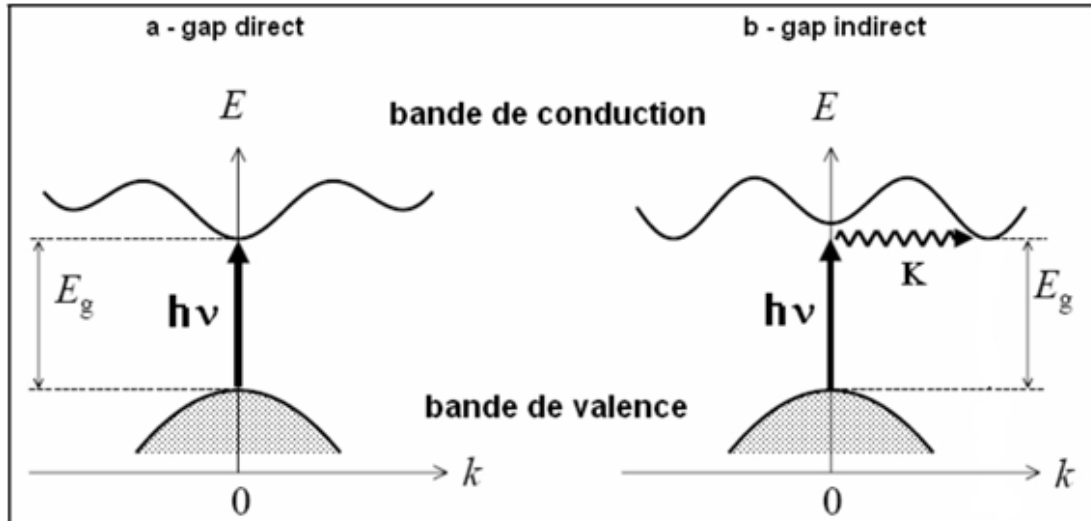


Figure2. 4 Transitions inter bandes a) directe b) indirecte.

2.3.2 Hétérojonction (semi-conducteur/semi-conducteur)

Une hétérojonction est obtenue lorsque deux matériaux semi-conducteurs d'énergies de Gap différentes sont associés. Sa réalisation s'effectue par croissance cristalline d'un matériau sur l'autre et exige que les deux matériaux aient des propriétés cristallines voisines [29].

a Diagramme des bandes d'énergie

Au contact de deux semi-conducteurs différents, il apparait une barrière de potentiel à l'interface, donnée par :

$$E_b = e(\chi_1 - \chi_2) \quad (2.2)$$

Où $e\chi_1$ et $e\chi_2$ sont les affinités électroniques des deux semi-conducteurs. En l'absence de tout contact, la figure (2.5) montre les diagrammes énergétiques dans chacun des semi-conducteurs. E_{g1} et E_{g2} représentent les Gaps des semi-conducteur

1 et semi-conducteur 2, et les dopages sont représentés par la distance $e\phi_{F1}$ et $e\phi_{F2}$ du niveau de fermi à la bande de conduction.

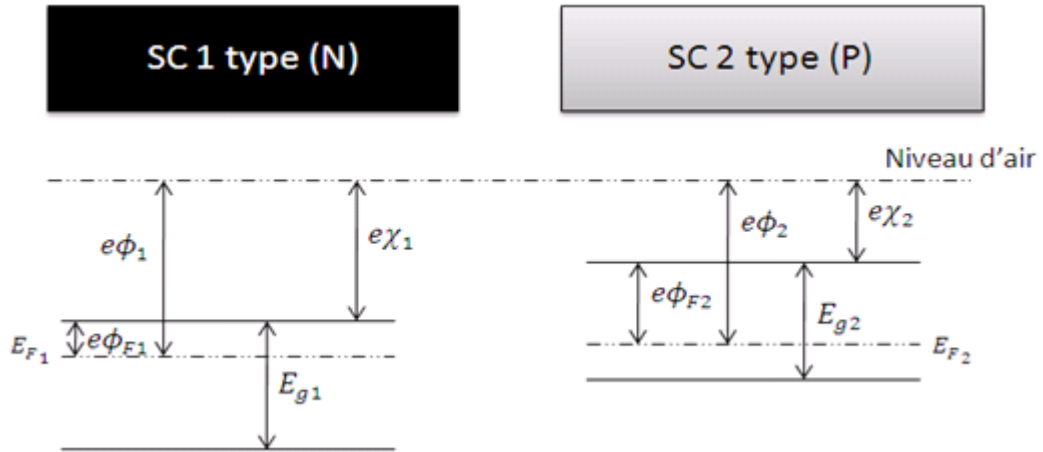


Figure2. 5 Diagrammes énergétiques dans chacun des semi-conducteurs.

Pour le calcul de l'affinité électronique d'un alliage $A_{(1-x)}B_xC$ on utilise à partir de la loi de Végard la formule suivante :

$$e\chi_{A_{(1-x)}B_xC} = e\chi_{BC} + (e\chi_{AC} - e\chi_{BC}).x \quad (2.3)$$

D'où les affinités électroniques des binaires $CdTe$ et $ZnTe$ sont représentées dans le tableau (2.3).

SC	CdTe	ZnTe
$e\chi_e$ (eV)	4.28	3.5

Tableau2. 3 Affinités électroniques $e\chi_e$ de $CdTe$ et $ZnTe$ [30].

On met les deux semi-conducteurs en contact, et on étudie le diagramme énergétique d'une part loin de la jonction et d'autre part au voisinage de la jonction.

b Diagramme énergétique loin de la jonction

Lorsque les deux semi-conducteurs sont en contact, ils échangent des électrons de manière à aligner leurs niveaux de Fermi. Cet échange se fait au voisinage de la jonction, et fait apparaître une zone de charge d'espace à laquelle est associée une barrière de potentiel qui arrête la diffusion des électrons, comme dans la jonction PN . Loin de cette jonction, dans la région neutre de chaque semi-conducteur le diagramme énergétique est représenté sur la figure (2.6).

La tension de diffusion V_D est donnée par :

$$V_D = \phi_1 - \phi_2 \tag{2.4}$$

Avec :

$e\phi_1$ et $e\phi_2$ sont les travaux de sortie du semi-conducteur 1 et du semi-conducteur 2 respectivement. Comme l'affinité électronique, le calcul du travail de sortie de $Cd_{(1-x)}Zn_xTe$ se fait par la loi de Vegard.

Les travaux de sorties des deux binaires $CdTe$ et $ZnTe$ sont représentés dans le tableau (2.4).

SC	CdTe	ZnTe
$e\phi$ (eV)	5.73	5.76

Tableau2. 4 Travail de sortie $e\phi$ de $CdTe$ et $ZnTe$ [30].

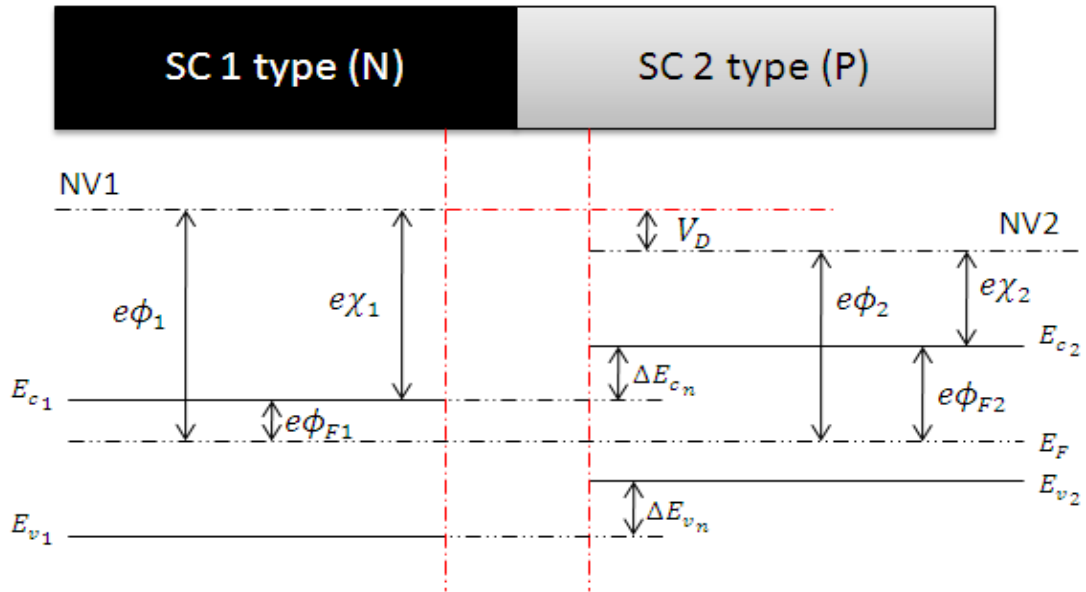


Figure 2. 6 Diagramme énergétique loin de l'interface de contact.

La différence de densité d'états et le dopage des semi-conducteurs entraînent un décalage des bandes de conduction dans les deux semi-conducteurs. On symbolise cette différence des bandes d'énergie de conduction dans les régions neutres par ΔE_{c_n} :

$$\Delta E_{c_n} = E_{c2} - E_{c1} = e(\phi_{F2} - \phi_{F1}) \quad (2.5)$$

Avec :

$$\phi_{F2} = \phi_2 - \chi_2 \quad (2.6)$$

et

$$\phi_{F1} = \phi_1 - \chi_1 \quad (2.7)$$

La différence d'énergie des bandes de valence est donnée par :

$$\Delta E_{v_n} = \Delta E_{c_n} - \Delta E_g = e(\phi_{F2} - \phi_{F1}) - \Delta E_g \quad (2.8)$$

ΔE_g : est la différence entre les Gaps des deux semi-conducteurs 1 et 2 donnée par :

$$\Delta E_g = E_{g_2} - E_{g_1} \quad (2.9)$$

Dans une hétérojonction ΔE_{cn} et ΔE_{vn} sont en fonction, d'une part des dopages respectifs et d'autre part des paramètres intrinsèques de chacun des semi-conducteurs. Remplaçons les équations (2.6) et (2.7) dans les équations (2.5) et (2.8), on trouve :

$$\Delta E_{cn} = \Delta E_{ci} - eV_D \quad (2.10)$$

$$\Delta E_{vn} = \Delta E_{vi} - eV_D \quad (2.11)$$

Avec :

ΔE_{ci} et ΔE_{vi} définissant les propriétés intrinsèques des semi-conducteurs

$$\Delta E_{ci} = -e(\chi_2 - \chi_1) \quad (2.12)$$

$$\Delta E_{vi} = -(\Delta E_g + e(\chi_2 - \chi_1)) \quad (2.13)$$

De (2.10) et (2.11) on déduit ΔE_g

$$\Delta E_g = \Delta E_{cn} - \Delta E_{vn} = \Delta E_{ci} - \Delta E_{vi} \quad (2.14)$$

c Diagramme énergétique au voisinage de la jonction

Lorsque les travaux de sorties des semi-conducteurs sont différents, les électrons diffusent du semi-conducteur à faible travail de sortie vers l'autre. Et une zone de charge d'espace s'établit au voisinage de l'interface de contact. La figure (2.7) montre le diagramme énergétique au voisinage de l'interface de l'hétérojonction.

La différence de potentiel qui existe entre les deux régions neutres est :

$$V_D = V_2 - V_1 \quad (2.15)$$

Avec:

V_1 et V_2 sont les potentiels des régions neutres dans le semi-conducteur1 et le semi-conducteur 2 respectivement.

On remplace l'équation (2.15) dans (2.10) et (2.11) on trouve :

$$\Delta E_{cn} = \Delta E_{ci} - e(V_2 - V_1) \quad (2.16)$$

$$\Delta E_{vn} = \Delta E_{vi} - e(V_2 - V_1) \quad (2.17)$$

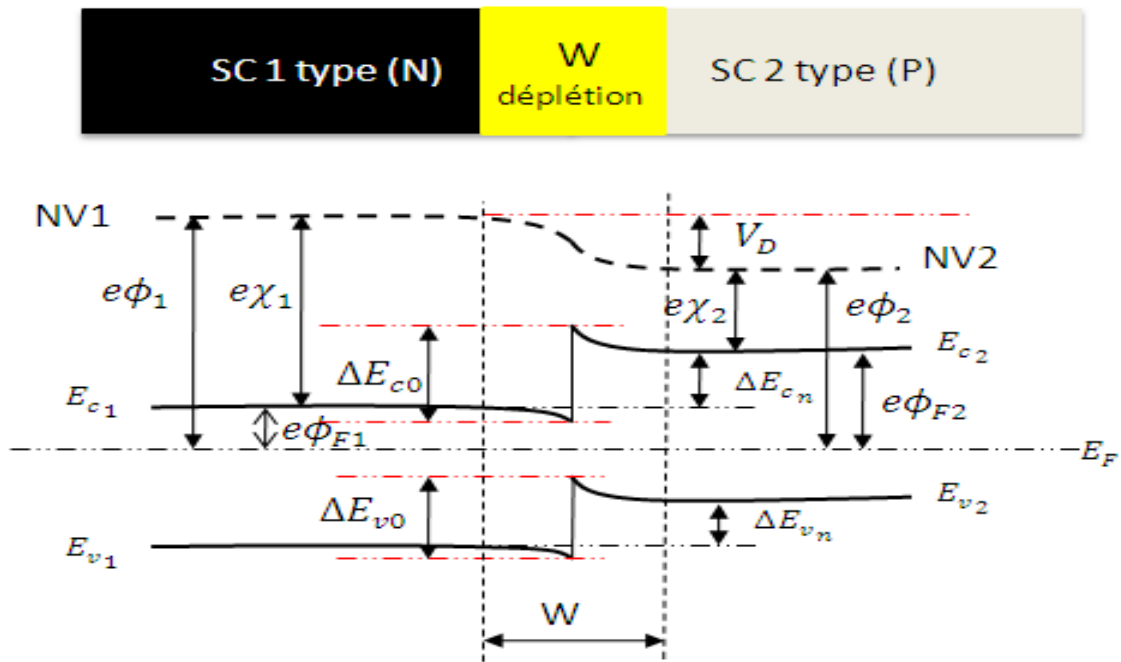


Figure2. 7 Diagramme énergétique au voisinage de la jonction $\chi_1 > \chi_2$.

En raison de la continuité du potentiel à l'interface de contact $V_2 = V_1$

$$\Delta E_c(x = 0) = \Delta E_{c0} = \Delta E_{ci} \quad (2.18)$$

$$\Delta E_v(x = 0) = \Delta E_{v0} = \Delta E_{vi} \quad (2.19)$$

Les électrons diffusent du semi-conducteur 2 vers le semi-conducteur 1 et vice-versa pour les trous, car $\phi_1 > \phi_2$:

Dans le semi-conducteur 1 (type N) la charge d'espace est due à une augmentation de la densité d'électrons au voisinage de l'interface.

Dans le semi-conducteur 2 (type P) le passage des trous augmente la densité des trous au voisinage de l'interface.

d La zone de déplétion

On peut calculer les largeurs des zones de déplétion (w_n, w_p) via les conditions de continuité du vecteur de déplacement à l'interface et la continuité du potentiel en $x=0$ (l'interface), les largeurs w_n et w_p sont données par :

$$w_n = \sqrt{\frac{2N_{a2}\varepsilon_1\varepsilon_2}{eN_{d1}(\varepsilon_1N_{d1} + \varepsilon_2N_{a2})}} \sqrt{V_D} \quad (2.20)$$

$$w_p = \sqrt{\frac{2N_{d1}\varepsilon_1\varepsilon_2}{eN_{a2}(\varepsilon_1N_{d1} + \varepsilon_2N_{a2})}} \sqrt{V_D} \quad (2.21)$$

La somme des deux équations (2.20) et (2.21) donne la largeur totale de la zone de déplétion w :

$$w = \sqrt{\frac{2\varepsilon_1\varepsilon_2(N_{d1} + N_{a2})^2}{eN_{d1}N_{a2}(\varepsilon_1N_{d1} + \varepsilon_2N_{a2})}} \sqrt{V_D} \quad (2.22)$$

Dans le cas où la densité des donneurs dans le semi-conducteur type N, est supérieure à la densité d'accepteurs dans le semi-conducteur type P, la largeur de la zone de déplétion qui se développe dans le semi-conducteur type P w_p est supérieure à celle qui se développe dans le semi-conducteur type N [31].

D'où N_{a1} les donneurs dans le semi-conducteur 1 et N_{a2} les accepteurs dans le semi-conducteur 2.

2.4 Notion de couche contrainte et épaisseur critique

2.4.1 La contrainte

Lors de la croissance épitaxiale se pose le problème des contraintes dues au désaccord de maille entre la couche déposée et le substrat. Les couches épitaxiées croissent de façon «pseudomorphique» initialement avant de se relaxer plastiquement ou élastiquement. En effet, dans une croissance «pseudomorphique» sur un substrat standard, le substrat est trop épais pour pouvoir se déformer de façon significative, la maille de la couche en croissance épitaxiale se conforme donc, dans le plan de surface, à la maille du substrat $a_{//} = a_s$ et se déforme élastiquement en conséquence dans la direction perpendiculaire a_{\perp} (figure 2.8) selon que le paramètre de maille de la couche est plus petit ou plus grand que celui du substrat la déformation est soit un allongement « couche en tension » soit un rétrécissement « couche en compression » [32].

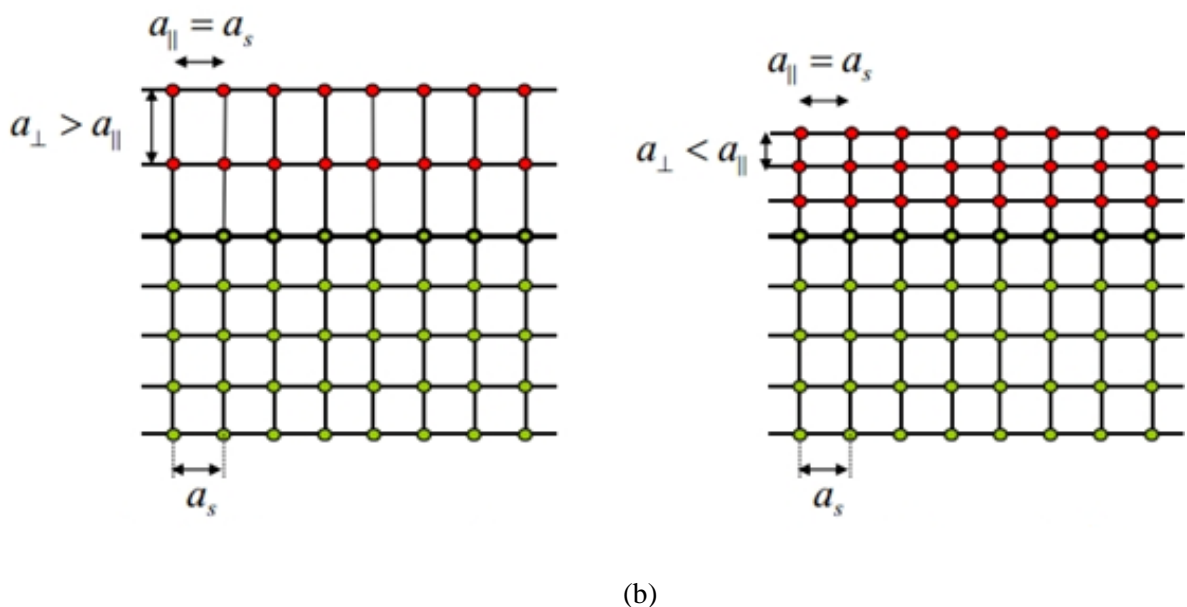


Figure 2. 8 Couche contrainte, (a) en compression ($a_{\text{couche}} > a_{\text{substrat}}$) (b) en tension ($a_{\text{couche}} < a_{\text{substrat}}$).

2.4.2 Définition de l'épaisseur critique

L'épaisseur au delà de laquelle la couche épitaxiée commence à relaxer est appelée épaisseur critique h_c . Cette épaisseur critique dépend des propriétés mécaniques des matériaux (coefficients élastiques C_{ij}), ainsi que du degré de désaccord paramétrique Δ_a (équation 2.23) entre le substrat et la couche épitaxiée. Si l'épaisseur de la couche épitaxiée dépasse la valeur de l'épaisseur critique, les mailles ne subissent plus les contraintes mécaniques imposées par le substrat et le paramètre de maille atteint celui du matériau massif. Le réseau est totalement relaxé [33].

$$\Delta_a = \frac{a_{epit} - a_{sub}}{a_{epit}} \quad (2.23)$$

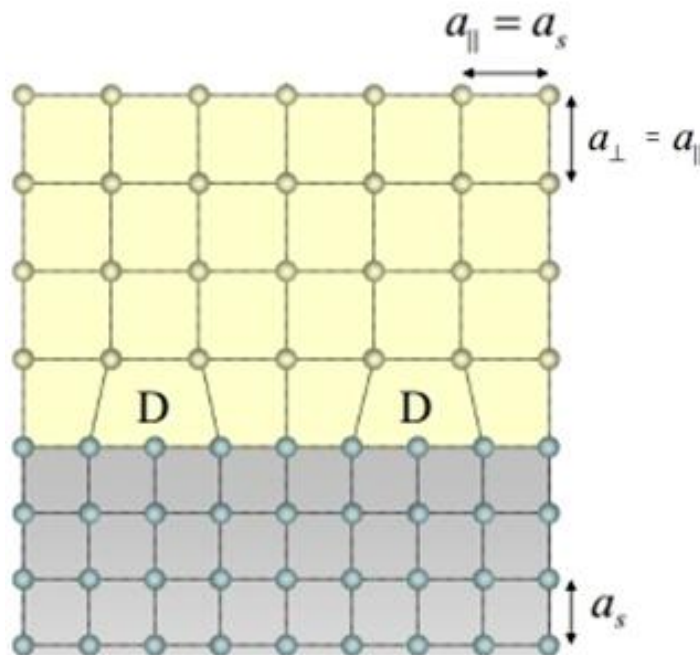


Figure2. 9 Relaxation des contraintes de la couche épitaxiée par génération de dislocations à l'interface.

Pour calculer l'épaisseur critique de notre système $Cd_{(1-x)}Zn_xTe/CdTe$, on utilise le modèle le plus classique, celui de K. Koksai et B. Gonul [34], qui traite le cas d'un matériau faiblement désaccordé par rapport au substrat (désaccord de maille

<2%). Il définit l'épaisseur critique comme l'épaisseur à partir de laquelle une dislocation initialement présente à l'interface de contact se propage latéralement sous l'effet du champ de contrainte. La valeur de l'épaisseur critique h_c qui en résulte dans le cas d'un matériau de structure sphalérite (blende de zinc) épitaxié sur la surface (001) est donnée par l'équation suivante [34] :

$$h_c = \frac{a_{epit}}{k \cdot \sqrt{2} \cdot \pi \cdot \Delta_a} \times \frac{1 - (0.25 \cdot \gamma)}{(1 + \gamma)} \times \ln \left(\frac{h_c \cdot \sqrt{2}}{a_{epit}} + 1 \right) \quad (2.24)$$

a_{epit} : Paramètre de maille de la couche épitaxiée.

Δ_a : Désaccord paramétrique.

γ : Coefficient de Poisson donné par :

$$\gamma = \frac{C_{12}}{C_{11} + C_{12}} \quad (2.25)$$

C_{ij} : Les coefficients élastiques (cm^{-2}).

k : est un coefficient qui prend les valeurs suivantes selon le type de la structure.

Structure	Couche unique	Puits quantique	Super réseau
Valeur de k	4	2	1

2.5 Effet de la contrainte sur le Gap

Pour la description de l'effet de la contrainte sur la structure de bande nous avons utilisé le modèle de Van et Walle et utilisé le formalisme de Krijin [33]. Les deux composantes parallèle et perpendiculaire du tenseur de la déformation peuvent être définies de la manière suivante :

$$\varepsilon_{\parallel} = \frac{a_{\parallel} - a}{a} \quad (2.26)$$

$$\varepsilon_{\perp} = \frac{a_{\perp} - a}{a} \quad (2.27)$$

Pour une couche totalement contrainte

$$a_{\parallel} = a_{sub} \quad (2.28)$$

$$\varepsilon_{\perp} = -2 \times \frac{C_{12}}{C_{11}} \times \varepsilon_{\parallel} \quad (2.29)$$

L'effet de la contrainte bi-axiale sur la structure de bandes de la couche épitaxiée est illustré sur la figure (2.10) Cette figure présente la structure de bandes d'un semi-conducteur à Gap direct dans les trois cas possibles, non contraint, contraint en compression et finalement contraint en tension.

En absence de contrainte, les bandes de trous lourds et de trous légers sont isotropes et dégénérées au centre de la zone de Brillouin, et la bande de trous spin-splittée est située à une énergie Δ_0 en dessous de ces deux bandes. Le centre de gravité de la bande de valence d'énergie moyenne $E_{V,moy}$ se trouve par conséquent à $\frac{\Delta_0}{3}$ au dessous du haut de la bande de valence en $k=0$ (figure 2.10.a).

$$E_{V,moy} = \frac{E_{HH} + E_{LH} + \Delta_0}{3} \quad (2.30)$$

E_{HH} : Energie de la bande de trous lourds.

E_{LH} : Energie de la bande de trous légers.

Δ_0 : Energie de décalage des bandes des trous spin-splittée.

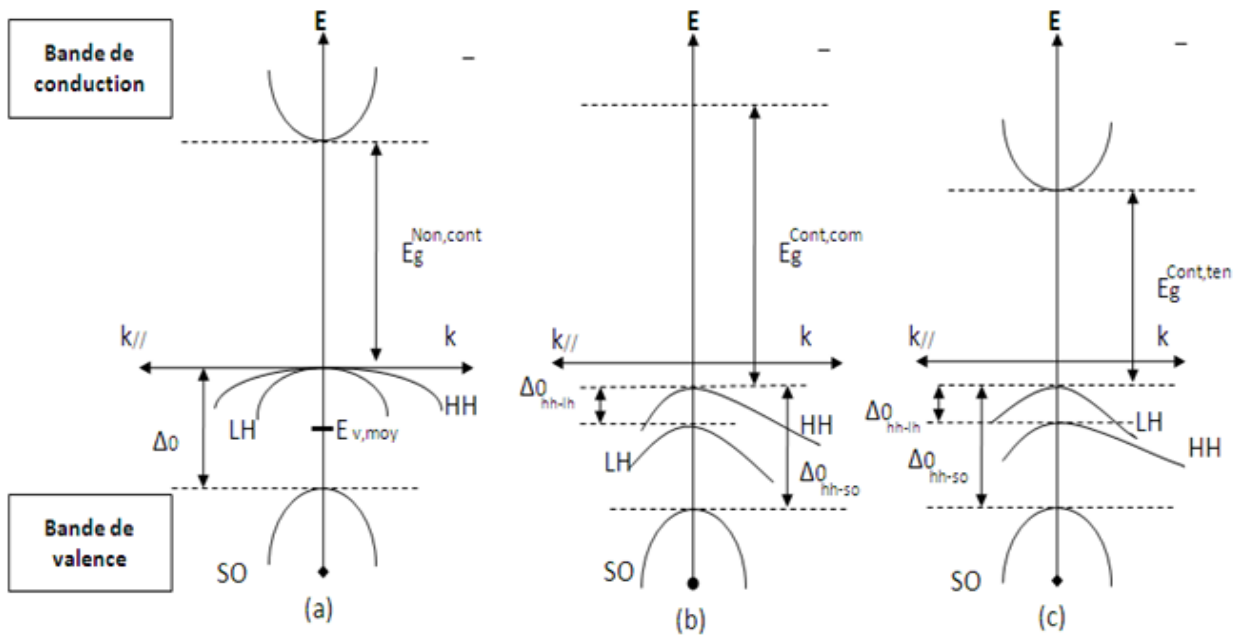


Figure 2. 10 Structure de bande d'un semi-conducteur à Gap directe a) Non contraint b) Contraint en compression c) Contraint en tension.

L'effet de la contrainte sur les bandes de valence et de conduction peut être décomposé en deux parties :

La composante hydrostatique, liée à la déformation selon l'axe de croissance, provoque un décalage du centre de gravité de la bande de valence ainsi que le centre de gravité de la bande de conduction.

La contrainte de cisaillement, lève la dégénérescence des états énergétiques des trous lourds et des trous légers en $k = 0$ (typiquement d'une valeur Δ_{hh-lh} de l'ordre de 60-80 meV pour un désaccord paramétrique de 1% [33]).

Pour une couche épitaxiée soumise à une contrainte bi-axiale de compression, la composante hydrostatique augmente l'écart entre la bande de valence et la bande de conduction, et la contrainte de cisaillement rend les bandes de valence fortement anisotropes [33] ; la bande de plus haute énergie devient lourde selon k_{\perp} et légère selon k_{\parallel} (bande HH). La bande d'énergie inférieure devient elle légère selon k_{\perp} et lourde selon k_{\parallel} (bande LH) (figure 2.10.b).

Si la couche est soumise à une contrainte bi-axiale de tension (figure 2.10.c), le Gap moyen diminue et les bandes de valences sont inversées par rapport à celles d'une couche en compression ; la bande de plus haute énergie (bande LH) restant légère selon k_{\perp} et lourde selon k_{\parallel} .

Les décalages énergétiques des centres de gravité de la bande de valence et de la bande de conduction en $K = 0$ induits par la contrainte hydrostatique, varient proportionnellement à la contrainte [33]:

$$\Delta E_{V,moy}^{hyd} = a_v(2\varepsilon_{\parallel} + \varepsilon_{\perp}) \quad (2.31)$$

$$\Delta E_c^{hyd} = a_c(2\varepsilon_{\parallel} + \varepsilon_{\perp}) \quad (2.32)$$

Avec a_c et a_v les potentiels hydrostatiques de déformation pour la bande de conduction et la bande de valence respectivement.

Les décalages énergétiques induits par la contrainte de cisaillement dans chacune des bandes constituant la bande de valence sont les suivants, dans le cas d'une croissance sur substrat [30].

$$\Delta E_{hh}^{cisa} = -\frac{1}{2} \times \delta E^{cisa} \quad (2.33)$$

$$\Delta E_{lh}^{cisa} = -\frac{1}{2} \Delta_0 + \frac{1}{4} \delta E^{cisa} + \frac{1}{2} \cdot \sqrt{\Delta_0^2 + \Delta_0 \delta E^{cisa} + \frac{9}{4} (\delta E^{cisa})^2} \quad (2.34)$$

$$\Delta E_{so}^{cisa} = -\frac{1}{2} \Delta_0 + \frac{1}{4} \delta E^{cisa} - \frac{1}{2} \cdot \sqrt{\Delta_0^2 + \Delta_0 \delta E^{cisa} + \frac{9}{4} (\delta E^{cisa})^2} \quad (2.35)$$

Avec :

$$\delta E^{cisa,100} = 2. b. (\varepsilon_{\parallel} + \varepsilon_{\perp}) \quad (2.36)$$

Où b est le potentiel de déformation tétragonale.

En prenant comme référence énergétique $E_{v,moy}$ (équation 2.30), et compte tenu des équations (2.31), (2.32), (2.33), (2.34), on peut définir l'énergie du haut de la bande de valence et l'énergie du bas de la bande de conduction.

E_v : l'énergie du haut de la bande de valence est :

$$E_v = E_{v,moy} + \frac{\Delta_0}{3} + \Delta E_{v,moy}^{hyd} + \max(\Delta E_{hh}^{cisa}, \Delta E_{lh}^{cisa}) \quad (2.37)$$

E_c : l'énergie du bas de la bande de conduction est :

$$E_c = E_{v,moy} + \frac{\Delta_0}{3} + E_g + \Delta E_c^{hyd} \quad (2.38)$$

Dans ces expressions $E_{v,moy}$, l'éclatement Spin-orbite Δ_0 et l'énergie de Gap sont relatifs au matériau non contraint. A partir des équations (2.37) et (2.38) on peut déterminer l'équation du Gap contraint E_g^{cont} :

$$E_g^{cont} = E_c - E_v = E_g + \Delta E_c^{hyd} - \Delta E_{v,moy}^{hyd} - \max(\Delta E_{hh}^{cisa}, \Delta E_{lh}^{cisa}) \quad (2.39)$$

Pour une couche soumise à une contrainte en compression la bande des trous lourds est au dessus de la bande des trous légers (figure 2.10.b) et l'on a :

$$\max(\Delta E_{hh}^{cisa}, \Delta E_{lh}^{cisa}) = \Delta E_{lh}^{cisa}$$

Donc l'équation (2.38) devient pour une couche en compression

$$E_g^{cont,com} = E_g + \Delta E_c^{hyd} - \Delta E_{v,moy}^{hyd} - \Delta E_{hh}^{cisa} \quad (2.40)$$

Et pour une couche en tension :

$$E_g^{cont,ten} = E_g + \Delta E_c^{hyd} - \Delta E_{v,moy}^{hyd} - \Delta E_{lh}^{cisa} \quad (2.41)$$

La détermination du Gap contraint nécessite la connaissance du Gap non contraint E_g et l'éclatement spin-orbite Δ_0 de la couche relaxée, les constantes élastiques C_{ij} de la couche, les potentiels de déformation hydrostatique a_c et a_v , ainsi que le potentiel de déformation tétragonale b . ces paramètres sont répertoriés en Annexe pour les composés II-VI binaires.

Dans le cas où la couche contrainte est un ternaire (exemple $A_{(1-x)}B_xC$), ces paramètres peuvent être déterminés par interpolation linéaire, sauf pour les énergies E_g et Δ_0 qui sont déterminées par l'expression suivante :

$$E_{A_{(1-x)}B_xC} = (1-x)E_{AC} + xE_{BC} - x(1-x)C_{AC-BC} \quad (2.42)$$

avec :

E : est E_g ou Δ_0 .

C_{AC-BC} : Terme de Boeing.

2.6 Effet de la température la largeur de la bande interdite

Les mesures expérimentales montrent que l'énergie du Gap varie avec la température ; ceci est expliqué par un changement du paramètre de maille. Pour déterminer cette variation, une loi physique plus précise a été proposée récemment par Pässler [27] :

$$Eg(T) = Eg(0) - \frac{SO_{ph}}{2} \left[\sqrt[2]{1 + \left(\frac{2T}{\theta}\right)^p} - 1 \right] \quad (2.43)$$

	$E_g(0^\circ K)$ (eV)	$P(-)$	$S(meV/K)$	$\Theta(^\circ K)$
<i>CdTe</i>	1.606	1.97	0.310	108
<i>ZnTe</i>	2.394	2.71	0.454	145

Tableau2. 5 Paramètres de variation du Gap [24].

Avec :

S : L'entropie.

θ_{ph} : Température des phonons.

P : Paramètre relié à la distribution des phonons.

2.7 Le coefficient d'absorption

Un photon d'énergie E absorbé par le matériau induit des transitions électroniques entre les différents états. Ainsi, pour chaque photon absorbé, un transfert d'énergie E est réalisé du faisceau lumineux incident vers le milieu absorbeur.

D'où
$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \quad (2.44)$$

Avec :

h : Constante de Plank (6.626×10^{-34} J.S)

ν : Fréquence des radiations.

c : Vitesse de la lumière.

λ : Longueur d'onde.

Pour un matériau présentant un Gap direct L'absorption est très probable du fait que cette transition électronique est seulement associée à deux particules : électron – photon. Le photon assure la conservation de l'énergie lors de la transition entre la bande de valence et la bande de conduction [35].

Cette interaction entre photon et semi-conducteur se traduit par une caractéristique essentielle du matériau dans le domaine photovoltaïque : le coefficient d'absorption [36].

Le coefficient d'absorption détermine la distance dans un matériau à partir de laquelle une longueur d'onde particulière peut pénétrer avant qu'elle ne soit absorbée. Nous classons les matériaux comme opaques, translucides et transparents conformément à leur force d'absorption [14].

Dans le cas de notre alliage $Cd_{1-x}Zn_xTe$ le Gap est direct et se traduit par la relation donnant α en fonction de $h\nu$ de la forme :

$$\alpha(h\nu) = A^* \left(h\nu - \frac{E_g}{q} \right)^{1/2} \quad (2.45)$$

Où A : Constante ($2.2 * 10^5$).

2.8 Mécanismes de conduction dans une cellule éclairée :

Les cellules solaires sont caractérisées par leurs courbes courantes tensions sous illumination $J(V)$, cette dernière nous permet de calculer la puissance maximale fournie par la cellule photovoltaïque et son rendement de conversion.

$$J(V) = J_{ph} - J_{dif} - J_{Te} \quad (2.46)$$

Avec :

J_{ph} : Courant photo-génère.

$$J_{ph} = q \times \Phi \left[1 - \frac{e^{-\alpha w}}{1 + \alpha w} \right] \times A \quad (2.47)$$

J_{Te} : Courant thermoélectronique.

$$j_{TE} = j_s \left(e^{\frac{eV}{kT}} - 1 \right) \quad (2.48)$$

J_s : Courant de saturation.

$$j_s = A^* T^2 \times e^{-\left(\frac{Eb}{kT}\right)} \quad (2.49)$$

D'où :

A^* : Constante de Richardson d'électron.

T : Température en kelvin.

Eb : Barrière de potentiel.

J_{dif} : Courant de diffusion.

$$J_{dif} = J_0 (1 - e^{Vq/kT}) \quad (2.50)$$

Avec : j_0 courant de diffusion des minoritaires.

$$J_0 = \left(\frac{qn_i^2 D_p}{N_d L_p} \right) = \left(\frac{qn_i^2 D_n}{N_a L_n} \right) \quad (2.51)$$

D'où L_p, L_n Longueurs de diffusion des trous et des électrons :

$$L_p = \sqrt{\tau_p \times D_p} \quad (2.52)$$

$$L_n = \sqrt{\tau_n \times D_n} \quad (2.53)$$

Et D_n, D_p Constantes de diffusion des électrons et des trous :

$$D_n = \mu_n \frac{KT}{q} \quad (2.54)$$

$$D_p = \mu_p \frac{KT}{q} \quad (2.55)$$

Avec τ_n et τ_p la durée de vie des électrons et des trous respectivement.

Courant de court-circuit.

$$j_{cc} = j_{ph} - j_s \quad (2.56)$$

Tension de circuit-ouvert.

$$V_{oc} = \frac{E_g}{q} - \frac{KT}{q} \ln\left(\frac{j_0}{j_{cc}}\right) \quad (2.57)$$

2.9 Conclusion

Dans ce chapitre on a présenté les différentes propriétés structurales, électroniques et optiques des alliages composés par les éléments II-VI ($CdZnTe$) et les équations qui les modélisent.

Dans le chapitre suivant et en première partie on va présenter et interpréter les résultats obtenus par simulations afin de voir l'effet de *Zinc* sur les différents paramètres d'alliage $CdZnTe$, en deuxième partie on va calculer la caractéristique courant tension pour déduire les paramètres de la cellule $CdZnTe/CdTe$ comme le FF, V_{co} et le rendement.

3.1 Introduction

Ce chapitre est consacré à l'étude et la simulation des différents paramètres sous l'outil de simulation MATLAB.

Dans un premier temps on va étudier le paramètre de maille, désaccord paramétrique entre la couche épitaxiée $Cd_{(1-x)}Zn_xTe$ et le substrat $CdTe$ et l'épaisseur critique. Ensuite on va montrer l'effet de la contrainte sur le Gap, coefficient d'absorption, caractéristique courant tension, puissance, V_{co} et FF afin de déduire la meilleure concentration en zinc qui donne le meilleur rendement.

3.2 Simulation et interprétation

3.2.1 Le paramètre de maille

Comme nous montre la figure (3.1) l'incorporation de Zinc dans la maille cristalline de $CdTe$ diminue le paramètre « a » de l'alliage $Cd_{1-x}Zn_xTe$.

On peut également calculer le désaccord de maille par la loi suivante : $\varepsilon = \frac{a_0 - a}{a_0}$, d'où a_0 est le paramètre de maille du substrat et a le paramètre de maille de la couche épitaxiée. D'après la figure (3.2) on observe toujours que $\varepsilon > 0$ quelque soit la valeur de la concentration de Zn , cela indique qu'on a une contrainte en tension pour tout l'intervalle de x .

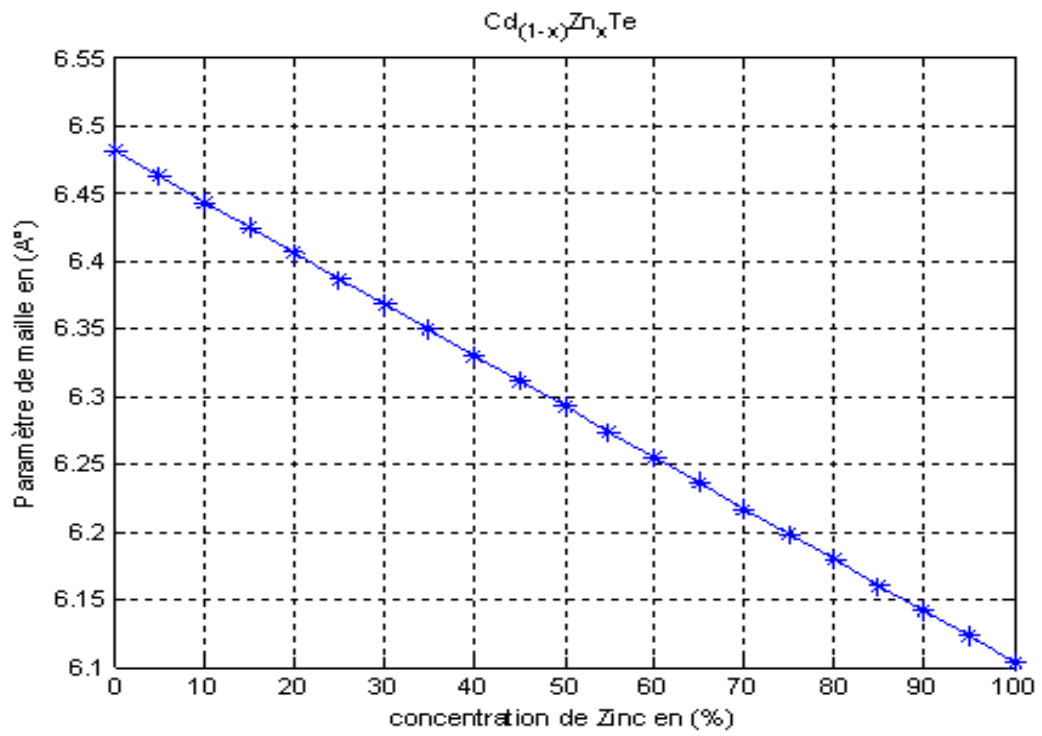


Figure3. 1 Variation du paramètre de maille de $Cd_{1-x}Zn_xTe$ en fonction de la concentration de Zinc (x).

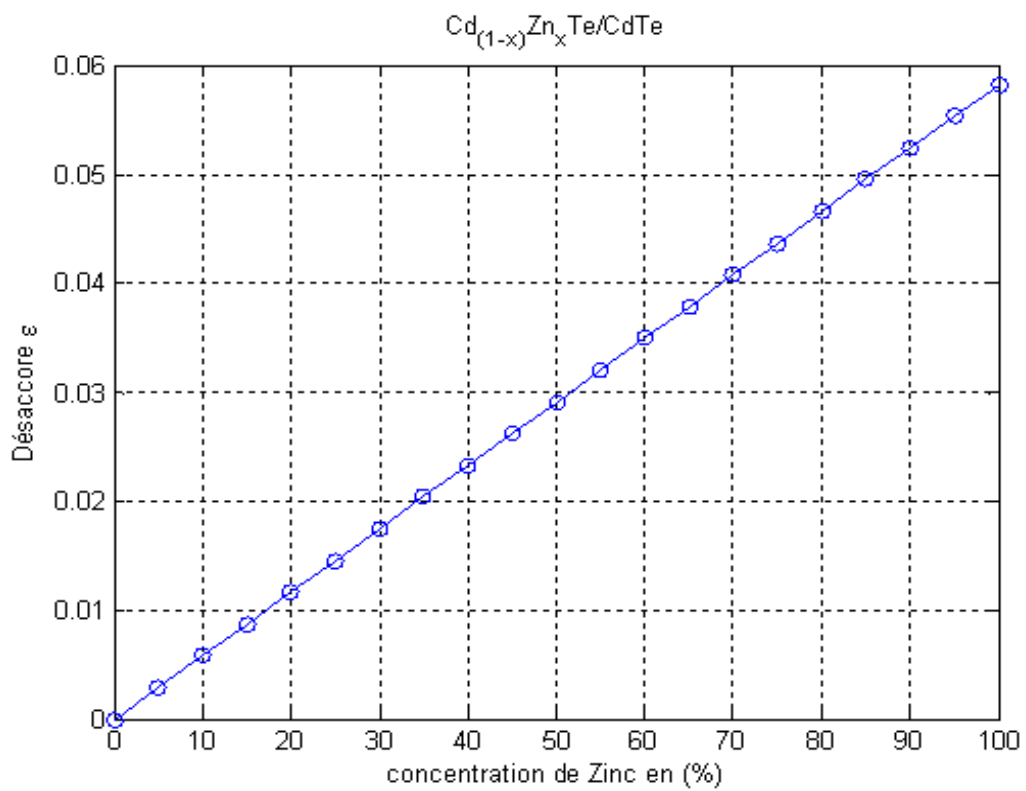


Figure3. 2 Variation du désaccord paramétrique en fonction de la concentration de Zinc de la structure $Cd_{(1-x)}Zn_xTe/CdTe$.

On notera aussi qu'un faible désaccord est obtenu pour des faibles concentrations de Zn dans le ternaire ($CdZnTe$), varie entre 0 et 30%.

3.2.2 L'épaisseur critique

La variation de l'épaisseur critique de notre système $Cd_{1-x}Zn_xTe / CdTe$ est donnée par la figure (3.3) et calculée à l'aide de l'équation (2.24) comme il est mentionné dans le chapitre précédent, il est bien clair que l'épaisseur critique est grande pour les petites concentrations de zinc car la contrainte est faible.

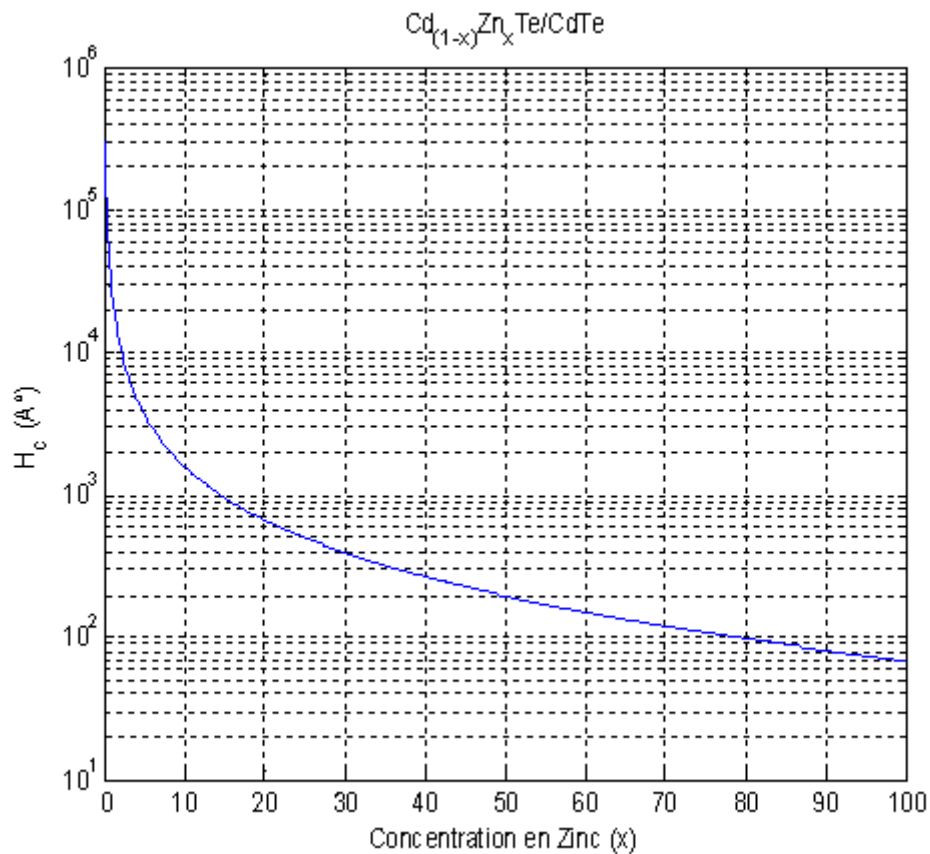


Figure 3. 3 Variation de l'épaisseur critique en fonction de la concentration de Zinc (x).

3.2.3 Le Gap non contraint

L'énergie de la bande interdite du matériau ternaire $Cd_{1-x}Zn_xTe$ est donnée par la loi quadratique en x :

$$E_g(Cd_{1-x}Zn_xTe) = E_g(CdTe) \cdot (1-x) + E_g(ZnTe) \cdot x + b \cdot x \cdot (1-x)$$

Le tracé du Gap est représenté dans la figure (3.4) pour une température $T=12^\circ K$ et $T=300^\circ K$ qui nous montre l'accroissement du Gap avec l'augmentation de la densité de Zinc, cette simulation nous montre aussi que la valeur du Gap de l'alliage $CdZnTe$ se réduit avec l'augmentation de la température.

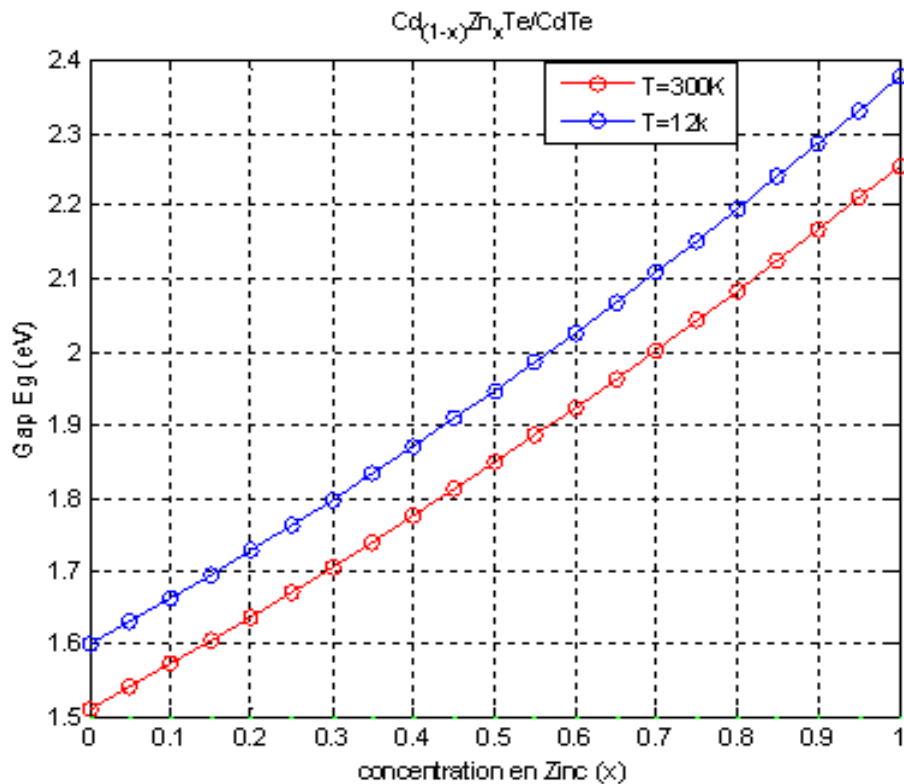


Figure3. 4 Variation de l'énergie du Gap en fonction de concentration en Zinc (x).

3.2.4 Effets de la température sur le Gap

Lorsque le cristal se dilate sous l'effet de la température le couplage diminue un peu et donc le Gap aussi. Cette diminution, voir le tracé de la figure (3.5), figure (3.6) et figure (3.7) pour $CdTe$ et $ZnTe$, et $Cd_{1-x}Zn_xTe$ suivant la relation de Pässler (2.43).

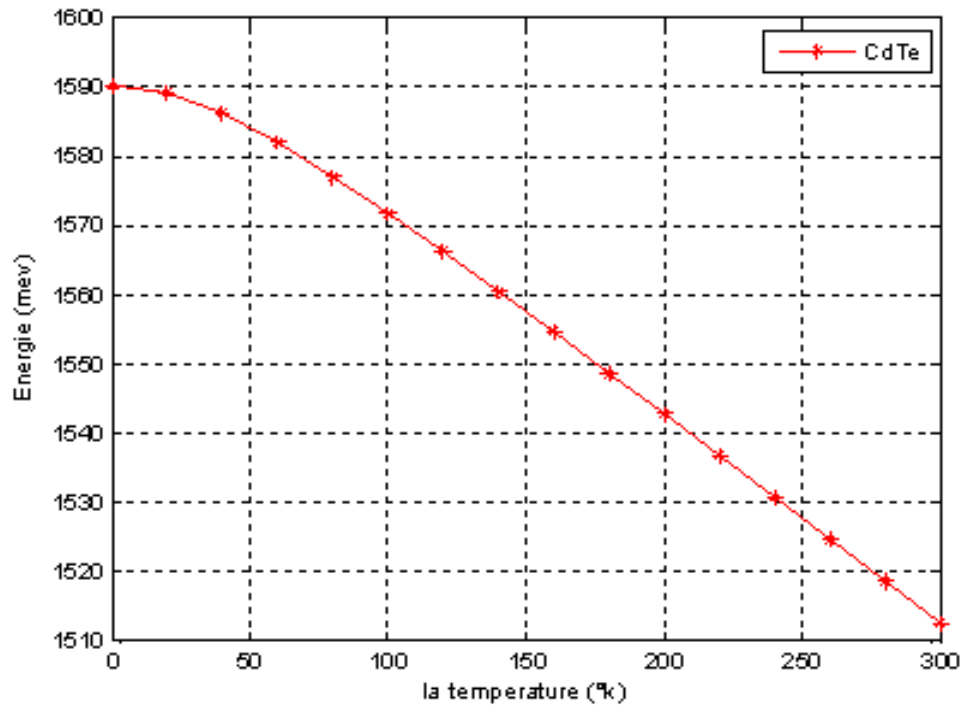


Figure3. 5 Variation de l'énergie de la bande interdite en fonction de la température pour le *CdTe*.

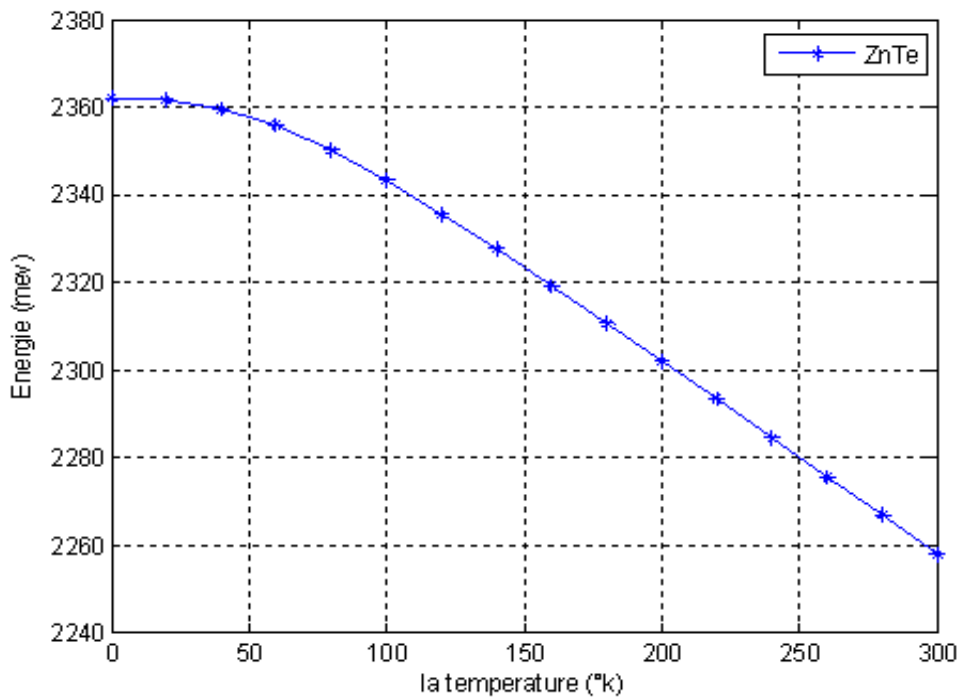


Figure3. 6 Variation de l'énergie de la bande interdite en fonction de la température pour le *ZnTe*.

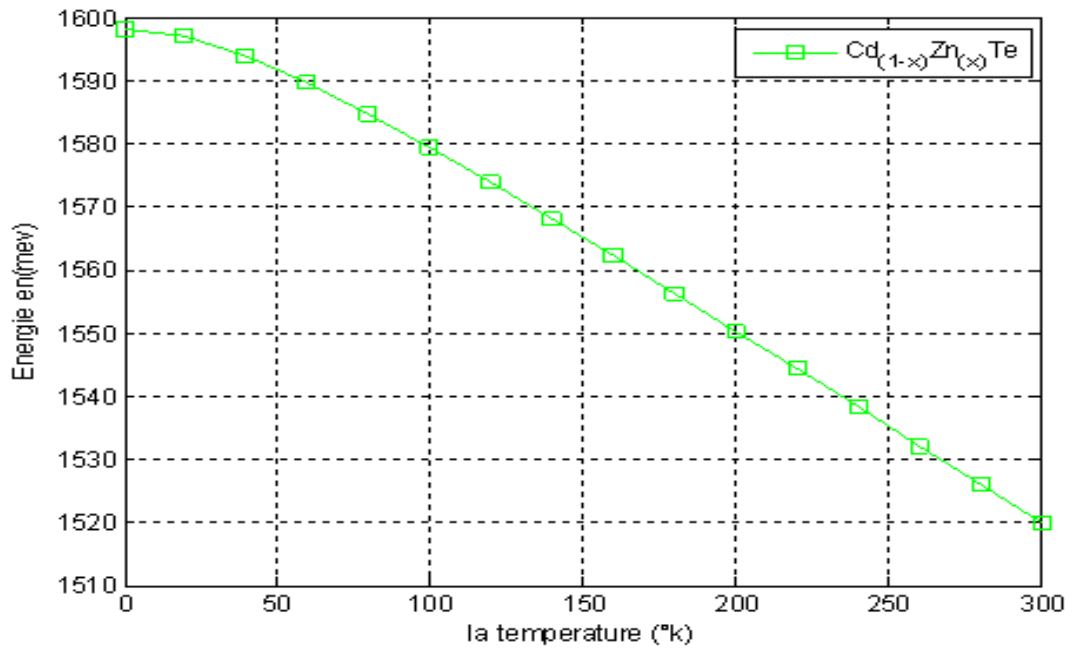


Figure 3. 7 Variation de l'énergie de la bande interdite en fonction de la température pour le $Cd_{(1-x)}Zn_xTe$.

3.2.5 Effets de la contrainte sur le Gap

Pour le système $Cd_{(1-x)}Zn_xTe/CdTe$, la figure (3.8) donne la variation de l'énergie du Gap de la couche épitaxiée $Cd_{(1-x)}Zn_xTe$ sur substrat $CdTe$ dans tout le domaine de composition. On remarque que le Gap des trous lourds est toujours supérieur à ce lui des trous légers car le ternaire est soumis à une contrainte extensive pour tout l'intervalle x .

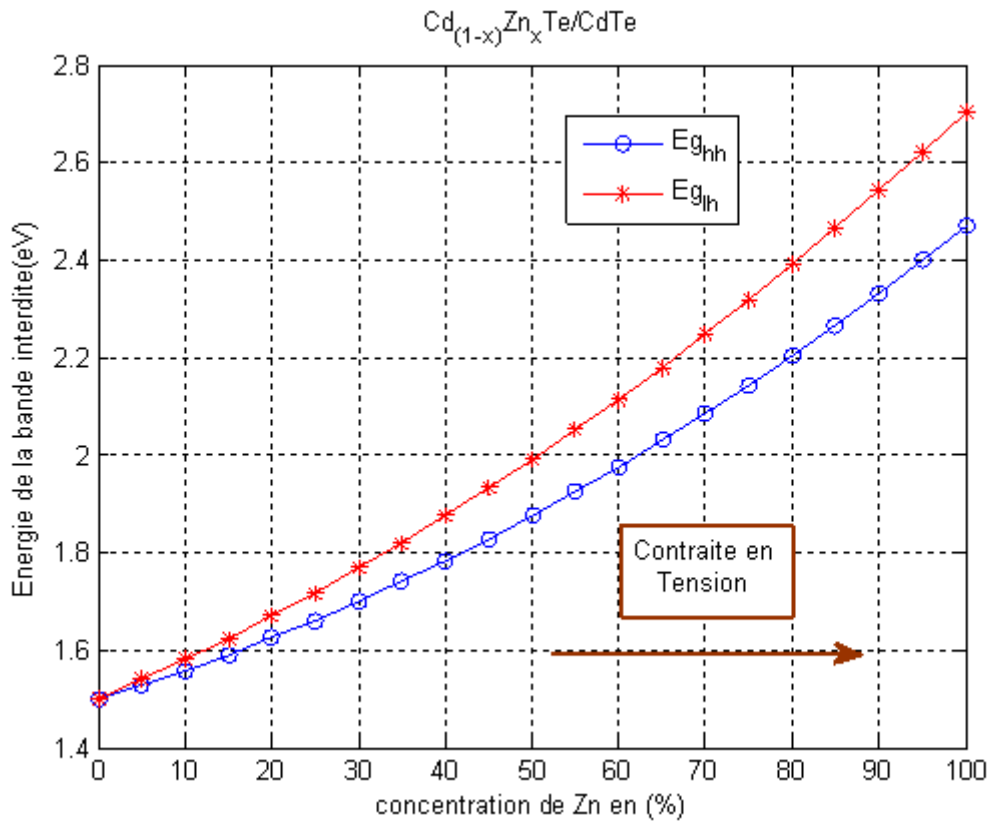


Figure 3. 8 Variation de l'énergie de bande interdite de la structure contrainte $Cd_{(1-x)}Zn_xTe / CdTe$ en fonction de la concentration de Zinc (x).

3.2.6 Effet de la contrainte sur le coefficient d'absorption

Pour voir l'effet de l'énergie E_{ph} et le Zinc sur le coefficient d'absorption de la structure $Cd_{(1-x)}Zn_xTe / CdTe$ nous avons varié x et E_{ph} dans l'équation (2.45). Cet effet est illustré dans la figure (3.9). Ce graphe peut être divisé en trois parties :

La première partie on a un coefficient d'absorption égale à zéro ($\alpha = 0$) parce que l'énergie E_{ph} est inférieur à l'énergie de la bande interdite de $Cd_{(1-x)}Zn_xTe$, donc il n'y a pas d'absorption.

La deuxième partie on a une augmentation très rapide du coefficient d'absorption car le E_{ph} est supérieur au Gap de l'alliage.

La troisième partie on a une saturation du coefficient d'absorption avec l'augmentation de E_{ph} car dans ce cas tous les électrons de la bande de valence sont excités par cette forte énergie incidente.

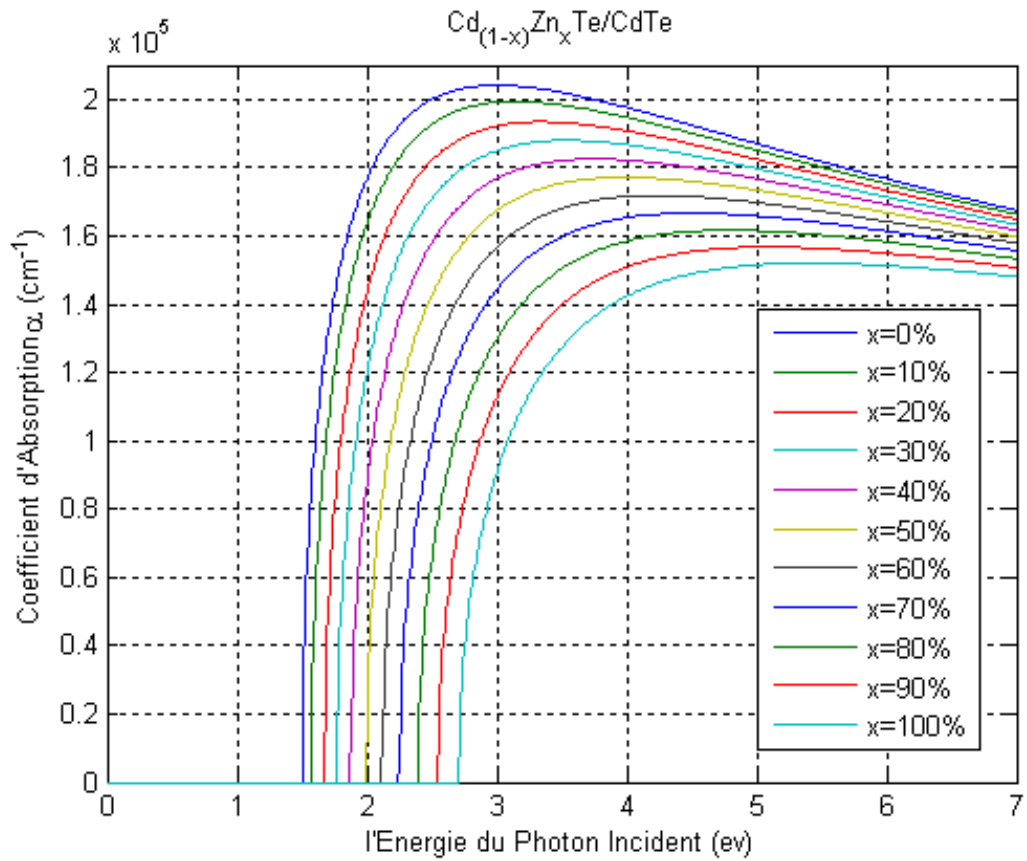


Figure 3. 9 Variation du coefficient d'absorption de la structure $Cd_{(1-x)}Zn_xTe/CdTe$ en fonction de l'énergie du photon incident.

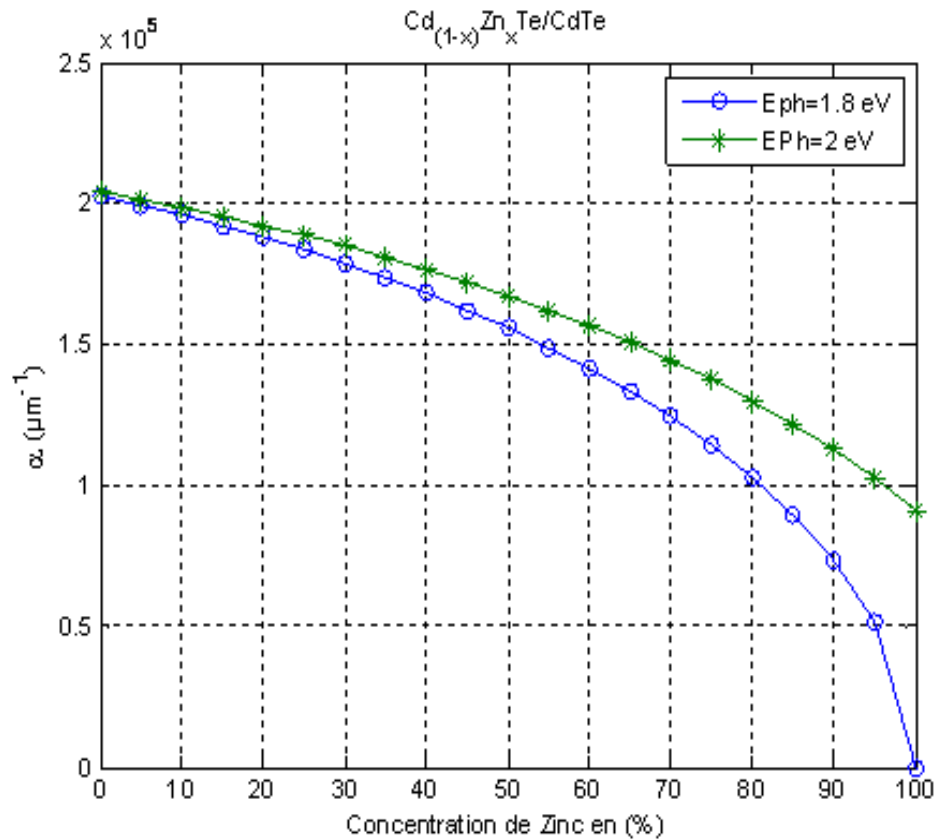


Figure 3. 10 L'effet de la contrainte sur le coefficient d'absorption de la structure $\text{Cd}_{(1-x)}\text{Zn}_x\text{Te}/\text{CdTe}$.

D'après la figure (3.10) nous remarquons que plus le pourcentage du Zn augmente plus le coefficient d'absorption diminue car le Gap de notre alliage devient important et les photons de faible énergie ne participent pas dans le processus d'absorption (excitation des électrons).

Aussi la diminution du coefficient d'absorption induit une réduction de nombre de photons absorbés par notre structure (Figure 3.11).

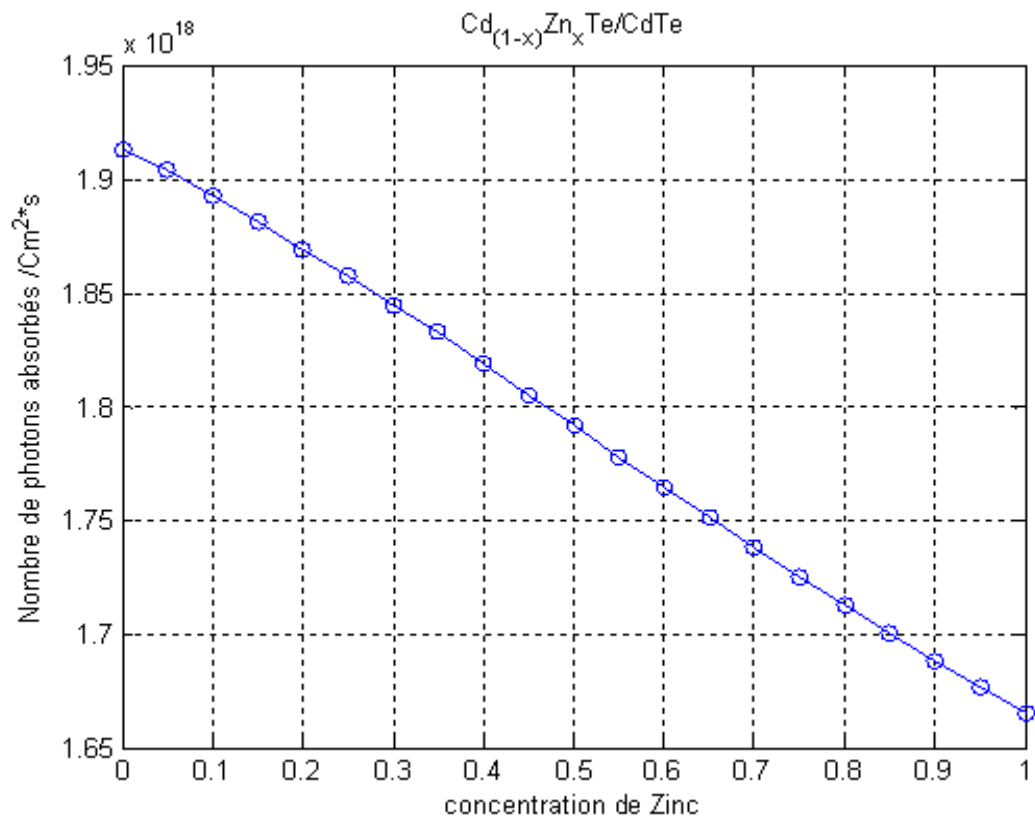


Figure3. 11 Variation du nombre de photons absorbés en fonction de la concentration en Zinc (x).

3.2.7 Le courant photo-généré

La figure (3.12) donne les résultats de simulation de l'équation (2.47) du courant photo-généré en fonction de la concentration de Zinc.

On constate que le courant photo-généré diminue avec l'augmentation du Zinc car l'intervalle d'absorption de la structure devient étroit à cause de l'élévation du Gap.

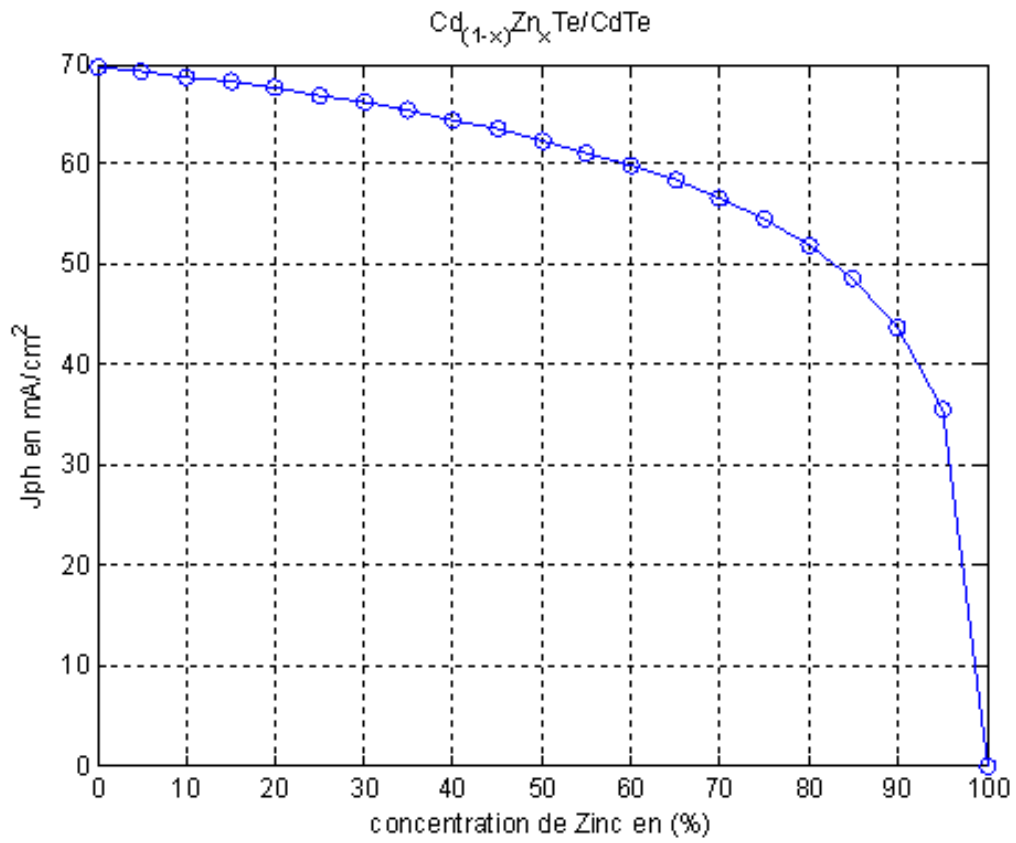


Figure3. 12 Variation du courant photo-généré en fonction de la concentration de Zinc (x).

3.2.8 Caractéristique courant tension

On observe dans la figure (3.13) qui donne la variation de la caractéristique courant tension $J(V)$ de la cellule solaire que plus la concentration de Zn augmente plus l'amplitude du courant diminue. Donc pour des fractions de x faibles le courant peut atteindre des valeurs élevées (environs $70 mA / Cm^2$).

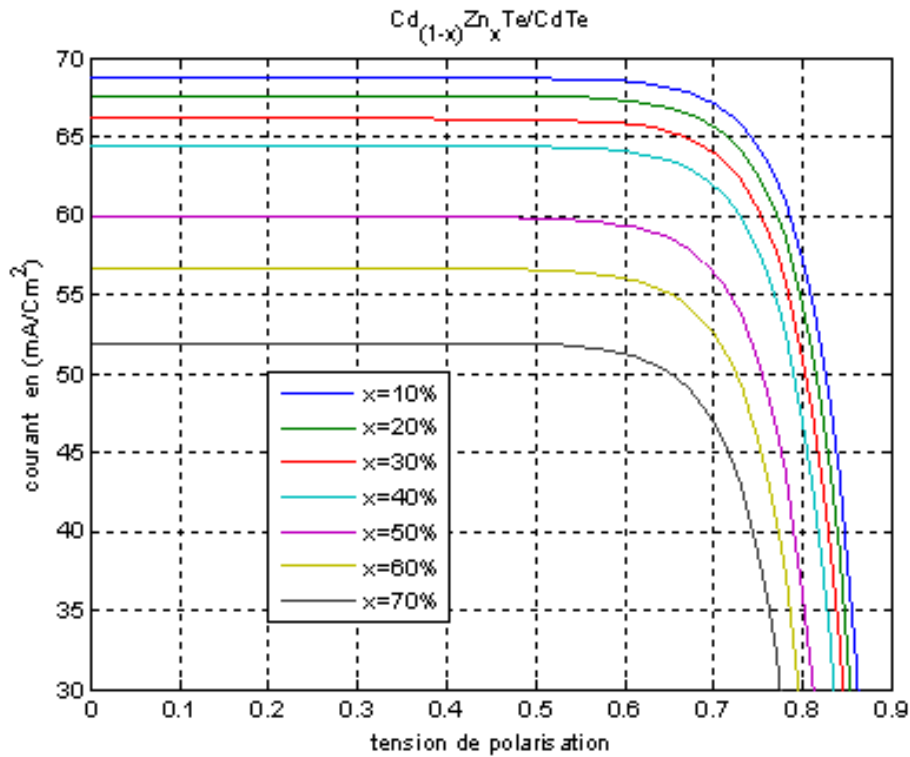


Figure 3. 13 Caractéristiques courant-tension pour plusieurs Concentrations de Zinc (x).

3.2.9 La puissance délivrée par la cellule étudiée

La puissance électrique disponible aux bornes d'une cellule solaire est donnée par la relation suivante : $P = V \times I$

Sur la figure (3.14) nous avons tracé l'évolution de la puissance en fonction de la tension de polarisation pour différentes concentrations de Zinc.

On constate que la puissance délivrée par la cellule décroît avec l'augmentation de la concentration de Zinc et cela est expliqué par la dégradation de la caractéristique courant-tension.

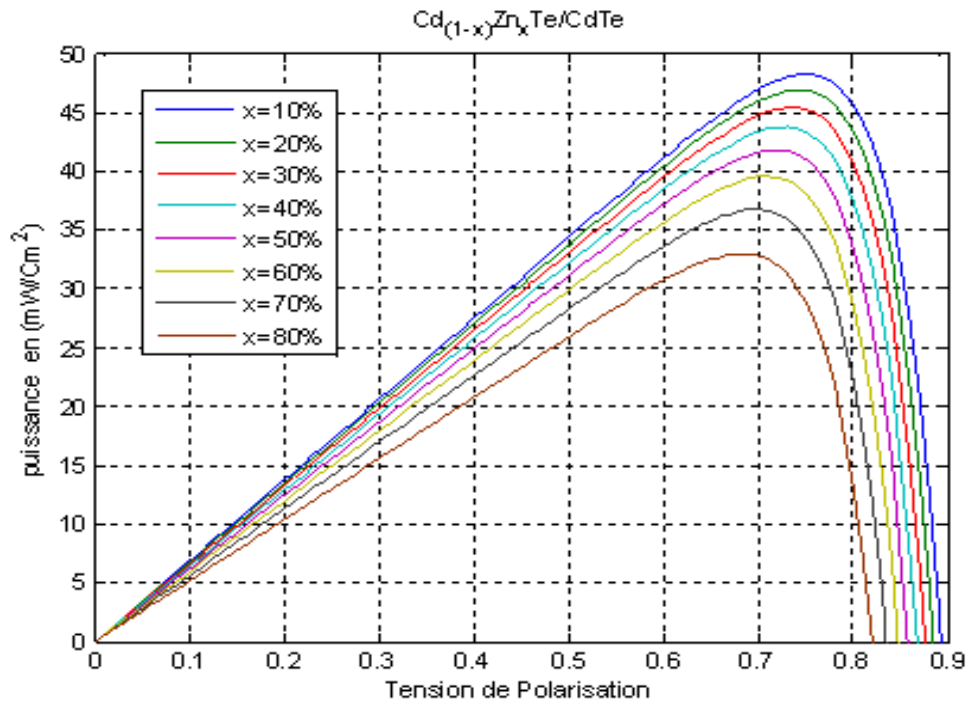


Figure 3. 14 Puissance délivrée par la cellule pour différentes concentrations de Zinc (x).

3.2.10 La puissance maximale

Nous avons tracé la variation de la puissance maximale en fonction de la concentration de Zinc (Figure 3.15) par le biais de la formule suivante :

$$P_{max} = I_{max} \times V_{max}$$

On remarque que la puissance est importante pour de faibles concentrations de Zinc, par ailleurs elle diminue pour les fortes concentrations car l'amplitude du courant (caractéristique courant tension) devient moins importante.

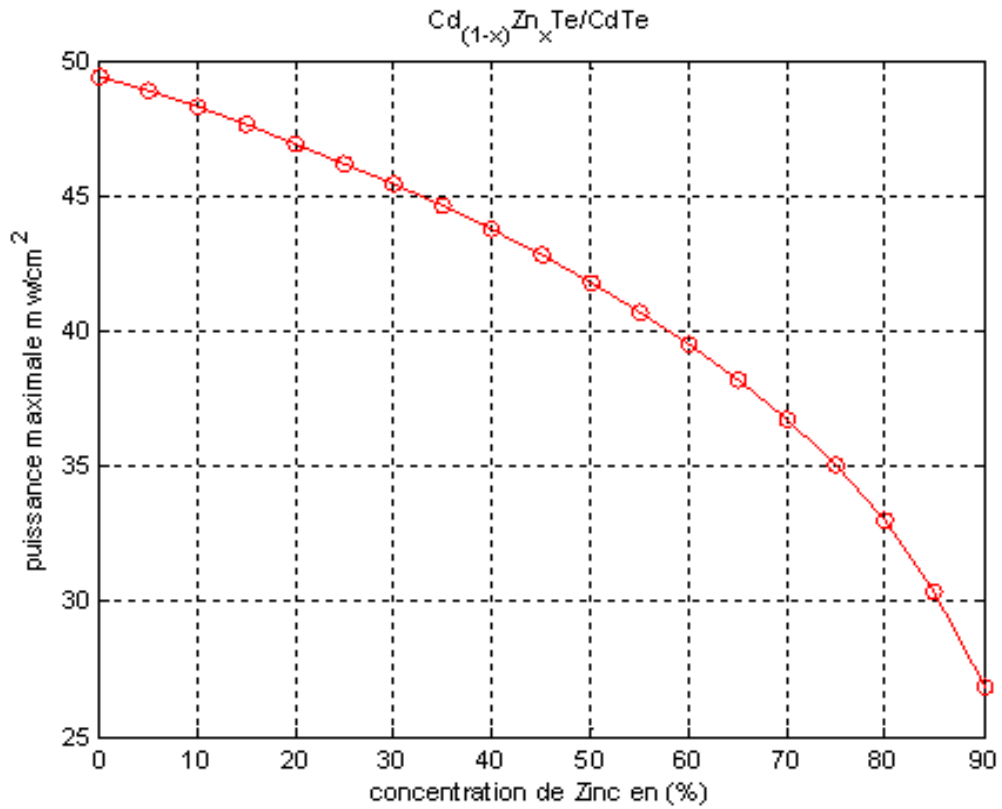


Figure 3. 15 Variation de la puissance maximale en fonction de la concentration en Zinc (x).

3.2.11 La tension de circuit ouvert V_{CO}

La figure (3.16) illustre la simulation de l'équation (2.57) de la tension de circuit ouvert V_{CO} en fonction de la concentration de Zinc. En effet l'incorporation de Zinc dans l'alliage induit une augmentation de la tension du circuit ouvert.

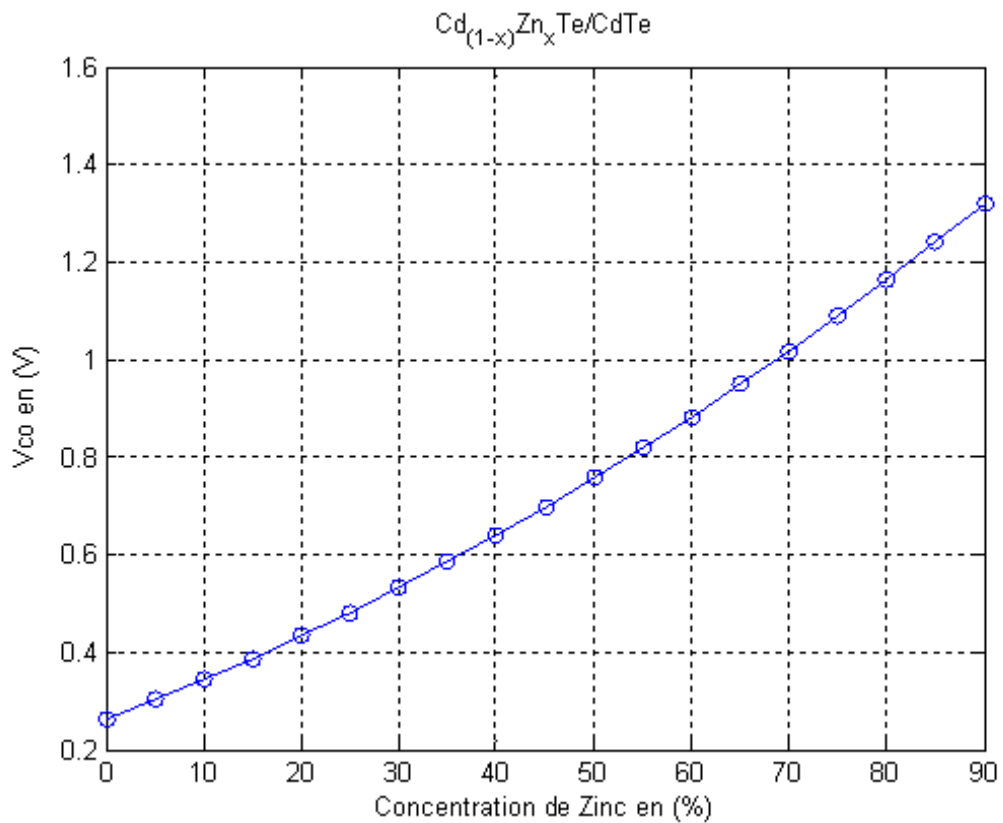


Figure3. 16 La tension du circuit ouvert en fonction de la concentration de Zinc (x).

3.2.12 Le facteur de forme FF

Le facteur de forme FF (filling factor) est le rapport entre la valeur maximale de la puissance P_{max} délivrée par la cellule solaire et le produit de courant de court circuit et la tension de circuit ouvert :

$$FF = \frac{V_M I_M}{V_{CO} I_{CC}}$$

La variation du facteur de forme en fonction de la concentration de Zinc est illustré dans la figure (3.17) elle montre une dégradation du facteur de forme à force d'augmenter La concentration de Zn , celà est dû à la diminution de la puissance maximale délivrée par la cellule.

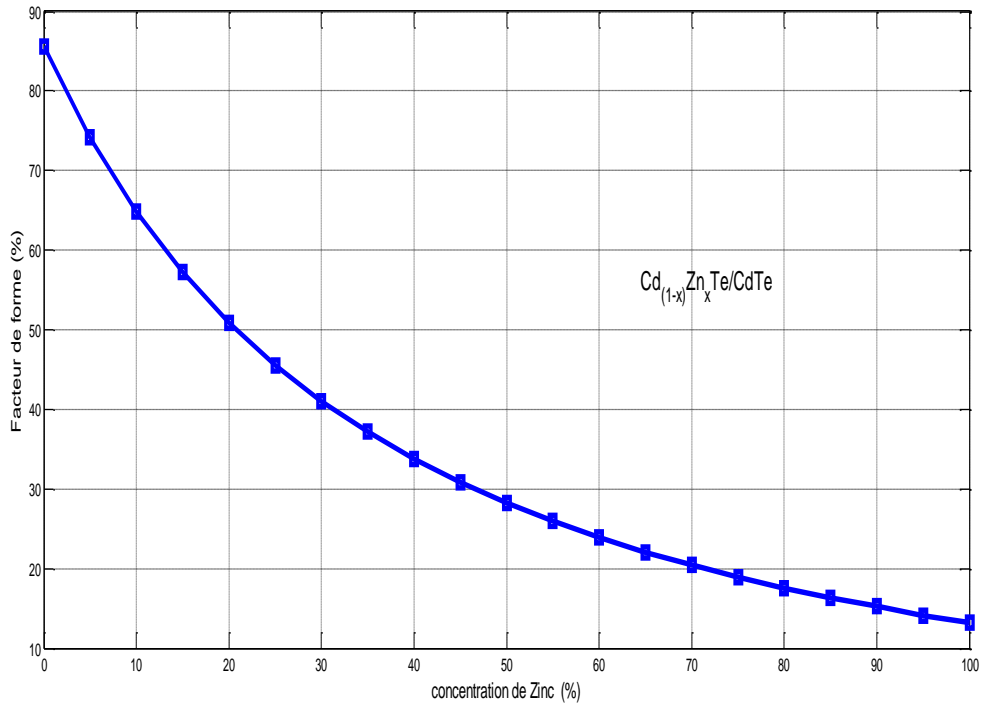


Figure3. 17 Variation du facteur de forme en fonction de la concentration de Zinc (x).

3.2.13 Le rendement

Le rendement η (efficiency) des cellules photovoltaïques désigne le rendement de conversion en puissance, c'est un paramètre essentiel dont la connaissance de sa valeur permet d'évaluer les performances de la cellule. Il est défini comme le rapport entre la puissance maximale délivrée par la cellule et la puissance solaire incidente P_i et il est calculé par l'équation suivante :

$$\eta = \frac{FF \cdot V_{CO} \cdot I_{CC}}{P_i}$$

P_i : Puissance d'éclairement incidente égale à 1 Watt/cm² (pour notre étude).

La figure (3.18) présente la simulation du rendement de conversion en fonction de la concentration de Zinc. L'augmentation de la densité de Zn entraîne une

diminution du rendement de conversion. Cela est expliqué par la réduction de la puissance délivrée par la cellule et le facteur de forme.

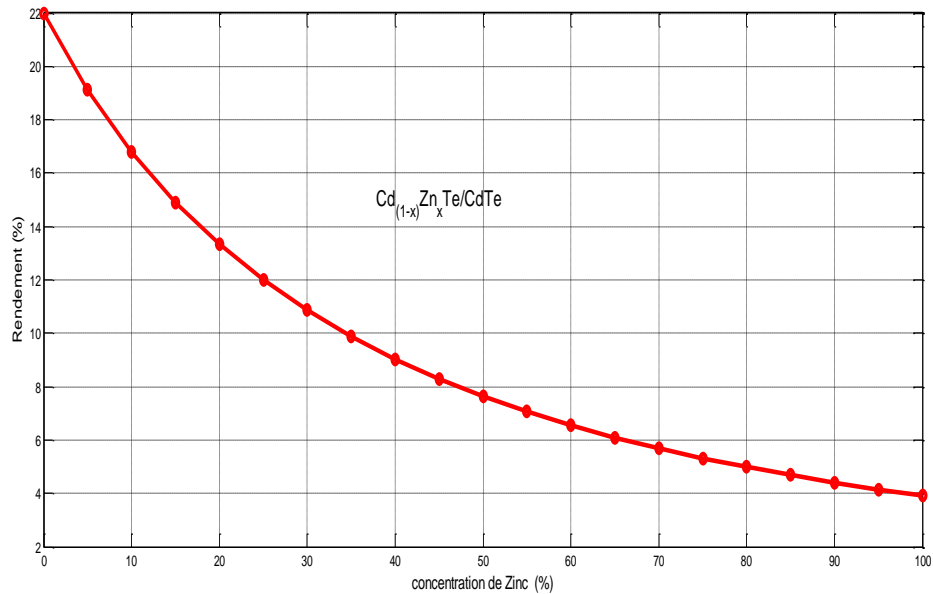


Figure3. 18 Le rendement de conversion en fonction de la concentration de Zinc (x).

3.3 Conclusion

Les principales conclusions que l'on peut tirer de ce chapitre sont :

- Le paramètre de maille diminue avec l'incorporation de Zinc dans $CdTe$, ainsi que l'alliage $Cd_{1-x}Zn_xTe$ épitaxié sur le substrat $CdTe$ est soumis à une contrainte en tension.

- La simulation qui donne la variation du Gap en fonction de la concentration en x de la densité de Zinc, montre que le Gap de l'alliage augmente avec l'augmentation de la concentration de Zinc, et avec l'augmentation de la température il diminue.

- L'évolution du Gap avec l'incorporation de Zinc dans l'alliage influe sur le coefficient d'absorption et la simulation qui a été présentée sur la figure (3.18) montre que la contrainte extensive diminue le coefficient d'absorption.

-D'après la simulation de l'équation de l'épaisseur critique et les remarques précédentes on peut conclure que la meilleure épaisseur pour l'alliage $Cd_{1-x}Zn_xTe$ épitaxié sur substrat de $CdTe$ est pour $x < 30\%$.

-L'augmentation de la concentration améliore la tension du circuit ouvert par contre elle diminue la puissance maximale délivré par la cellule qui influe sur les valeurs du facteur de forme (Filling Factor).

-Le rendement maximal obtenu avec cette hétérojonction $Cd_{1-x}Zn_xTe/CdTe$ est d'environ 22% pour des concentrations inférieures à 30%.

Conclusion générale

Dans le cadre de ce travail, nous avons étudié la structure d'une cellule photovoltaïque à base de semi-conducteurs II-VI $Cd_{1-x}Zn_xTe/CdTe$.

Dans le premier chapitre, nous avons présenté le principe de fonctionnement des cellules solaires et les différents facteurs de perte limitant le rendement de conversion.

Dans le deuxième chapitre nous avons présenté les différents paramètres électroniques et optiques de l'alliage $Cd_{1-x}Zn_xTe$.

Le matériau ternaire $Cd_{1-x}Zn_xTe$ se cristallise dans la structure zinc blende. Sa structure de bande lui permet des transitions verticales radiatives entre la bande de valence et la bande de conduction car c'est un matériau à Gap direct dont la gamme de la bande interdite varie de 1.50-2.26 eV.

Dans le troisième chapitre nous avons simulé les équations qui modélisent les paramètres cités auparavant et nous avons constaté que la variation du Gap du matériau $Cd_{1-x}Zn_xTe$ augmente relativement avec la concentration de Zinc. Cela ne permet pas d'absorber le maximum du spectre solaire mais pour des concentrations faibles de Zinc le matériau ternaire peut être important. L'alliage épitaxié $Cd_{1-x}Zn_xTe$ sur le substrat $CdTe$ est soumis à une contrainte extensive dans tout l'intervalle de x .

Les simulations des paramètres de la cellule solaire en fonction de la densité du Zinc dans l'alliage ont permis d'obtenir un rendement de conversion égal à 22%. Un rendement pareil rend cette structure utilisable et commercable.

Il est clair qu'une cellule à base de $CdZnTe$ a un rendement meilleur que celui du silicium. Mais la nature toxique du $CdTe$ réduit l'intervalle de leur exploitation dans ce domaine.

On peut également augmenter le rendement de cette structure en ajoutant d'autres couches supérieures pour augmenter l'absorption et absorber des photons de faible énergie , ou bien utiliser des cellules à puits quantiques.

A.1 Tableau périodique de Mendeleïev

TABLEAU PERIODIQUE DES ELEMENTS																	
MS © cours-pharmacie.com																	
<div style="display: flex; justify-content: space-between;"> <div style="width: 20%;"> <p>1 (IA)</p> <p>H</p> <p>Hydrogène</p> <p>3 6,941</p> <p>Li</p> <p>Lithium</p> <p>11 22,990</p> <p>Na</p> <p>Sodium</p> <p>19 39,098</p> <p>K</p> <p>Potassium</p> <p>37 85,468</p> <p>Rb</p> <p>Rubidium</p> <p>55 132,91</p> <p>Cs</p> <p>Césium</p> <p>87 (223)</p> <p>Fr</p> <p>Francium</p> </div> <div style="width: 20%;"> <p>2 (IIA)</p> <p>Be</p> <p>Béryllium</p> <p>12 24,305</p> <p>Mg</p> <p>Magnésium</p> <p>20 40,078</p> <p>Ca</p> <p>Calcium</p> <p>38 87,62</p> <p>Sr</p> <p>Strontium</p> <p>56 137,33</p> <p>Ba</p> <p>Baryum</p> <p>88 (226)</p> <p>Ra</p> <p>Radium</p> </div> <div style="width: 20%;"> <p>3 (IIIB)</p> <p>Sc</p> <p>Scandium</p> <p>41 88,906</p> <p>Y</p> <p>Yttrium</p> <p>72 178,49</p> <p>L</p> <p>Lanthanides</p> </div> <div style="width: 20%;"> <p>4 (IVB)</p> <p>Ti</p> <p>Titane</p> <p>40 91,224</p> <p>Zr</p> <p>Zirconium</p> <p>74 183,84</p> <p>Hf</p> <p>Hafnium</p> <p>104 (261)</p> <p>Rf</p> <p>Rutherfordium</p> </div> <div style="width: 20%;"> <p>5 (VB)</p> <p>V</p> <p>Vanadium</p> <p>41 92,906</p> <p>Nb</p> <p>Niobium</p> <p>73 180,95</p> <p>Ta</p> <p>Tantale</p> <p>105 (262)</p> <p>Db</p> <p>Dubnium</p> </div> <div style="width: 20%;"> <p>6 (VIB)</p> <p>Cr</p> <p>Chrome</p> <p>42 95,94</p> <p>Mn</p> <p>Manganèse</p> <p>43 (98)</p> <p>Tc</p> <p>Technétium</p> <p>75 186,21</p> <p>Sg</p> <p>Seaborgium</p> </div> <div style="width: 20%;"> <p>7 (VIIB)</p> <p>Mn</p> <p>Manganèse</p> <p>43 (98)</p> <p>Tc</p> <p>Technétium</p> <p>75 186,21</p> <p>Rh</p> <p>Rhénium</p> <p>107 (264)</p> <p>Bh</p> <p>Bohrium</p> </div> <div style="width: 20%;"> <p>8-9-10 (VIII)</p> <p>Fe</p> <p>Fer</p> <p>26 55,845</p> <p>Ru</p> <p>Ruthénium</p> <p>76 190,23</p> <p>Hs</p> <p>Hassium</p> </div> <div style="width: 20%;"> <p>11 (IB)</p> <p>Cu</p> <p>Cuivre</p> <p>29 63,546</p> <p>Ag</p> <p>Argent</p> <p>79 196,97</p> <p>Au</p> <p>Or</p> <p>111 (272)</p> <p>Uue</p> <p>Ununennium</p> </div> <div style="width: 20%;"> <p>12 (IIB)</p> <p>Zn</p> <p>Zinc</p> <p>30 65,39</p> <p>Cd</p> <p>Cadmium</p> <p>80 200,59</p> <p>Hg</p> <p>Mercur</p> <p>112 (285)</p> <p>Uub</p> <p>Ununbium</p> </div> <div style="width: 20%;"> <p>13 (IIIA)</p> <p>B</p> <p>Bore</p> <p>5 10,811</p> <p>Al</p> <p>Aluminium</p> <p>13 26,982</p> <p>Ga</p> <p>Gallium</p> <p>31 69,723</p> <p>In</p> <p>Indium</p> <p>49 114,82</p> <p>Tl</p> <p>Thallium</p> <p>81 204,38</p> </div> <div style="width: 20%;"> <p>14 (IVA)</p> <p>C</p> <p>Carbone</p> <p>6 12,011</p> <p>Si</p> <p>Silicium</p> <p>14 28,086</p> <p>Ge</p> <p>Germanium</p> <p>32 72,64</p> <p>Sn</p> <p>Etain</p> <p>50 118,71</p> <p>Pb</p> <p>Plomb</p> <p>82 207,2</p> </div> <div style="width: 20%;"> <p>15 (VA)</p> <p>N</p> <p>Azote</p> <p>7 14,007</p> <p>P</p> <p>Phosphore</p> <p>15 30,974</p> <p>As</p> <p>Arsenic</p> <p>33 74,922</p> <p>Sb</p> <p>Antimoine</p> <p>51 121,76</p> <p>Bi</p> <p>Bismuth</p> <p>83 208,98</p> </div> <div style="width: 20%;"> <p>16 (VIA)</p> <p>O</p> <p>Oxygène</p> <p>8 15,999</p> <p>S</p> <p>Soufre</p> <p>16 32,065</p> <p>Se</p> <p>Sélénium</p> <p>34 78,96</p> <p>Te</p> <p>Tellure</p> <p>52 127,60</p> <p>Po</p> <p>Polonium</p> <p>84 (209)</p> </div> <div style="width: 20%;"> <p>17 (VIIA)</p> <p>F</p> <p>Fluor</p> <p>9 18,998</p> <p>Cl</p> <p>Chlore</p> <p>17 35,453</p> <p>Br</p> <p>Brome</p> <p>35 79,904</p> <p>I</p> <p>Iode</p> <p>53 (210)</p> <p>At</p> <p>Astato</p> </div> <div style="width: 20%;"> <p>18 (VIIIA)</p> <p>He</p> <p>Hélium</p> <p>2 4,0026</p> <p>Ne</p> <p>Néon</p> <p>10 20,180</p> <p>Ar</p> <p>Argon</p> <p>18 39,948</p> <p>Kr</p> <p>Krypton</p> <p>36 83,80</p> <p>Xe</p> <p>Xénon</p> <p>54 131,29</p> <p>Rn</p> <p>Radon</p> <p>86 (222)</p> <p>Uuo</p> <p>Ununoctium</p> </div> </div>																	
<p>ÉTAT PHYSIQUES DES ELEMENTS (100°C; 101 kPa) :</p> <p>He - Gaz Fe - Solide</p> <p>Hg - Liquide Uu - Synthétique</p>																	
<p>Numéro atomique Masse molaire atomique relative</p> <p>↑ ↑</p> <p>Nom de l'élément Symbole</p>																	
<p>1 (IA) 2 (IIA) 3 (IIIB) 4 (IVB) 5 (VB) 6 (VIB) 7 (VIIB) 8-9-10 (VIII) 11 (IB) 12 (IIB) 13 (IIIA) 14 (IVA) 15 (VA) 16 (VIA) 17 (VIIA) 18 (VIIIA)</p>																	
<p>LANTHANIDES 57-71 ACTINIDES 89-103</p>																	

Pour les éléments qui n'ont pas de nucléides stables, la valeur entre parenthèse indique le nombre de masse de l'isotope de l'élément ayant la durée de vie la plus grande.

Figure A. 1 Tableau périodique de Mendeleïev.

A.2 L'épitaxie

L'étymologie du terme épitaxie vient du grec épi qui signifie « dessus » et taxis qui signifie « ordonnée ». Le principe est donc, partant de la surface d'un cristal par définition parfaitement ordonnée, d'amener et ordonner sur cette surface les atomes constitutifs du matériau à faire croître afin d'en assurer une croissance progressive couche atomique après couche atomique. Le matériau obtenu présentera ainsi une structure monocristalline, de même orientation que le substrat initial.

La nature du film épitaxié par rapport à celle du substrat détermine le type d'épitaxie : Il existe principalement 3 types de méthodes expérimentales.

- l'épitaxie par jet moléculaire, EJM ou MBE (Molecular Beam Epitaxy).
- l'épitaxie en phase liquide, EPL ou LPE (Liquid Phase Epitaxy).
- l'épitaxie en phase vapeur, CVD ou VPE (Vapor Phase Epitaxy).

A.3 Caractéristique des matériaux massifs

Il est nécessaire de connaître un certain nombre de paramètres physiques caractéristiques des matériaux utilisés dans cette thèse. Ces paramètres sont tirés des références et récapitulés pour les principaux binaires dans le tableau ci-dessous.

<i>Les paramètres</i>	<i>CdTe</i>	<i>ZnTe</i>
$a(A^\circ)$ [14]	6.4810	6.1037
$\Delta_{so}(eV)$ [14]	0.90	0.91
E_g à 300°K (eV) [14]	1.50	1.26
E_g à 0°K (eV) [14]	1.606	2.394
$C_{11}(10^{11}dyn/cm^2)$ [31]	5.35	7.15
$C_{12}(10^{11}dyn/cm^2)$ [31]	3.69	4.0
$N_C (cm^{-3})$ [37]	7.8×10^{17}	10^{16}
$N_V (cm^{-3})$ [37]	1.8×10^{19}	10^{17}
$a_v(eV)$ [31]	0.55	0.79
$a_c(eV)$ [31]	-3.96	-5.83
$\Phi(eV)$ [30]	5.76	5.73
$\chi(eV)$ [30]	4.28	3.50
$b(eV)$ [31]	-1.0	-1.4
ϵ_r [14]	10.6	9.7

Tableau A. 1 Paramètres physiques fondamentaux des binaires *CdTe* et *ZnTe*.

Pour les alliages ternaires, les paramètres a , Δ_{SO} , C_{11} , C_{12} , a_v , a_c et b sont déterminés à partir de la relation de la loi de Végard (interpolation).

Bibliographie

- [1] Bailly, L., "Cellules photovoltaïques organiques souples à grande surface", Université Bordeaux I, (2010).
- [2] Bouraoui, A., "Elaboration et Caractérisation des Couches minces CuInSe₂ par Electrodeposition", Université Mentouri, Constantin (2009).
- [3] Bordel, D., "Développement de Nouveaux Substrats", Ecole Centrale de Lyon (2007)
- [4] Tahanout, C., "Etude, simulation électrothermique d'un Micro Capteur de gaz à base d'oxyde semi-conducteur", Université M'hamed Bougara-Boumerdes, (2010).
- [5] Rahal, F., "Etude comparative des couches minces de TiO₂ à la conception des cellules photovoltaïques obtenues par différentes méthodes", Université de M'sila, (2009).
- [6] Hamada, H., "circuits électroniques", OPU, (1993)
- [7] Benahmed, N., " Propriétés physiques des semi-conducteurs (Si monocristallin et Ge) et Simulation des cellules solaires à base de Si et SiGe", Université Aboubakr Blkaid-Telemcen, (2006).
- [8] Mathieu, H., "Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques", Masson, Paris, (1996).
- [9] I. Sari-Ali, B. Benyoucef, B. Chikh-Bled., "Etude de la jonction PN d'un semi-conducteur à l'équilibre thermodynamique", Journal of Electron Devices, Vol. 5, pp. 122-126,(2007).

- [10] Akassewa Tchapo , S., "Système d'alimentation photovoltaïque avec stockage hybride pour l'habitat énergétiquement autonome", Université Henri Poincaré, NancyI, (2010).
- [11] Benmachiche, S., " Etude des paramètres limitant le rendement d'une photopile à base d'une structure MIS", Université Hadj Lakhdar-Batna, (2009).
- [12] Thibaut, D., "Développement de cellules photovoltaïques à hétérojonctions silicium et contacts en face arrière", Institut National des Sciences Appliquées de Lyon ,(2009).
- [13] Madani, M., "Réalisation des couches antireflets dans les cellules solaires à couches minces", Université Aboubakr Blkaid-Telemcen, (2006).
- [14] Oleksiy, N., " simulation,Fabrication et analyse de cellules photovoltaïques à contacts arriérés interagîtes ", Institut national des science appliqués de Lyon, (2005).
- [15] Lakehal, B., " Etude des propriétés électriques d'une photopile à base d'une structure Schottky", Université de Batna, (2009).
- [16] Soga, T., "Nanostructured Materials for Solar Energy Conversion", Elsevier, Nagoya, Japan, (First Edition 2006).
- [17] hamaguchi, c., "Basic Semiconductor Physics", Springer Heidelberg Dordrecht London New York, (Second Edition 2010).
- [18] Lelievre, J.-F., "Elaboration de SiNx:H par PECVD: Optemisation des Propriétés Optiques, Passivantes et Structurales pour Applications Photovoltaïques", Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, (2007).
- [19] Abdo, F., "Croissance des Couches minces de Silicium par Epitaxie en Phase Liquide à basse Température pour Applications Photovoltaïques", Institut National des Science Appliquées de Lyon, (2007).
- [20] Damon-Lacoste, J., "Vers une Ingénierie de Bandes des Cellules Solaires à Hétérojonctions a-Si:h/c-Si. Rôle Prépondérant de l'Hydrogène",Ecole Polytechnique,Paris, (2007).

- [21] Silvestre, I. C., "Modelling Photovoltaic Systems Using Pspice" Universidad Politecnica de Catalunya, barcelona, john wiley & sons, ltd, spain, (2002).
- [22] H. Bellakhder, A. Outzourhit et E.L. Ameziane., "Etude des Multicouches Zn/Te/Zn ... Déposées par Pulvérisation Cathodique Radiofréquence", Rev. Energ. Ren. Vol. 2 131-139, Maroc, (1999).
- [23] Foundation, W. (2010, octobre 12). "Fichier: Mendeleïev.jpg". Consulté le juin 11, 2012, sur [www.wikipedia.org: www.wikipedia.org/wiki/fichier:Mendeleïev.jpg](http://www.wikipedia.org/wiki/fichier:Mendeleïev.jpg)
- [24] Boukroune, R., "Élaboration et caractérisation de films de polystyrène dopés par des nanocristaux du semi-conducteur ZnS", Université Mentouri Constantine, (2008).
- [25] Najjar, R., "Epitaxie de semi-conducteurs II-VI : ZnTe/ZnSe et CdTe:Se Etude du comportement électronique de type-II et du dopage isoélectronique", Université Joseph Fourier-Grenoble I, (2008).
- [26] Alirol, O., "Simulation d'un détecteur CdTe:Cl de rayonnement X en mode comptage à fort flux pour la radiographie et la tomographie", Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, (2010).
- [27] Tinjoux, F., "Mécanismes de formation des boîtes quantiques semi-conductrices, application aux nanostructures II-VI et étude de leurs propriétés optiques", Université Joseph Fourier – Grenoble I, (2003).
- [28] Salmi, L., "Caractérisation des états d'interfaces des joints de grains dans CdTe", Université Mentouri – Constantine, (2006).
- [29] Saleh, A., "Caractérisation en impulsions étroites et modélisation de transistors bipolaires à hétérojonction en technologie InP", Université de Limoges, (2009).
- [30] Mathieu, H., "Physique des Semiconducteurs et des Composants Electronique", Masson, paris, (1998).
- [31] Castafier, T. M., "Solar Cells: Materials Manufacture and Operation", Elsevier, (2005).

- [32] Arnoult, A ., "Dopage par modulation d'hétérostructures de semiconducteurs II-VI semimagnétiques en épitaxie par jets moléculaires", Université Joseph Fourier, (1998).
- [33] Bestam, R., " Modélisation et simulation d'une structure à de semiconducteur III-V pour le photovoltaïque", Université Saad Dahleb-Blida , (2011).
- [34] K. Koksai, B. G., « Critical Layer Thickness of GaIn(n)As(sb) qws on GaAs and InP Substrates for (001) and (111) Orientations ». the European Physical Journal, (5 may 2009), 211–218.
- [35] Navarro,J., "Cellules Photovoltaïques Organiques Transparentes Dans Le Visible", Université de Toulouse, (2008).
- [36] Ouddah , M., "Etude du Silicium Poreux Destine aux Cellules Solaires", Université Mentouri Constantine, (2009).
- [37] M. A. Islam, Y, Sulaiman, Nowshadn. A, "Comparative study of BSF layers for ultra-thin CdS:O/CdTe solar cells", University of Malaysia Vol. 8, No. 2, p. 65 – 75 , (2011).

